Ann. Henri Poincaré 9 (2008), 329–346

1424-0637/020329–18, *published online* April 10, 2008
DOI 10.1007/s00023-008-0357-9

Annales Henri Poincaré

Principe d'Incertitude et Positivité des Opérateurs à Trace ; Applications aux Opérateurs Densité

Maurice de Gosson et Franz Luef

Résumé. Nous discutons une condition nécessaire (mais non suffisante en général) pour qu'un opérateur à trace auto-adjoint soit positif. Ceci nous permet d'énoncer une relation entre l'opérateur de densité et la notion de cellule quantique symplectique introduite dans un travail précédent. Nous appliquons également le principe d'incertitude de Hardy à l'étude des majorations de la distribution de Wigner par des gaussiennes ; ceci nous permet de retrouver très simplement le fait que la transformée de Wigner d'une fonction de carré intégrable ne peut être à support compact.

Abstract. We discuss a necessary (but generally not sufficient) condition for a self-adjoint trace-class operator to be positive. This allows us to state a relation between density operators and the notion of symplectic quantum cell introduced in a previous work. We also apply Hardy's uncertainty principle to Gaussian estimates for the Wigner distribution. This allows us to recover in a very simple way the fact that the Wigner transform of a square integrable function cannot have compact support.

1. Introduction

Dans un article précédent [5] l'un d'entre nous (MdG) a étudié de manière précise la relation entre la positivité des transformées de Wigner et de Husimi et la notion de cellule quantique (une cellule quantique est l'image d'une boule de rayon $\sqrt{\hbar}$ dans $\mathbb{R}^{2n}$ par un automorphisme symplectique de $\mathbb{R}^{2n}$; $\hbar$ est la constante de Planck divisée par 2π). Dans cet article ces résultats sont reformulés en termes

Les auteurs de cet article ont été financés par le projet Eucetifa MEXT-CT-2004-517154 de l'Union Européenne.

de la notion topologique de *capacité symplectique*, qui permet d'énoncer le principe d'incertitude de la mécanique quantique de manière concise et invariante par symplectomorphismes. Dans cet article-ci, qui constitue une suite naturelle de [5], nous étendons cette étude au cas plus général des opérateurs densité, qui sont des opérateurs positifs à trace unité. Outre leur intérêt intrinsèque, ces opérateurs jouent un rôle important en mécanique quantique où ils représentent les »états mixtes« mélanges statistiques d'états bien déterminés (les »états purs«). Nous prouverons, entre autres, les propriétés suivantes :

- Si $\Sigma_{\widehat{\rho}}$ est la matrice des covariances d'un opérateur densité $\widehat{\rho}$ alors l'ellipsoïde de Wigner associée
$$W_{\Sigma_{\widehat{\rho}}} : \frac{1}{2}\left\langle \Sigma_{\widehat{\rho}}^{-1} z, z \right\rangle \leq 1$$
doit contenir une cellule quantique (de manière équivalente, la capacité symplectique de cette ellipsoïde est au moins égale à $1/2h$) ; si la distribution de Wigner de $\widehat{\rho}$ est une gaussienne, alors cette condition est également suffisante.
- Nous donnons une application originale du principe d'incertitude de Hardy en montrant que si, réciproquement, la distribution de Wigner de $\widehat{\rho}$ satisfait une majoration
$$\rho(z) \leq Ce^{-\frac{1}{2}\langle \Sigma^{-1} z, z\rangle}$$
avec $C > 0$, $\Sigma > 0$ alors l'ellipsoïde
$$W_{\Sigma} : \frac{1}{2}\left\langle \Sigma^{-1} z, z \right\rangle \leq 1$$
doit contenir une cellule quantique. (Une conséquence de cette propriété est la propriété connue que le support d'une distribution de Wigner n'est jamais compact).

Notations. La forme symplectique standard sur $\mathbb{R}^{2n} \equiv \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ est définie par $\sigma(z, z') = \langle p, x'\rangle - \langle p', x\rangle$ si $= (x, p)$, $z' = (x', p')$ ($\langle \cdot\,, \cdot \rangle$ désignera toujours le produit scalaire euclidien sur les espaces $\mathbb{R}^m$; la norme associée sera notée $|\cdot|$). On notera par $\mathrm{Sp}(n)$ le groupe symplectique de $(\mathbb{R}^{2n}, \sigma)$: $S \in \mathrm{Sp}(n)$ si et seulement si S est un automorphisme de $\mathbb{R}^{2n}$ tel que $\sigma(Sz, Sz') = \sigma(z, z')$ pour tous z, z'. Soit
$$J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} ;$$
on a alors $\sigma(z, z') = \langle Jz, z'\rangle$ et $S \in \mathrm{Sp}(n)$ si et seulement si $S^T JS = SJS^T = J$. On notera $\mathrm{Mp}(n)$ le groupe métaplectique de $\mathrm{Sp}(n)$: c'est la représentation unitaire dans $L^2(\mathbb{R}^n)$ du revêtement à deux feuillets de $\mathrm{Sp}(n)$; la projection $\pi : \mathrm{Mp}(n) \longrightarrow \mathrm{Sp}(n)$ est notée $\widehat{S} \longmapsto S$. La transformation de Fourier unitaire F est définie par
$$F\psi(p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i}{\hbar}\langle p,x\rangle}\psi(x)dx$$
pour $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$.

2. Rappels et préliminaires

Nous donnons dans cette section une rapide revue des principales propriétés des opérateurs à trace dont nous aurons besoin ; nous rappelons aussi un résultat ancien (et malheureusement, semble-t-il, peu connu) de Kastler [11] sur la relation entre la positivité des opérateurs à trace et la notion de fonction de type $\hbar$-positif (voir aussi Loupias et Miracle-Sole [14, 15]).

2.1. Opérateurs à trace

Soit un espace de Hilbert séparable $\mathcal{H}$ et $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ l'algèbre normée des opérateurs continus $\mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$. Un opérateur $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ est de Hilbert–Schmidt si pour une (et donc toutes) base othonormée (ψ_j) de $\mathcal{H}$ on a $\sum_j ||A\psi_j||^2_{\mathcal{H}} < \infty$. Les opérateurs de Hilbert–Schmidt forment une sous-algèbre $\mathcal{L}_{\mathrm{HS}}(\mathcal{H})$ de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Lorsque $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$ les opérateurs de Hilbert–Schmidt sont précisément ceux dont le noyau est de carré intégrable :

$$A\phi(x) = \int_{\mathbb{R}^n} K_A(x,y)\phi(y)dy\,, \quad K_A \in L^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)\,;$$

en particulier un tel opérateur est compact. Définissant le symbole a de $A \in \mathcal{L}_{\mathrm{HS}}(L^2(\mathbb{R}^n))$ par la formule

$$a(z) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i}{\hbar}\langle p,y\rangle} K_A\left(x + \frac{1}{2}y, x - \frac{1}{2}y\right) dy \tag{1}$$

c'est-à-dire

$$K_A(x,y) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{i}{\hbar}\langle p,x-y\rangle} a\left(\frac{1}{2}(x+y), p\right) dp \tag{2}$$

on a $||a||_{L^2} = (2\pi\hbar)^{n/2}||K_A||_{L^2}$. De manière équivalente, pour $\psi \in L^2(\mathbb{R}^2)$,

$$A\psi(x) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int_{\mathbb{R}^{2n}} a_\sigma(z_0)\widehat{T}(z_0)\psi(x)dz_0 \tag{3}$$

où a_σ est la transformée de Fourier symplectique de a :

$$a_\sigma(z) = Fa(-Jz) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\frac{i}{\hbar}\sigma(z,z')} a(z')dz'\,. \tag{4}$$

et, avec $z_0 = (x_0, p_0)$,

$$\widehat{T}(z_0)\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}(\langle p_0,x\rangle - \frac{1}{2}\langle p_0,x_0\rangle)}\psi(x - x_0) \tag{5}$$

($\widehat{T}(z_0)$ est l'opérateur de Heisenberg–Weyl usuel). Évidemment $||a_\sigma||_{L^2} = ||a||_{L^2}$. En résumé :

On a $A \in \mathcal{L}_{\mathrm{HS}}(L^2(\mathbb{R}^n))$ si et seulement si l'une des trois conditions équivalentes est satisfaite :

(i) $K_A \in L^2(\mathbb{R}^{2n})$, *(ii)* $a \in L^2(\mathbb{R}^{2n})$, *(iii)* $a_\sigma \in L^2(\mathbb{R}^{2n})$.

Soit un opérateur *positif* $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. On définit la trace de A par la formule

$$\operatorname{Tr}(A) = \sum_i (A\psi_j, \psi_j)_{\mathcal{H}}$$

où (ψ_j) est une base orthonormée de $\mathcal{H}$ (voir [22, 23]). On a $\operatorname{Tr}(A) \in \mathbb{R}_+$ ou bien $\operatorname{Tr}(A) = \infty$. Dans les deux cas, $\operatorname{Tr}(A)$ ne dépend pas du choix de la base orthonormée (ψ_j) (voir Reed et Simon [22]). On dit que A est »à trace« si on a $\operatorname{Tr}(|A|) < \infty$. Les opérateurs à trace forment une sous-algèbre $\mathcal{L}_{\mathrm{Tr}}(\mathcal{H})$ de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ et l'on a $\operatorname{Tr}(A + B) = \operatorname{Tr}(A) + \operatorname{Tr}(B)$, $\operatorname{Tr}(\lambda A) = \lambda \operatorname{Tr}(A)$ pour $\lambda \in \mathbb{C}$, ainsi que $\operatorname{Tr}(AB) = \operatorname{Tr}(BA)$. Les opérateurs à trace sont en particulier des opérateurs *compacts*. Une propriété caractéristique est :

> *On a* $A \in \mathcal{L}_{\mathrm{Tr}}(\mathcal{H})$ *si et seulement si* $A = BC^*$ *avec* $B, C \in \mathcal{L}_{\mathrm{HS}}(\mathcal{H})$ *; si* A *est en outre positif il existe* $B \in \mathcal{L}_{\mathrm{HS}}(\mathcal{H})$ *tel que* $A = BB^*$ (ou B^*B).

Supposons de nouveau $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$. Alors A est un opérateur à trace sur $L^2(\mathbb{R}^n)$ si et seulement si il existe $b_\sigma, c_\sigma \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tels que $a_\sigma = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n b_\sigma \widetilde{*} \overline{c_\sigma}$ où $\widetilde{*}$ est la »convolution gauche«, définie par

$$(b_\sigma \widetilde{*} \overline{c_\sigma})(z) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\frac{i}{2\hbar}\sigma(z,z')} b_\sigma(z') \overline{c_\sigma(z - z')} dz' . \tag{6}$$

En termes des symboles a, b, c cette formule s'écrit :

$$a(z) = \left(\tfrac{1}{4\pi\hbar}\right)^{2n} \iint_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} e^{\frac{i}{2\hbar}\sigma(u,v)} b\left(z + \frac{1}{2}u\right) c\left(z - \frac{1}{2}v\right) du dv . \tag{7}$$

Notons que l'on a :

$$\operatorname{Tr}(A) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int_{\mathbb{R}^{2n}} b_\sigma(z) \overline{c_\sigma(-z)} dz = a_\sigma(0) \tag{8}$$

ainsi que

$$\operatorname{Tr}(A) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int_{\mathbb{R}^{2n}} b(z) \overline{c(z)} dz = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int a(z) dz \tag{9}$$

(voir Grossmann et al. [7] et Loupias et Miracle-Sole [14,15] ; voir aussi la pertinente discussion de Reed et Simon [22] sur la validité des »formules de trace« en général).

2.2. Fonctions de type $\hbar$-positif

Soit f une fonction sur $\mathbb{R}^{2n}$, à valeurs complexes. Suivant Kastler [11] nous dirons que f est de *type* $\hbar$*-positif* si pour tout entier $m \geq 1$ et tout $(z_1, \ldots, z_m) \in (\mathbb{R}^{2n})^m$ la matrice $F = (F_{jk}(z_j, z_k))_{1 \leq j,k \leq m}$ avec

$$F_{jk}(z_j, z_k) = e^{-\frac{i}{2\hbar}\sigma(z_j,z_k)} f(z_j - z_k)$$

est telle que $F \geq 0$. On montre que toute fonction continue de type $\hbar$-positif est de carré intégrable (Loupias et Miracle-Sole [14], Th. 4). L'intérêt de cette notion provient du résultat suivant :

Proposition 1. *Soit A un opérateur à trace sur $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$. On a $A \geq 0$ si et seulement si la transformée de Fourier symplectique a_σ du symbole a de A est de type $\hbar$-positif.*

Cette propriété est en un sens l'analogue »quantique« du théorème bien connu de Bochner (voir Katznelson [12], p. 137) qui dit qu'une fonction définie sur $\mathbb{R}$ est la transformée de Fourier–Stieltjes d'une mesure positive si et seulement si elle est continue et de type positif. La démonstration de la Proposition 1 se trouve dans Kastler [11] (voir aussi Loupias et Miracle-Sole [14]). Notons que Narcowich et O'Connell en donnent dans [21] une justification heuristique (mais qui peut facilement être adaptée de manière à en faire une démonstration rigoureuse).

Nous aurons besoin du résultat suivant dans notre étude de la matrice des covariances :

Lemme 1. *Si $f : \mathbb{R}^{2n} \longrightarrow \mathbb{C}$ est de classe C^2 au voisinage de 0 et de type $\hbar$-positif alors on a*

$$-2\hbar f''(0) + iJ \geq 0 \tag{10}$$

où $f''(0)$ est la matrice Hessienne de f en 0.

Démonstration. (Cf. le Lemme 2.1 dans Narcowich [20]). Pour $(\lambda_1, \dots, \lambda_m) \in \mathbb{C}^m$ et $\varepsilon \in \mathbb{R}$ posons

$$R(\varepsilon) = \sum_{j,k=1}^{m} \overline{\lambda_j}\lambda_k e^{-\frac{i\varepsilon^2}{2\hbar}\sigma(z_j,z_k)} f\big(\varepsilon(z_j - z_k)\big)\,.$$

Si f est de type $\hbar$-positif alors $R(\varepsilon) \geq 0$ pour tout ε ; choisissons les λ_j de façon à ce que $\sum_j \lambda_j = 0$; alors $R(0) = 0$ et $R''(0) \geq 0$. Un calcul un peu long, mais élémentaire, montre que

$$R''(0) = Z^T\big(-2f''(0) + i\hbar^{-1}J\big)Z$$

avec $Z = \sum_j \lambda_j z_j \in \mathbb{C}^{2n}$. Les λ_j, z_j étant arbitraires on a donc $-2f''(0)+i\hbar^{-1}J \geq 0$, ce qui démontre le lemme. $\square$

2.3. Les opérateurs densité

À partir de maintenant nous supposons que A est un opérateur à trace positif (donc auto-adjoint) sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n)$. En particulier, puisque A est compact, il admet, vu la théorie de Riesz–Schauder [22], la décomposition spectrale

$$A = \sum_j \lambda_j \mathcal{P}_j \tag{11}$$

où les $\lambda_j > 0$ sont les valeurs propres de A et les $\mathcal{P}_j$ les projections orthogonales de $\mathcal{H}$ sur les espaces propres $\mathcal{H}_j$ correspondants (qui sont de dimension finie : $\dim \mathcal{H}_j < \infty$). La trace de A est donnée par la formule

$$\mathrm{Tr}(A) = \sum_j \lambda_j \dim \mathcal{H}_j\,.$$

Supposons en particulier que $\mathrm{Tr}(A) = 1$. Suivant l'usage de la mécanique quantique nous appellerons alors A un *opérateur densité* et nous le noterons $\widehat{\rho}$. La fonction $\rho = (2\pi\hbar)^{-n}a$ est, par définition, la *distribution de Wigner* de $\widehat{\rho}$. Notons que l'on a, vu la formule (8),

$$\mathrm{Tr}(\widehat{\rho}) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \rho(z)dz = 1\,. \tag{12}$$

Avec ces notations nous avons :

$$\widehat{\rho}\psi(x) = \iint_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} e^{\frac{i}{\hbar}\langle p,x-y\rangle}\rho\left(\frac{1}{2}(x+y),p\right)\psi(y)dydp \tag{13}$$

ainsi que

$$\widehat{\rho}\psi(x) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \rho_\sigma(z_0)\widehat{T}(z_0)\psi(x)dz_0 \tag{14}$$

où ρ_σ est la transformée de Fourier symplectique de ρ :

$$\rho_\sigma(z) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\frac{i}{\hbar}\sigma(z,z')}\rho(z')dz'\,.$$

Appliquant la formule de décomposition spectrale (11) à $\widehat{\rho}$ on peut écrire

$$\widehat{\rho} = \sum_j \alpha_j\widehat{\rho}_j \quad \text{avec} \quad \sum_j \alpha_j = 1\,, \quad \alpha_j > 0$$

où $\widehat{\rho}_j$ est la projection orthogonale sur l'espace propre $\mathcal{H}_j$. Soit $(\psi_{jk})_k$ une base orthonormée de $\mathcal{H}_j = \ker(\widehat{\rho}_j)$; pour tout $\phi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ on a

$$\widehat{\rho}_j(\phi) = \sum_k (\phi,\psi_{jk})_{L^2}\psi_{jk}$$

donc le noyau de $\widehat{\rho}_j$ est $K_j = \psi_{jk}\otimes\overline{\psi_{jk}}$; son symbole a_j est par conséquent donné par la formule

$$a_j(z) = \sum_k \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i}{\hbar}\langle p,y\rangle}\psi_{jk}\left(x+\frac{1}{2}y\right)\overline{\psi_{jk}\left(x-\frac{1}{2}y\right)}dy\,.$$

Rappelant que la transformée (ou : distribution) de Wigner de $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ est définie par

$$W\psi(z) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i}{\hbar}\langle p,y\rangle}\psi\left(x+\frac{1}{2}y\right)\overline{\psi\left(x-\frac{1}{2}y\right)}dy \tag{15}$$

on a donc le résultat suivant : pour que l'opérateur $\widehat{\rho}$ défini par (13) soit un opérateur densité, il faut et il suffit qu'il existe des réels α_j tels que $\alpha_j \geq 0$, $\sum_j \alpha_j = 1$ et des fonctions $\psi_j \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $||\psi_j||_{L^2} = 1$ tels que l'on ait

$$\rho = \sum_j \alpha_j W\psi_j\,; \tag{16}$$

la fonction ρ est donc une somme convexe (en général infinie) de transformées de Wigner (15) de fonctions de carré intégrable orthonormales.

Remarque 1. Si $\widehat{\rho}$ est un opérateur densité alors $0 \leq \operatorname{Tr}(\widehat{\rho}^2) \leq 1$; le nombre $\mu(\widehat{\rho}) = \operatorname{Tr}(\widehat{\rho}^2)$ s'appelle la »pureté« de l'opérateur $\widehat{\rho}$, et on a $\mu(\widehat{\rho}) = 1$ si et seulement si $\rho = W\psi$ pour une fonction $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$.

3. Opérateur densité et principe d'incertitude

Dans ce paragraphe nous énonçons et prouvons une condition nécessaire, mais non suffisante, pour qu'un opérateur à trace soit positif. Pour les opérateurs densité cette condition s'interprète comme une conséquence du principe d'incertitude. Cette propriété peut s'énoncer de manière lapidaire dans le langage de la mécanique quantique en disant que »le principe d'incertitude est néccessaire mais non suffisant pour assurer la quantification des états«.

3.1. Énoncé et démonstration du résultat principal

À partir de maintenant nous supposerons toujours que $\widehat{\rho}$ est un opérateur densité sur $L^2(\mathbb{R}^n)$ dont la distribution de Wigner ρ satisfait la condition suivante :

$$\textit{La fonction } z \longmapsto \big(1 + |z|^2\big)\rho(z) \textit{ est dans } L^1(\mathbb{R}^{2n}) \tag{17}$$

(donc en particulier $\rho \in L^1(\mathbb{R}^{2n})$). Cette condition garantira l'existence de la matrice des covariances ; notons d'ores et déjà qu'elle implique que la transformée de Fourier symplectique ρ_σ est de classe C^2.

La condition $\operatorname{Tr}(\widehat{\rho}) = 1$ s'écrivant $\int \rho(z)dz = 1$ les notations suggèrent (comme elles sont d'ailleurs sensées le faire !) que ρ pourrait jouer le rôle d'une densité de probabilité sur $\mathbb{R}^{2n}$; ceci n'est pas toutefois le cas en général car ρ peut prendre des valeurs négatives (voir néanmoins le paragraphe 4 ci-dessous). Ceci ne nous empêchera pourtant pas de définir, par analogie avec la mécanique statistique classique, les valeurs moyennes associées à $\widehat{\rho}$ (et, en particulier, la *matrice des covariances*). Soit A un opérateur auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^n)$, et considérons le composé $\widehat{\rho}A = \widehat{\rho} \circ A$. Par définition

$$\langle A \rangle_{\widehat{\rho}} = \operatorname{Tr}(\widehat{\rho}A) \tag{18}$$

est la valeur moyenne de A par rapport à $\widehat{\rho}$. Nous conviendrons d'étendre cette définition au cas où A est un opérateur essentiellement auto-adjoint, défini (au moins) sur l'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ des fonctions rapidement décroissantes, ainsi que leurs dérivées de tous les ordres. Interprétant A comme un opérateur de Weyl, la formule ci-dessus s'écrit

$$\langle A \rangle_{\widehat{\rho}} = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \rho(z)a(z)dz \tag{19}$$

où a est le symbole de A. Si A et B sont (essentiellement) auto-adjoints on définit leur *covariance* par la formule

$$\operatorname{Cov}(A,B)_{\widehat{\rho}} = \frac{1}{2}\langle AB + BA \rangle_{\widehat{\rho}} - \langle A \rangle_{\widehat{\rho}} \langle B \rangle_{\widehat{\rho}} \,. \tag{20}$$

Choisissons en particulier A l'opérateur X_j de multiplication par la coordonnée x_j et pour B l'opérateur $P_j = -i\hbar\partial_{x^j}$. Par définition la matrice des covariances de l'opérateur densité $\widehat{\rho}$ est la matrice réelle symétrique

$$\Sigma_{\widehat{\rho}} = \begin{pmatrix} \Sigma_{XX,\widehat{\rho}} & \Sigma_{XP,\widehat{\rho}} \\ \Sigma_{PX,\widehat{\rho}} & \Sigma_{PP,\widehat{\rho}} \end{pmatrix}$$

où $\Sigma_{XX,\rho}$, $\Sigma_{XP,\rho} = \Sigma_{PX,\rho}^T$, et Σ_{PP} sont les matrices de dimension $n \times n$ définies par :

$$\begin{aligned} \Sigma_{XX,\widehat{\rho}} &= \big(\operatorname{Cov}(X_j, X_k)_{\widehat{\rho}}\big)_{1\leq j,k\leq n} \\ \Sigma_{XP,\widehat{\rho}} &= \big(\operatorname{Cov}(X_j, P_k)_{\widehat{\rho}}\big)_{1\leq j,k\leq n} \\ \Sigma_{PP,\widehat{\rho}} &= \big(\operatorname{Cov}(P_j, P_k)_{\widehat{\rho}}\big)_{1\leq j,k\leq n} . \end{aligned}$$

Notons que puisque les symboles des opérateurs X_jX_k, P_jP_k, et $1/2(P_jX_k+X_kP_j)$ sont, respectivement x_jx_k, p_jp_k, et p_jx_k on trouve, utilisant (19), que

$$\begin{aligned} \operatorname{Cov}(X_j, X_k)_{\widehat{\rho}} &= \int_{\mathbb{R}^{2n}} \big(x_j - \langle x_j\rangle_\rho\big)\big(x_k - \langle x_k\rangle_\rho\big)\rho(z)dz \\ \operatorname{Cov}(P_j, P_k)_{\widehat{\rho}} &= \int_{\mathbb{R}^{2n}} \big(p_j - \langle p_j\rangle_\rho\big)\big(p_k - \langle p_k\rangle_\rho\big)\rho(z)dz \\ \operatorname{Cov}(X_j, P_k)_{\widehat{\rho}} &= \int_{\mathbb{R}^{2n}} \big(x_j - \langle x_j\rangle_\rho\big)\big(p_k - \langle p_k\rangle_\rho\big)\rho(z)dz \end{aligned}$$

Remarque 2. L'existence des covariances et les formules ci-dessus résulte immédiatement de la condition (17) sur ρ.

Posant, conformément à l'usage de la mécanique quantique (Messiah [17]),

$$(\Delta X_j)^2_{\widehat{\rho}} = \operatorname{Cov}(X_j, X_j)_{\widehat{\rho}}\,, \quad (\Delta P_j)^2_{\widehat{\rho}} = \operatorname{Cov}(P_j, P_j)_{\widehat{\rho}}$$

on a le résultat que voici ; il généralise la remarque suivant la démonstration de la Proposition 4 dans notre précédent article [5] :

Proposition 2. *Soit un opérateur densité* $\widehat{\rho}$. (*i*) *La matrice des covariances* $\Sigma_{\widehat{\rho}}$ *associée satisfait*

$$\Sigma_{\widehat{\rho}} + \frac{1}{2}i\hbar J \geq 0 \tag{21}$$

et cette condition est équivalente aux inégalités de Heisenberg–Robertson–Schrödinger

$$(\Delta X_j)^2_{\widehat{\rho}}(\Delta P_j)^2_{\widehat{\rho}} \geq \big(\operatorname{Cov}(X_j, P_j)_{\widehat{\rho}}\big)^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 \tag{22}$$

($j = 1, \ldots, n$) *et* $(\Delta X_j)^2_\psi(\Delta P_k)^2_\psi \geq 0$ *si* $j \neq k$.

Démonstration. (i) La matrice $\Sigma_{\widehat{\rho}} + 1/2i\hbar J$ est hermitienne : cela résulte immédiatement de la symétrie de $\Sigma_{\widehat{\rho}}$ et du fait que $J^T = -J$. Remarquons maintenant que $\Sigma_{\widehat{\rho}} = \Sigma_{\widehat{\rho_0}}$ où ρ_0 est la fonction définie par $\rho_0(z) = \rho(z + \langle z \rangle_\rho)$ avec $\langle z \rangle_\rho = (\langle x \rangle_\rho, \langle p \rangle_\rho)$: on a $\langle z \rangle_{\rho_0} = 0$ et donc

$$\operatorname{Cov}(X_j, X_k)_{\rho_0} = \int_{\mathbb{R}^{2n}} x_j x_k \rho_0(z) dz = \operatorname{Cov}(X_j, X_k)_\rho \,;$$

de même $\operatorname{Cov}(X_j, P_k)_{\rho_0} = \operatorname{Cov}(X_j, P_k)_\rho$, $\operatorname{Cov}(P_j, P_k)_{\rho_0} = \operatorname{Cov}(P_j, P_k)_\rho$. Il suffit donc de prouver la proposition pour l'opérateur $\widehat{\rho}_0$ (qui est évidemment aussi de densité). Déterminons la matrice Hessienne $\rho''_{0,\sigma}(0)$. Un calcul direct montre que l'on a

$$\hbar^2 \rho''_{0,\sigma}(0) = (2\pi\hbar)^{-n} \begin{pmatrix} -\Sigma_{PP,\rho_0} & \Sigma_{XP,\rho_0} \\ \Sigma_{PX,\rho_0} & -\Sigma_{XX,\rho_0} \end{pmatrix}$$

c'est-à-dire

$$\hbar^2 \rho''_{0,\sigma}(0) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n J \Sigma_{\widehat{\rho}} J \,. \tag{23}$$

Puisque $\rho_\sigma = (2\pi\hbar)^{-n} a_\sigma$ la positivité de l'opérateur $\widehat{\rho}$ implique, vu la Proposition 1 et le Lemme 1, que

$$M = -2\hbar^{-1} J \Sigma_\rho J + iJ \geq 0 \,;$$

la condition $M \geq 0$ étant équivalente à $J^T M J \geq 0$ on a bien (21).

(ii) L'équivalence des conditions (21) et (22) se vérifie aisément en notant que $\Sigma_{\widehat{\rho}} + 1/2 i\hbar J \geq 0$ est semi-définie positive si et seulement si tous ses mineurs principaux le sont (voir de Gosson [5]). $\square$

Remarque 3. On vérifie facilement que la matrice $\Sigma_{\widehat{\rho}}$ est semi-définie positive. Il se trouve qu'en fait $\Sigma_{\widehat{\rho}}$ est même définie positive : ceci est prouvé dans [20].

Notons que les relations (22) impliquent les inégalités de Heisenberg usuelles $(\Delta X_j)_\rho (\Delta P_j)_\rho \geq 1/2\hbar$; comme nous l'avons expliqué dans [5, 6] ces inégalités ne sont qu'une forme faible du principe d'incertitude de la mécanique quantique. Le résultat suivant montre d'ailleurs pourquoi on a tout intérêt à utiliser la formulation complète (21) de ce principe :

Proposition 3. *Soit $\widehat{S} \in \operatorname{Mp}(n)$ et $S = \pi(\widehat{S})$. L'opérateur composé $\widehat{S}\widehat{\rho}\widehat{S}^{-1}$ est l'opérateur densité correspondant à la distribution de Wigner $\rho \circ S^{-1}$ et sa matrice de covariance est*

$$\Sigma_{\widehat{S}\widehat{\rho}\widehat{S}^{-1}} = S \Sigma_{\widehat{\rho}} S^T \,. \tag{24}$$

Démonstration. On a $\widehat{S}\widehat{\rho}\widehat{S}^{-1} \geq 0$ ainsi que

$$\operatorname{Tr}\left(\widehat{S}\widehat{\rho}\widehat{S}^{-1}\right) = \operatorname{Tr}(\widehat{\rho}) = 1$$

donc $\widehat{S}\widehat{\rho}\widehat{S}^{-1}$ est bien un opérateur densité. On rappelle que si l'opérateur A est associé à a par (1) alors $\widehat{S}\widehat{\rho}\widehat{S}^{-1}$ est associé à $a \circ S^{-1}$; un calcul immédiat montre qu'en outre $(a \circ S^{-1})_\sigma = a_\sigma \circ S^{-1}$, donc la distribution de Wigner de $\widehat{S}\widehat{\rho}\widehat{S}^{-1}$ est la fonction $\rho \circ S^{-1}$. La formule (24) résulte très simplement de la relation (23) utilisée lors de la démonstration de la proposition précédente : posons $f(z) = \hbar^2 \rho_\sigma(S^{-1}z)$; on a

$$f''(0) = (S^{-1})^T \big(\hbar^2 \rho''_\sigma(0)\big) S^{-1} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n (S^{-1})^T J \Sigma_{\widehat{\rho}} J S^{-1} \,.$$

Vu les relations $(S^{-1})^T J = JS$ et $JS^{-1} = S^T J$ (S est symplectique) on a donc

$$f''(0) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n JS\Sigma_{\widehat{\rho}} S^T J$$

et on termine la démonstation par le même argument que dans la Proposition 2. □

3.2. Matrice des covariances et cellules symplectiques

Dans [5] nous avons défini les notions de »cellule quantique« et d' »ellipsoïde admissible«. Une cellule quantique est l'image par une transformation symplectique affine de la boule $B(\sqrt{\hbar}) = \{|x|^2 + |p|^2 \leq \hbar\}$ de l'espace symplectique standard $(\mathbb{R}^{2n}, \sigma)$; un ellipsoïde admissible est un ellipsoïde de $\mathbb{R}^{2n}$ contenant une cellule quantique. Une propriété caractéristique est la suivante :

> *un ellipsoïde $\mathcal{B}_M$ est admissible si et seulement si sa section par n'importe quel plan affine passant par son centre, et parallèle à un plan symplectique de $(\mathbb{R}^{2n}, \sigma)$, a une aire au moins égale à $1/2h = \pi\hbar$.*

(Il suffit en fait de se limiter, pour la condition suffisante, aux plans de coordonnées conjuguées x_j, p_j).

Il est avantageux – ne serait-ce que par souci d'économie de notations ! – d'exprimer la définition ci-dessus dans le langage de la topologie symplectique, en utilisant la notion de capacité symplectique (voir [9] pour une définition et étude détaillée de cette notion ; nous en donnons une revue dans [5]). On rappelle qu'une capacité symplectique c sur l'espace symplectique $(\mathbb{R}^{2n}, \sigma)$ associe à tout sous-ensemble Ω de $\mathbb{R}^{2n}$ un nombre $c(\Omega) \in [0, +\infty]$ tel que :

- $c(\Omega) \leq c(\Omega')$ si $\Omega \subset \Omega'$;
- $c(f(\Omega)) = c(\Omega)$ pour tout symplectomorphisme f de $(\mathbb{R}^{2n}, \sigma)$;
- $c(Z_j(r)) = c(B(r)) = \pi r^2$ où $Z_j(r) = \{z \in \mathbb{R}^{2n} : x_j^2 + p_j^2 \leq r^2\}$ et $B(r) = \{z \in \mathbb{R}^{2n} : |z| \leq r\}$.

L'existence de capacités symplectiques peut s'établir en invoquant par exemple le théorème de Gromov sur l'impossibilté d'envoyer la boule $B(R)$ dans un cylindre $Z_j(r)$ au moyen de symplectomorphismes si $r < R$. Pour d'autres constructions et une étude précise de la notion de capacité syplectique, voir le traîté [9] de Hofer et Zehnder.

Il existe une infinité de capacités symplectiques différentes sur $(\mathbb{R}^{2n}, \sigma)$. Elles coïncident toutefois sur les ellipsoïdes de $\mathbb{R}^{2n}$. Nous parlerons donc de *la* capacité symplectique d'un ellipsoïde. Cette capacité se calcule comme suit : soit M une matrice symétrique réelle et positive. Posons

$$\mathcal{B}_M = \big\{z : \langle Mz, z\rangle \leq \hbar\big\} \,.$$

Les valeurs propres de JM ont la forme $\pm i\lambda_j$ avec $\lambda_j > 0$ car JM est équivalente à la matrice antisymétrique $M^{1/2}JM^{1/2}$; la suite $\mathrm{Spec}_\sigma(M) = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ où $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n$ est appelée le *spectre symplectique de* M et on a la formule

$$c(\mathcal{B}_M) = \frac{\pi\hbar}{\lambda_1} . \tag{25}$$

L'un d'entre nous (MdG) a prouvé dans [5], Proposition 2, que :

> *Un ellipsoïde $\mathcal{B}_M$ est admissible si et seulement si $c(\mathcal{B}_M) \geq 1/2h$. Si $c(\mathcal{B}_M) = 1/2h$ alors $\mathcal{B}_M$ contient une cellule quantique unique.*

Soit $\Sigma = 1/2\hbar M^{-1}$; suivant la terminologie de Littlejohn [13] nous appellerons

$$\mathcal{W}_\Sigma = \left\{ z : \frac{1}{2} \left\langle \Sigma^{-1} z, z \right\rangle \leq 1 \right\}$$

l'*ellipsoïde de Wigner* associée à Σ. Avec cette terminolgie et ces notations la Proposition 2 s'énonce concisément de manière suivante :

Proposition 4. *Si $\widehat{\rho}$ est un opérateur densité, alors $c(\mathcal{B}_M) \geq 1/2h$ avec $M = 1/2\hbar\Sigma_{\widehat{\rho}}^{-1}$. De manière équivalente : l'ellipsoïde de Wigner $\mathcal{B}_M = \mathcal{W}_{\Sigma_{\widehat{\rho}}}$ est admissible.*

Démonstration. Elle est la même, mutatis mutandis, que celle de la Proposition 4(ii) dans de Gosson [5]. Notons que l'existence de $\Sigma_{\widehat{\rho}}^{-1}$ est garantie par la Remarque suivant l'énoncé de la Proposition 2. □

En calcul de Weyl le symbole a d'un opérateur A borné est réel si et seulement si A est auto-adjoint (c'est d'ailleurs cette propriété qui en fait un outil de choix en mécanique quantique car elle assure que l'opérateur associé à une »observable classique« est essentiellement auto-adjoint). Toutefois, la condition $a \geq 0$ n'est ni suffisante ni nécessaire pour assurer la positivité de l'opérateur A. Cette particularité est en fait une manifestation du principe d'incertitude (voir par exemple Fefferman et Phong [3]). On pourrait de prime abord penser que la condition $c(\mathcal{B}_M) \geq 1/2h$ serait suffisante pour garantir la positivité de l'opérateur A. Il n'en est toutefois rien, comme Narcowich et O'Connell [21] l'ont montré sur l'exemple suivant : prenons pour symbole a la transformée de Fourier symplectique de la fonction

$$a_\sigma(x,p) = \left(1 - \frac{1}{2}\alpha x^2 - \tfrac{1}{2}\beta p^2\right) e^{-(\alpha^2 x^4 + \beta^2 p^4)} \quad , \quad \alpha, \beta > 0 \tag{26}$$

(on suppose ici $n = 1$). On vérifie sans difficulté que a est réel, que l'opérateur A correspondant est à trace (avec $\mathrm{Tr}(A) = 1$), et que la matrice des covariances est

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} .$$

La condition $\Sigma + 1/2i\hbar J \geq 0$ est donc équivalente à $\alpha\beta \geq \hbar^2/4$. Toutefois, même dans ce cas nous n'avons pas $A \geq 0$: quel que soit le choix des paramètres $\alpha, \beta > 0$

on trouve

$$\int p^4 a(x,p)dxdp = -24\alpha^2 < 0$$

ce qui n'est pas possible si $A \geq 0$.

4. Majorations par des Gaussiennes

Le cas où ρ est une gaussienne est d'un intérêt tout particulier, non seulement parce qu'il est relativement facile à traiter mathématiquement, mais peut-être surtout parce que c'est celui qui est le plus utile dans les applications, notamment à l'optique quantique dans le contexte des »états mixtes gaussiens« (voir par exemple R. Simon et al. [24, 25]).

On rappelle la propriété suivante de la transformée de Wigner

$$W\psi(z) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{i}{\hbar}\langle p,y\rangle}\psi\left(x+\frac{1}{2}y\right)\overline{\psi(x-\tfrac{1}{2}y)}dy$$

d'une fonction $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ telle que $W\psi \in L^1(\mathbb{R}^{2n})$:

$$\int_{\mathbb{R}^n} W\psi(x,p)dp = |\psi(x)|^2 \quad \text{et} \quad \int_{\mathbb{R}^n} W\psi(x,p)dx = |F\psi(p)|^2 . \tag{27}$$

4.1. La gaussienne caractéristique d'un ellipsoïde

Soit $\mathcal{B}_M : \langle Mz, z\rangle \leq \hbar$ une ellpisoïde quelconque dans $\mathbb{R}^{2n}$. Convenons d'appeler »gaussienne caractéristique« de $\mathcal{B}_M$ la fonction $\rho_M : \mathbb{R}^{2n} \longrightarrow \mathbb{R}$ définie par :

$$\rho_M(z) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^n \det(M^{-1})e^{-\frac{1}{\hbar}\langle M^{-1}z,z\rangle} . \tag{28}$$

Si $M = I$ (l'identité) alors ρ_I est la transformée de Wigner de la gaussienne ϕ_0 définie par

$$\phi_0(x) = (\pi\hbar)^{-n/4}e^{-\frac{1}{2\hbar}|x|^2} \tag{29}$$

(c'est »l'état cohérent standard« de la mécanique quantique [13]). Plus généralement, si $\mathcal{B}_M$ est une cellule quantique, alors ρ_M est la transformée de Wigner d'une Gaussienne normalisée (vouir Littlejohn [13] et de Gosson [5], Proposition 3). Rappelant la formule élémentaire

$$\int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-\langle Kz,z\rangle}dz = \pi^n(\det K)^{-1/2} \quad \text{si} \quad K = K^T > 0 \tag{30}$$

on vérifie immédiatement que

$$\int_{\mathbb{R}^{2n}} \rho_M(z)dz = 1 \tag{31}$$

donc ρ_M est a priori un bon candidat pour définir un opérateur densité via les formules (13) ou (14). Il se trouve – et ceci est une conséquence du principe d'incertitude – que ce n'est le cas que si la fonction ρ_M n'est pas trop »concentrée« autour de l'origine dans $\mathbb{R}^{2n}$. Le résultat suivant précise cette idée en énoncant un critère nécessaire et *suffisant* :

Proposition 5. *La fonction* ρ_M *définie par* (28) *est la distribution de Wigner d'un opérateur densité* $\widehat{\rho}_M$ *si et seulement si* $c(\mathcal{B}_M) \geq 1/2h$ *(c'est-à-dire si et seulement si l'ellpisoïde* $\mathcal{B}_M : \langle Mz, z\rangle \leq \hbar$ *est admissible).*

Démonstration. Elle est analogue à celle de la Proposition 4 dans de Gosson [5]. Un calcul sans difficulté montre que la matrice de covariance associée à ρ_M est $\Sigma = 1/2\hbar M^{-1}$. Si $\widehat{\rho}_M$ est un opérateur densité on doit donc avoir, vu la Proposition 4, $M^{-1} + iJ \geq 0$. Soit $S \in \mathrm{Sp}(n)$ telle que $M = S^T DS$ où D est la matrice diagonale

$$D = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 \\ 0 & \Lambda \end{pmatrix}, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) \tag{32}$$

où $(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ est le spectre symplectique de M (forme normale de Williamson [26] ; de Gosson [5] en donne une revue) ; puisque $S^T JS = J$ la condition $M^{-1} + iJ \geq 0$ est équivalente à $D^{-1} + iJ \geq 0$. Le polynôme caractéristique de $D^{-1} + iJ$ est le produit des n facteurs

$$F_j(t) = t^2 - 2\lambda_j^{-1} t + \lambda_j^{-2} - 1\,, \quad 1 \leq j \leq n$$

dont les zéros $t_j = \pm 1 + \lambda_j^{-1}$ sont positifs ou nuls si et seulement si $\lambda_j \leq 1$, c'est-à-dire si et seulement si $c(\mathcal{B}_M) \geq 1/2h$. $\square$

Notons que lorsque la condition $c(\mathcal{B}_M) \geq 1/2h$ est satisfaite, la pureté de $\widehat{\rho}_M$ (voir la Remarque 1) est donnée par

$$\mu(\widehat{\rho}_M) = \mathrm{Tr}(\widehat{\rho}_M^2) = (\det M)^{-1}\,.$$

En effet, vu la formule (9) et tenant compte du fait que le symbole a_M de $\widehat{\rho}_M$ est $(2\pi\hbar)^n \rho_M$ on a

$$\mu(\widehat{\rho}_M) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^n \int a_M^2(z)dz = (2\pi\hbar)^n \int \rho_M^2(z)dz\,.$$

Calculant l'intégrale au moyen de la formule (30) on a bien $\mu(\widehat{\rho}_M) = (\det M)^{-1}$.

4.2. Applications du principe d'incertitude de Hardy

Rappelons le théorème suivant de Hardy [8] : supposons que la fonction $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ et sa transformée de Fourier Ff satisfont

$$f(x) = O\left(e^{-\frac{a}{2\hbar}|x|^2}\right), \quad Ff(p) = O\left(e^{-\frac{b}{2\hbar}|p|^2}\right) \tag{33}$$

pour $|x|, |p| \to \infty$, $(a, b > 0)$. Alors :

- Si $ab > 1$, alors $f = 0$;
- Si $ab = 1$, il existe $C \in \mathbb{C}$ telle que $f(x) = Ce^{-\frac{a}{2\hbar}|x|^2}$;
- Si $ab < 1$, l'ensemble des fonctions satisfaisant (33) n'est pas vide (il contient les fonctions propres de la transformation de Fourier F, qui s'expriment en termes des fonctions de Hermite usuelles).

Le théorème de Hardy a pour conséquence immédiate la propriété suivante de la transformation de Wigner : soit $\psi \in L^2(R^n)$; supposons qu'il existe une constante $C > 0$ telle que $|W\psi(z)| \le Ce^{-\frac{1}{\hbar}|z|^2}$. Alors ψ est proportionnelle à la gaussienne $\psi_0(x) = (\pi\hbar)^{-n/4}e^{-\frac{1}{2\hbar}|x|^2}$. En effet, intégrant successivement en p et x cette inégalité, il vient, compte tenu des formules (27) :

$$|\psi(x)|^2 = \int W(\psi)(z)dp \le C_X^2 e^{-\frac{1}{\hbar}|x|^2}$$
$$|F\psi(p)|^2 = \int W(\psi)(z)dp \le C_X^2 e^{-\frac{1}{\hbar}|p|^2}$$

où $C_X, C_P > 0$. On a donc à la fois $|\psi(x)| \le C_X e^{-\frac{1}{2\hbar}|x|^2}$ et $|F\psi(p)| \le C_P e^{-\frac{1}{2\hbar}|p|^2}$ et il suffit d'appliquer le théorème de Hardy.

Nous allons montrer, en utilisant cette idée somme toute très simple, un résultat analogue pour l'opérateur de densité. On rappelle la formule de covariance symplectique pour la transformée de Wigner : si $S \in \mathrm{Sp}(n)$ alors

$$W\psi(S^{-1}z) = W\big(\widehat{S}\psi\big)(z) \tag{34}$$

où $\widehat{S}$ est l'un quelconque des deux éléments du groupe métaplectique $\mathrm{Mp}(n)$ couvrant S.

Proposition 6. *Soit $\widehat{\rho}$ un opérateur densité et ρ sa distribution de Wigner.*

(i) *S'il existe $C > 0$ et $M > 0$ tels que $\rho(z) \le Ce^{-\frac{1}{\hbar}\langle Mz,z\rangle}$ alors l'ellipsoïde $\mathcal{B}_M : \langle Mz, z\rangle \le \hbar$ est admissible : $c(\mathcal{B}_M) \ge 1/2h$.*

(ii) *Si $\mathcal{B}_M$ est une cellule quantique $S(B(\sqrt{\hbar}))$ alors ρ est proportionnelle à $W(\widehat{S}\phi_0)$ où $\pi(\widehat{S}) = S$ et ϕ_0 est la gaussienne* (29).

Démonstration. (i) Soit $S \in \mathrm{Sp}(n)$ telle que $M = S^T DS$, D comme dans (32). On a

$$\rho(S^{-1}z) \le Ce^{-\frac{1}{\hbar}\langle Dz,z\rangle}$$

donc, remplaçant $\widehat{\rho}$ par $\widehat{S}^{-1}\widehat{\rho}\widehat{S}$ et tenant compte du fait que la capacité symplectique est invariante par symplectomorphismes, on se ramène au cas diagonal $M = D$. Écrivons maintenant

$$\rho = \sum_j \alpha_j W\psi_j$$

où $\alpha_j > 0$, $\sum_j \alpha_j = 1$, et $||\psi_j||_{L^2} = 1$. Intégrant ρ successivement en p et en x on a

$$\int \rho(z)dp = \sum_j \alpha_j \int W\psi_j(z)dp = \sum_j \alpha_j |\psi_j(x)|^2$$
$$\int \rho(z)dx = \sum_j \alpha_j \int W\psi_j(z)dx = \sum_j \alpha_j |F\psi_j(p)|^2\,;$$

puisque $\langle Dz, z\rangle = \langle \Lambda x, x\rangle + \langle \Lambda p, p\rangle$ on a d'autre part les inégalités

$$\int \rho(z)dp \leq C \int e^{-\frac{1}{\hbar}\langle Dz,z\rangle} dp = C' e^{-\frac{1}{\hbar}\langle \Lambda x,x\rangle}$$
$$\int \rho(z)dx \leq C \int e^{-\frac{1}{\hbar}\langle Dz,z\rangle} dx = C' e^{-\frac{1}{\hbar}\langle \Lambda p,p\rangle}$$

avec $C' > 0$. Il existe donc, pour chaque indice j, une constante $C_j'' > 0$ telle que

$$|\psi_j(x)| \leq C_j'' e^{-\frac{1}{2\hbar}\langle \Lambda x,x\rangle}\,, \quad |F\psi_j(p)| \leq C_j'' e^{-\frac{1}{2\hbar}\langle \Lambda p,p\rangle}\,; \tag{35}$$

on rappelle que

$$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)\,, \quad \lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n\,. \tag{36}$$

Posons maintenant $\psi_{1j}(x_1) = \psi_j(x_1, 0, \ldots, 0)$ et notons F_1 la transformation de Fourier en la première variable. Vu la première inégalité (35) on a

$$|\psi_{1j}(x_1)| \leq C_j'' e^{-\frac{\lambda_1}{2\hbar}x_1^2}\,. \tag{37}$$

Par définition de F on a aussi

$$\int F\psi_j(p)dp_2 \cdots dp_n = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{n/2} \int\int e^{-\frac{i}{\hbar}p\cdot x}\psi_j(x)dxdp_2 \cdots dp_n\,;$$

c'est-à-dire, utilisant la formule d'inversion de Fourier,

$$\int F\psi_j(p)dp_2 \cdots dp_n = (2\pi\hbar)^{(n-1)/2} F_1\psi_{1j}(p_1)\,.$$

On a donc, vu la seconde inégalité (35),

$$|F_1\psi_{1j}(p_1)| \leq \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{(n-1)/2} C_j'' \int e^{-\frac{1}{2\hbar}\sum_{j=1}^n \lambda_j p_j^2} dp_2 \cdots dp_n$$

c'est-à-dire

$$|F_1\psi_{1j}(p_1)| \leq C_j''' e^{-\frac{\lambda_1}{2\hbar}p_1^2} \tag{38}$$

pour une constante $C_j''' > 0$. Vu (36) et le théorème de Hardy on doit avoir $\lambda_1^2 \leq 1$, c'est-à-dire $c(\mathcal{B}_M) \geq 1/2h$ vu la formule (25).

(ii) Soit $S \in \mathrm{Sp}(n)$ tel que $\mathcal{B}_M : \left\langle S^T Sz, z\right\rangle \leq \hbar$. On a $\rho(S^{-1}z) \leq Ce^{-\frac{1}{\hbar}|z|^2}$ et par le même raisonnement que dans la démonstration de (i) il existe $C_j'' > 0$ tel que

$$|\widehat{S}\psi_j(x)| \leq C_j'' e^{-\frac{1}{2\hbar}|x|^2}\,, \quad |F\widehat{S}\psi_j(p)| \leq C_j'' e^{-\frac{1}{2\hbar}|p|^2}\,.$$

Vu le théorème de Hardy il existe une constante $A_j \in \mathbb{C}$ telle que $\widehat{S}\psi_j = A_j\phi_0$, et donc

$$\rho = \sum_j \alpha_j A_j W\left(\widehat{S}^{-1}\phi_0\right) = CW\left(\widehat{S}^{-1}\phi_0\right). \qquad \square$$

Dans [4] Folland et Sitaram ont conjecturé que la transformée de Wigner d'une fonction $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ne peut être à support compact. Dans [10] Janssen a démontré cette conjecture. La Proposition 6 ci-dessus permet de retrouver immédiatement ce résultat, et de l'étendre aux distributions de Wigner des opérateurs de densité. L'idée est simple : on montre que si la distribution de Wigner est à support compact alors on peut trouver M avec $\rho(z) \leq Ce^{-\frac{1}{\hbar}\langle Mz,z\rangle}$ et $c(\mathcal{B}_M) < 1/2h$, ce qui falsifie la proposition ci-dessus. Énonçons et prouvons ceci de manière précise :

Corollaire. *Soit $\widehat{\rho}$ un opérateur densité. Le support de sa distribution de Wigner ρ n'est pas compact.*

Démonstration. Supposons que $\operatorname{Supp}(\rho)$ soit contenu dans la boule $B(R)$ et que $\rho(z) \leq C_{\mathrm{Max}}$ pour tout z. Pour tout $\lambda > 0$ on a $\rho(z) \leq C_\lambda e^{-\frac{\lambda}{\hbar}|z|^2}$ avec $C_\lambda = C_{\mathrm{Max}}\, e^{\frac{\lambda}{\hbar}R^2}$. Choisissons $\lambda > 1$ et $M = \lambda I$. On a donc $\rho(z) \leq C_\lambda e^{-\frac{1}{\hbar}\langle Mz,z\rangle}$ et $c(\mathcal{B}_M) < 1/2h$ d'où une contradiction vu (i) dans la Proposition 6. □

5. Conclusions. . . et Perspectives

On sait depuis longtemps que les questions de positivité pour les opérateurs de Weyl sont intimement associées au principe d'incertitude ; nous avons donné dans cet Article un énoncé précis et invariant par symplectomorphimes de ce principe. Ceci nous a permis d'analyser la positivité des opérateurs à trace en termes de la notion de capacité symplectique de l'ellipsoïde de Wigner. Il serait évidemment très utile d'énoncer et de prouver une condition suffisante générale ; à notre connaissance une telle condition n'a pas été énoncée clairement (et encore moins prouvée !) jusqu'à présent (voir cependant les remarques et conjectures dans le §III de l'article de Narcowich et O'Connell [21]).

Remarquons enfin que dans [1] Bonami et al. généralisent une variante du théorème de Hardy (due à Beurling) ; en particulier ils montrent que si $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ est telle que

$$\int |\psi(x)| \frac{e^{\frac{a}{2\hbar}|x_j|^2}}{\left(1+|x_j|^2\right)^N} dx < \infty\,, \qquad \int |F\psi(p)| \frac{e^{\frac{b}{2\hbar}|p_j|^2}}{\left(1+|p_j|^2\right)^N} dp < \infty$$

(N un entier ≥ 0) pour tous $j = 1, \dots, n$, alors $\psi = P\phi_0$, P un polynôme. Il serait certainement intéressant d'appliquer leurs résutats dans le sens de la Proposition 6.

Un dernier point qui mériterait sans doute d'être étudié. Nous avons vu (Proposition 2) que la condition $\Sigma_{\widehat{\rho}} + 1/2i\hbar J \geq 0$ est nécessaire pour que l'opérateur $\widehat{\rho}$ soit de densité ; vu la même proposition, cette condition est équivalente aux inégalités

$$(\Delta X_j)^2_{\widehat{\rho}} (\Delta P_j)^2_{\widehat{\rho}} \geq \left(\operatorname{Cov}(X_j, P_j)_{\widehat{\rho}}\right)^2 + \frac{1}{4}\hbar^2\,.$$

Ces dernières restent évidemment vraies si l'on remplace $\hbar$ par une constante $\hbar' < \hbar$, mais l'inverse n'est pas vrai. En d'autres termes, pour un opérateur $\widehat{\rho}$

donné la condition $\Sigma_{\widehat{\rho}} + 1/2i\hbar J \geq 0$ peut être violée si l'on augmente la valeur de $\hbar$ (que la positivité de $\widehat{\rho}$ puisse à priori dépendre de $\hbar$ est au demeurant clair vu la Proposition 35). Quelles sont les classes d'opérateurs qui restent positifs quelle que soit la valeur de $\hbar$, et quelle est l'interprétation de ces opérateurs en mécanique quantique ? Un début de réponse se trouve dans les travaux de Narcowich [18, 19] et de Bröckner et Werner [2], mais on manque de résultats complets dans le cas non gaussien, qui est loin d'être trivial.

Références

[1] A. Bonami, B. Demange et P. Jaming, *Hermite functions and uncertainty principles for the Fourier and the windowed Fourier transform*, Rev. Mat. Iberoamericana **19** (1) (2003) 23–55.

[2] T. Bröckner et F. Werner, *Mixed states with positive Wigner fuctions*, J. Math. Phys **36** (1) (1995), 62–75.

[3] C. Fefferman et D. H. Phong, *The uncertainty principle and sharp Gårding inequalities*, Comm. Pure Appl. Math. **75** (1981) 285–331.

[4] G. B. Folland et A. Sitaram, *The uncertainty principle : A mathematical survey*, Journ. Fourier Anal. Appl. **3** (3) (1997), 207–238.

[5] M. de Gosson, *Cellules quantiques symplectiques et fonctions de Husimi–Wigner*, Bull. Sci. Math. **129** (2005), 211–226.

[6] M. de Gosson, *Uncertainty principle, phase space ellipsoids and Weyl calculus*, Operator Theory : Advances and applications. Vol. **164** (2006), 121–132, Birkhäuser Verlag Basel.

[7] A. Grossmann, G. Loupias, et E. M. Stein, *An algebra of pseudo-differential operators and quantum mechanics in phase space*, Ann. Inst. Fourier, Grenoble **18** (2) (1968), 343–368.

[8] G. H. Hardy, *A theorem concerning Fourier transforms*, J. London. Math. Soc. **8** (1933), 227–231.

[9] H. Hofer et E. Zehnder, *Symplectic Invariants and Hamiltonian Dynamics*, Birkhäuser Advanced Texts, Birkhäuser Verlag, 1994.

[10] A. J. E. M. Janssen, *Proof of a conjecture on the supports of Wigner distributions*, Journ. Fourier Anal. Appl. **4** (6) (1998), 723–726.

[11] D. Kastler, *The C^*-algebras of a free boson field*, Commun. math. Phys. **1** (1965), 14–48.

[12] Y. Katznelson, *An Introduction to Harmonic Analysis*, Dover, New York (1976).

[13] R. G. Littlejohn, *The semiclassical evolution of wave packets*, Physics Reports **138** (4–5) (1986), 193–291.

[14] G. Loupias et S. Miracle-Sole, *C^*-Algèbres des systèmes canoniques, I*, Commun. math. Phys. **2** (1966), 31–48.

[15] G. Loupias et S. Miracle-Sole, *C^*-Algèbres des systèmes canoniques, II* Ann. Inst. Henri Poincaré **6** (1) (1967), 39–58.

[16] O. V. Man'ko, V. I. Man'ko, G. Marmo, E. C. G. Sudarshan, et F. Zaccaria, *Does the uncertainty relation determine the quantum state ?*, Phys. Lett. A **357** (2006), 255–260.

[17] A. Messiah, *Mécanique Quantique. Dunod*, Paris, 1961, 1995 (Vol. 1) [traduction anglaise : Quantum Mechanics, North–Holland, 1991].

[18] F. J. Narcowich, *Conditions for the convolution of two Wigner distributions to be itself a Wigner distribution*, J. Math. Phys. **29** (9) (1988), 2036–2041.

[19] F. J. Narcowich, *Distributions of* $\hbar$*-positive type and applications*, J. Math. Phys. **30** (11) (1989), 2565–2573.

[20] F. J. Narcowich, *Geometry and uncertainty*, J. Math. Phys. **31** (2) (1990).

[21] F. J. Narcowich et R. F. O'Connell, *Necessary and sufficient conditions for a phase-space function to be a Wigner distribution*, Phys. Rev. A **34** (1) (1986), 1–6.

[22] M. Reed et B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, Academic Press, New York, 1972.

[23] B. Simon, *Trace Ideals and Their Applications*, Cambridge University Press, 1979.

[24] R. Simon, E. C. G. Sudarshan et N. Mukunda, *Gaussian–Wigner distributions in quantum mechanics and optics*, Phys. Rev. A **36** (8) (1987), 3868–3880.

[25] R. Simon, N. Mukunda et B. Dutta, *Quantum noise matrix for multimode systems :* U(n)*-invariance, squeezing and normal forms*, Phys. Rev. A **49** (1994), 1567–1583.

[26] J. Williamson, *On the algebraic problem concerning the normal forms of linear dynamical systems*, Amer. J. Math. **58** (1963), 141–163.

Maurice de Gosson et Franz Luef
Universität Wien
Nu HAG, Mathematische Fakultät
Nordbergstrasse 15
A-1090 Wien
Austria
e-mail: maurice.de.gosson@univie.ac.at
franz.luef@univie.ac.at

Communicated by Jean Bellissard.

Submitted: February 19, 2007.

Accepted: October 3, 2007.