MQI: Cours 9

Symétries
en Mécanique Quantique
(une introduction)

Rappels de Physique Classique

- **Question**: Qu'est ce qu'une « symétrie d'un objet » dans le « monde classique »?
- **Réponse**: Il s'agit d'une transformation inversible qui « conserve » certaines propriétés du système étudié.
- **Conséquence**: La composition de deux symétries est encore une symétrie, et avec quelques hypothèses, on conclut que les **symétries forment un (ou des) GROUPES**.

Exemple: Le **GROUPE DE GALILEE**

Si l'on prend en compte:

- Les translations d'espace,
- Les translations dans le temps,
- Les rotations,
- Les changements de référentiels galiléens (les « boosts de Galilée »),

On obtient le **GROUPE DE GALILEE** qui inclut toutes les transformations géométriques et cinématiques fondamentales de la Physique non-relativiste.

Question Générale: comment « représenter » les symétries en MQ?

Représentations des symétries en MQ (1)

Transformations des états

Si une symétrie classique est :

- Une transformation qui transforme « une configuration » d'un objet en une autre configuration,
- Une transformation qui « conserve » les propriétés physiques,

Alors en MQ une symétrie doit :

- Transformer un état quantique en un autre état,
- Conserver « le concept fondamental en MQ »: les probabilités.

Le « **théorème de Wigner** » montre qu'**une symétrie en MQ doit être représentée par un opérateur linéaire unitaire**, c'est-à-dire par un opérateur linéaire $\widehat{U}$ agissant sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ des états du système et tel que:

A Retenir

$$\widehat{U}^{\dagger}\widehat{U} = \widehat{U}\widehat{U}^{\dagger} = Id_{\mathcal{H}} \Leftrightarrow \widehat{U}^{-1} = \widehat{U}^{\dagger}$$

- **Une symétrie transforme un état $|\psi\rangle$ en $|\psi'\rangle = \widehat{U}|\psi\rangle$.**

Représentations des symétries en MQ (2)

Représentations unitaires des groupes

Soit G un groupe (exemples: translations, rotations etc), alors il existe UNE LOI DE COMPOSITION INTERNE « $\circ$ » entre éléments de G: $(g, g') \in G \times G \mapsto g \circ g' \in G$.

En MQ on doit « faire correspondre » à G un groupe $\{\hat{U}_g \mid g \in G\}$ de transformations unitaires agissant sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ des états, en « respectant la loi du groupe » G, c'est-à-dire:

$$\forall g, g' \in G, \qquad \hat{U}_g . \hat{U}_{g'} = \hat{U}_{g \circ g'}$$

La transformation $g \in G \mapsto \hat{U}_g$ s'appelle alors une **REPRESENTATION UNITAIRE** du groupe G.

Remarques:

- Indépendamment de la Physique, l'étude des représentations des groupes, et en particulier des représentations unitaires est un domaine des Mathématiques très important, développé pour comprendre la structure des groupes. Donc « miraculeusement » les mathématiciens ont développé les outils nécessaires pour représenter les symétries en MQ.
- E. Wigner a été un des premiers « physiciens quantiques » à comprendre le rôle majeur de la théorie des groupes en MQ.

Les 3 façons de « faire agir un groupe » (1)

Physique Classique

Hypothèse: Soit G un « groupe abstrait » (exemple: translations, rotations …) fait d'éléments $g \in G$ et d'une loi de composition interne $(g, g') \mapsto g \circ g'$.

Question: Comment « faire agir » G sur le monde physique?

Réponse: il y a 3 façons possibles.

a) La représentation active: on fait « subir » la transformation $g \in G$ à l'objet, sans changer le repère ou le référentiel,

b) La représentation passive: on fait subir la transformation $g \in G$ (ou plutôt g^{-1}) au repère ou référentiel, sans modifier le système,

c) La représentation invariante: on fait subir la transformation à la fois à l'objet et au référentiel

----

Dans les cas (a) et (b) on « regarde » l'effet des transformations de deux manières différentes.
Dans le cas (c) on ne doit voir aucun effet si la transformation envisagée est une « symétrie du monde Physique » (d'où le qualificatif invariante)

Les 3 façons de « faire agir un groupe » (2)

Physique Quantique

En Physique Quantique:
- C'est l'état quantique $|\psi\rangle$ qui représente le système,
- Ce sont les observables qui jouent le rôle du référentiel

Hypothèse: On a un groupe G qui admet une représentation unitaire $g \in G \mapsto \widehat{U}_g$ sur l'espace de Hilbert des états $\mathcal{H}$.

On appelle:

a) **Représentation active**: faire agir G sur les états du système $|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = \widehat{U}_g|\psi\rangle$,

b) **Représentation passive**: faire agir G sur les observables: $\hat{A} \mapsto \hat{A}' = \widehat{U}_g^\dagger \hat{A} \widehat{U}_g$,

c) **Représentation invariante**: la double action sur les états et les observables:

$$|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = \widehat{U}_g|\psi\rangle \text{ et } \hat{A} \mapsto \hat{A}'' = \widehat{U}_g \hat{A} \widehat{U}_g^\dagger$$

Attention: $\hat{A}' \neq \hat{A}''$

Remarques:
- Pour (a) et (b) on a: $\langle\psi'|\hat{A}|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{A}'|\psi\rangle$,
- Pour (c) on a: $\langle\psi'|\hat{A}''|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$

A retenir: lorsque l'on parle de représentation sans spécifier on parle du cas (c).

Système Quantique Invariant par un groupe

<u>**Hypothèse**</u>: On a un groupe G qui admet une représentation unitaire $g \in G \mapsto \widehat{U}_g$ sur l'espace de Hilbert des états $\mathcal{H}$ du système. Ce système est décrit par un <u>Hamiltonien</u> $\widehat{H}$.

<u>**Définition**</u>: On dit que **le système est (dynamiquement) <u>invariant</u> sous l'action du groupe $\boldsymbol{G}$** si l'on a:

$$\forall g \in G, \widehat{U}_g^\dagger \widehat{H} \widehat{U}_g = \widehat{H}$$

Ou dit autrement:

$$\forall g \in G, \left[\widehat{H}, \widehat{U}_g\right] = 0$$

Mathématiques: Exponentielle de matrice

Définition: Soit M une matrice carré $n{\times}n$ à coefficients complexes, on définit son exponentielle notée e^M par:

$$e^M = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} M^k$$

On montre que cette série est convergente dans l'espace vectoriel normé des matrices $n{\times}n$ (peu importe le choix de la norme).

Propriétés:

1. $e^0 = Id_n$
2. $\forall s, t \in \mathbb{R},\ e^{s\,M} e^{t\,M} = e^{(s+t)M}$
3. Soient M et N deux matrices $n{\times}n$ telles que $[M, N] = 0$, alors $e^M e^N = e^N e^M = e^{M+N}$
4. $(e^M)^{-1} = e^{-M}$, $(e^M)^t = e^{(M^t)}$, $(e^M)^\dagger = e^{(M^\dagger)}$
5. $\det(e^M) = e^{\mathrm{tr}(M)}$
6. L'application $f: t \in \mathbb{R} \mapsto e^{t\,M}$ est indéfiniment dérivable et $f^{(k)}(t) = M^k\, e^{t\,M}$

Si $[M, N] \neq 0$ alors $e^M e^N \neq e^{M+N}$

Mathématiques: $e^{i\,\hat{A}}$ pour $\hat{A}$ opérateur hermitien

Problème: La définition précédente (série entière) ne fonctionne pas en dimension infinie en général.

Solution: Il y a une méthode pour généraliser la définition, mais uniquement pour définir $e^{i\,\hat{A}}$ lorsque $\hat{A}$ est hermitien, même en dimension infinie, grâce à la résolution spectrale de $\hat{A}$.

Si $\hat{A} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$ avec $\lambda_n \in \mathbb{R}$ et $\{|\phi_n\rangle\}$ base orthonormée de vecteurs propres, on peut définir $e^{i\,\hat{A}}$ en posant:

$$e^{i\,\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\lambda_n} |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

On montre que la série converge toujours car $\left|e^{i\lambda_n}\right| = 1$.

Propriété: L'opérateur $\widehat{U} = e^{i\,\hat{A}}$ est unitaire (preuve: $\widehat{U}^\dagger = e^{-i\,\hat{A}} = \widehat{U}^{-1}$).

Remarque: cela fonctionne aussi avec les opérateurs à spectre continu. En utilisant les notations de Dirac on a par exemple pour $a \in \mathbb{R}$:

$$e^{i\,a\,\hat{P}} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\,a\,p}\, |p\rangle\langle p|\, \frac{dp}{2\pi\hbar}$$

Mathématiques: « groupe à un paramètre »

Hypothèse: Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert, soit $\hat{A}$ un opérateur **hermitien** sur $\mathcal{H}$.

Théorème: alors $\{e^{i\,t\,\hat{A}} | t \in \mathbb{R}\}$ définit un groupe de **transformations** **unitaires** sur $\mathcal{H}$. On appelle ce groupe, le « groupe à un paramètre » engendré par $\hat{A}$.

Preuve:
- Les $\hat{U}_t = e^{i\,t\hat{A}}$ sont bien unitaires car $\hat{U}_t^\dagger = e^{(i\,t\hat{A})^\dagger} = e^{-i\,t\hat{A}} = \hat{U}_t^{-1}$.
- Les $e^{i\,t\hat{A}}$ constituent un groupe (en fait commutatif) car $e^{i\,t\hat{A}}\,e^{i\,s\hat{A}} = e^{i\,(t+s)\hat{A}}$

Conséquence pour la MQ: Toute observable engendre un groupe de transformations de symétries (un sous-groupe de transformations unitaires).

Remarque: cela est aussi vrai en Mécanique Classique. Une fonction dans l'espace des phases (c'est-à-dire une observable classique) engendre des transformations canoniques.

Groupes de Lie, générateurs et observables (1)

Définition: On appelle **Groupe de Lie** un groupe dont les éléments $g \in G$ sont « indexés par des nombres réels » $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$. On a donc en fait $g_{\vec{x}}$. On dit que le groupe est de dimension « n » si les éléments $g_{\vec{x}}$ sont indexés avec $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$.

Exemples:
- Le groupe des translations,
- Le groupe des rotations,
- Tout groupe constitué de matrices (les éléments de la matrice sont les $\vec{x}$).

Théorème: Soit G d'un groupe de Lie de dimension « n ». Supposons que le « paramétrage » $\vec{x} \mapsto g_{\vec{x}}$ des éléments de G soit tel que $g_{\vec{0}} = e$ l'élément neutre du groupe. On montre que les représentations **unitaires** $\vec{x} \mapsto \hat{U}_{g_{\vec{x}}}$ du groupe sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ sont toujours de la forme:

$$\hat{U}_{g_{\vec{x}}} = e^{-i \sum_{k=0}^{n} x_k \hat{G}_k}$$

Où les opérateurs $\hat{G}_k$ sur $\mathcal{H}$ sont **hermitiens**.

Groupes de Lie, générateurs et observables (2)

Hypothèse: G est un groupe de Lie de dimension « n » et soit une représentation unitaire de G sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$:

$$\vec{x} \mapsto \widehat{U}_{g_{\vec{x}}} = e^{-i \sum_{k=0}^{n} x_k \, \widehat{G}_k}$$

Définition: Les opérateurs (hermitiens) $\widehat{G}_k$ sont appelés les **générateurs infinitésimaux** du groupe (en fait de la représentation du groupe).

Conséquence importante pour la MQ: les générateurs infinitésimaux (d'une représentation unitaire) d'un groupe sont toujours des **observables**.

Propriétés des Générateurs infinitésimaux: On montre que la structure de groupe entraine que les $\widehat{G}_k$ doivent vérifier des relations de commutation « spéciales » de la forme:

$$\left[\widehat{G}_j, \widehat{G}_k\right] = i \sum_{\ell} c_{jk}^{\ell} \; \widehat{G}_{\ell} \quad \text{avec} \quad c_{jk}^{\ell} \in \mathbb{R}$$

Où les c_{jk}^{ℓ} sont spécifiques au groupe. On les appelle **coefficients de structure du groupe**.

Groupes de Lie, générateurs et observables (3)

Exemples:

- La représentation des translations d'espace de vecteur « $\vec{a}$ » est donnée par les transformations unitaires $\widehat{U}_{\vec{a}} = e^{\frac{1}{i\hbar}\vec{P}.\vec{a}}$ où $\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$ est l'observable (vectorielle) d'impulsion: $\langle\vec{r}|\widehat{U}_{\vec{a}}|\psi\rangle = \langle\vec{r} - \vec{a}|\psi\rangle$,
- La représentation des translation dans le temps est donné par « l'opérateur d'évolution » $\widehat{U}_t = e^{\frac{1}{i\hbar}\widehat{H}\,t}$ où $\widehat{H}$ est l'Hamiltonien: $\widehat{U}_t|\psi_0\rangle = |\psi_t\rangle$,
- La représentation des rotations de vecteur « $\vec{\omega}$ » est donnée par les transformations unitaires $\widehat{U}_{\vec{\omega}} = e^{\frac{1}{i\hbar}\vec{L}.\vec{\omega}}$ où $\vec{L}$ est l'observable (vectorielle) de moment cinétique orbital (voir cours 11): $\langle\vec{r}|\widehat{U}_{\vec{\omega}}|\psi\rangle = \langle R_{\vec{\omega}}(\vec{r})|\psi\rangle$, où $R_{\vec{\omega}}$ est une rotation.

Conclusion:

Toutes les observables (c'est-à-dire les grandeurs physiques) sont des générateurs infinitésimaux de symétries. On peut même prendre cette propriété comme la définition de la notion d'observable en MQ (cf E. Wigner).

FIN COURS 9