

Théorie quantique avancée

Tanguy Marsault

29 mai 2024

Avant propos

Les développements modernes de la théorie quantique ouvrent toujours plus de portes nouvelles pour approcher les problèmes fondamentaux de la physique théorique. La plupart des technologies qui nous entourent ne pourraient pas fonctionner sans notre compréhension actuelle de la mécanique quantique. C'est d'ailleurs le propre de cette théorie, elle intervient à toutes les échelles. En effet, contrairement par exemple à la relativité générale, la théorie quantique fait partie intégrante non seulement de la physique fondamentale mais aussi de l'ingénierie générale *. Ce sont ces différents niveaux de lecture qui la rendent particulièrement intéressante : il est difficile d'en avoir jamais terminé avec son étude !

Dans cette note, je me propose de suivre le lapin à l'entrée du terrier quantique, et alors d'explorer les galeries de sujets plus poussés qui ne sont, en général, pas traités dans des introductions à la théorie quantique. Le nombre et la diversité des sujets qu'il est possible d'aborder est gargantuesque, ainsi je ne traiterai que de ceux qui me semblent les plus *importants* (et bien évidemment de ceux que j'affectionne particulièrement !). Laissez-moi me préciser sur le terme *important*. Chaque sujet a une pertinence différente suivant ce que l'on souhaite faire de la théorie quantique. Ainsi, dans cette note, j'insiste particulièrement sur les aspects fondamentaux de la théorie quantique qui peuvent apparaître dans de nombreux domaines théoriques modernes. Dès lors, le propos s'adresse réellement à des lecteurs qui veulent comprendre toujours plus profondément les fondements mathématico-physiques de la physique quantique.

"To those who do not know mathematics it is difficult to get across a real feeling as to the beauty, the deepest beauty, of nature ... If you want to learn about nature, to appreciate nature, it is necessary to understand the language that she speaks in."

-Richard Feynman

Je me permets d'inclure cette citation du Prix Nobel de physique Richard Feynman, non seulement parce que je l'apprécie, mais également car je pense qu'elle est extrêmement vraie. Parmi les sujets que nous aborderons de nombreux résultats tirent leur origine presque uniquement de propriétés mathématiques. Malheureusement (ou agréablement pour ceux qui, comme moi, affectionnent les mathématiques abstraites et le cadre de démonstration rigoureux qu'ils dressent), il faudra alors rester à la page mathématiquement pour comprendre la profondeur des résultats que nous montrerons et également leur démonstration. Etant avant tout physicien, je ne ferai que des rappels brefs des résultats mathématiques que nous utiliserons. J'aimerais énormément pouvoir les exposer clairement, mais je n'aurai pas la prétention d'espérer pouvoir le faire correctement. Sachez seulement que, pour votre motivation, si vous ne comprenez pas tout (voire rien) en premier lieu, ne vous inquiétez pas, je suis passé par là. J'insiste particulièrement sur les ressources qu'il est possible de trouver en ligne. La plupart des questions que vous vous poserez aurons (au moins en partie) une réponse trouvable en ligne. En outre, à la manière d'un étymologiste avec un dictionnaire, il faudra aller de page en page, de mot en mot,

*. Ne crachons pas trop sur la relativité générale pour autant, bien que moins omniprésente, elle apparaît aussi dans des technologies du quotidien comme le GPS, par exemple.

pour comprendre profondément certains résultats. Et, alors que je vous en aurai seulement montré l'entrée, vous suivrez le lapin jusqu'au fond du terrier. Le plus important est alors de ne pas désespérer et de continuer à creuser !

Je me permets tout de même de donner un léger aperçu des mathématiques qui peuvent intervenir dans les sujets que nous étudierons,

- Algèbre linéaire : mais en réalité si vous êtes ici vous avez déjà de bonnes bases en mécanique quantique et savez donc déjà en quoi l'algèbre linéaire est omniprésente
- Variétés différentielles : ce sujet n'est pas prédominant, et la précision de notre traitement sur les approches lagrangiennes ne nécessitera pas de connaissances approfondies du sujet. Toutefois, des connaissances de base sur les variétés différentielles permettront de mieux appréhender certains points et seront nécessaire à un moment ou un autre si vous continuez en physique théorique !
- Groupes et Algèbres de Lie : un traitement approfondi du sujet nécessite une bonne compréhension des variétés différentielles, sur lesquelles se basent les groupes de Lie. La théorie des groupes basique est également indispensable, les résultats sur les groupes et algèbres de Lie et la théorie des représentations peuvent être admis.
- Homotopie : la théorie d'homotopie et particulièrement des groupes fondamentaux est un sujet de plus en plus récurrent en physique théorique. Des connaissances très basiques sur le sujet permettent déjà une bonne appréhension (ou au moins intuition) de la plupart des points exposés.

Cette liste, non exhaustive, n'a pas pour but de décourager, bien au contraire je la considère plus comme motivante dans ce qu'elle indique quant à la beauté et la diversité des sujets de la mécanique quantique.

Table des matières

1	Fondements	5
1.1	Postulats	5
1.1.1	Espace de Hilbert	5
1.1.2	Opérateurs	8
1.1.3	Etats physiques	10
1.1.4	Evolution des états	11
1.2	Matrices densité	12
1.2.1	Propriétés basiques	12
1.2.2	Mesures	13
1.3	Symétries	15
1.3.1	Transformation générale des états	15
1.3.2	Translations et quantité de mouvement	20
1.3.3	Rotations et moment angulaire	23
1.3.4	Translations dans le temps et point de vue de Heisenberg	25
2	Etats composés de plusieurs particules	27
2.1	Particules identiques	27
2.1.1	Aspects géométriques classiques	27
2.1.2	Statistiques : bosons, fermions et anyons	28
2.2	Espaces de Hilbert	29
2.2.1	Particules distinguables	30
2.2.2	Particules indistinguables	30
2.2.3	Espace de Fock	35
2.2.4	Opérateurs création et annihilation	36
2.3	Composition des moments angulaires	42
2.3.1	Algèbre de Lie et construction des vecteurs propres	43
2.3.2	Addition des moments angulaires	45
2.3.3	Théorème de Wigner-Eckart	48
3	Formalisme canonique	50
3.1	Rappels classiques	50
3.1.1	Approche Lagrangienne	50
3.1.2	Symétries	51
3.1.3	Approche Hamiltonienne	52
3.2	Aspects quantiques	53
3.2.1	Variables canoniques	53
3.3	Intégrale de chemin	55
3.3.1	L'idée de Feynman	55
3.3.2	Formalisme pour les bosons	59
3.3.3	Calculer l'intégrale de chemin : les relations fondamentales	63
3.3.4	Fermions	65
3.4	Effet d'une métrique	65
	References	66

1 Fondements

Dans cette première section nous revenons sur les fondements physiques de la mécanique quantique. Nous décrivons alors les principes mathématiques basiques qui permettront de décrire un système quantique à partir des postulats physiques. Nous insistons également sur les principes de symétrie qui jouent un rôle extrêmement important dans toute la physique moderne.

1.1 Postulats

Avant d'étudier la théorie quantique, il est important de définir les objets mathématiques sur lesquels elle s'appuie. Nous décrivons ses objets en concordance avec les postulats physiques qui fondent la base de la physique quantique. Des connaissances d'algèbre linéaire basiques sont nécessaires pour appréhender tous les résultats évoqués. En outre, la plupart des résultats peuvent être admis sans conséquences particulières pour la suite. Toutefois, n'importe qui souhaitant approfondir ses connaissances en mécanique quantique aura besoin à un moment ou un autre des résultats d'algèbre linéaire que nous utilisons ici. Ainsi il est probablement de bon goût de se pencher sur cette théorie mathématique dès maintenant en cherchant les origines des théorèmes utilisés, bien que non démontrés, dans cette première section.

1.1.1 Espace de Hilbert

La différence principale entre la physique classique et la physique quantique réside dans le principe de superposition. En effet, en mécanique quantique, si l'on considère deux états du système e_1 et e_2 , l'état $e_1 + e_2$ est également un état possible du système (à constante de renormalisation près). C'est à dire que les états d'un système quantique nous poussent à les définir comme éléments d'un espace vectoriel. En réalité, pour des raisons plus techniques, on suppose même que ce sont des éléments d'un espace de Hilbert. Notons \mathcal{H} cet espace de Hilbert. Cet espace de Hilbert, en général considéré comme espace vectoriel normé complexe, vient naturellement avec les notions de norme et produit scalaire (au sens hermitien).

Dans tout ce que nous étudierons par la suite nous supposerons de plus que cet espace est séparable de sorte que l'on puisse y trouver une *base hilbertienne*, c'est-à-dire, un ensemble de vecteurs $\{e_i\}_{i \in I}$, où I est dénombrable, qui vérifient

- L'orthonormalité $(e_i, e_j) = \delta_{ij}$
- La complétude, $\forall e \in \mathcal{H}, \exists (\lambda_i)_{i \in I} \in \mathbb{C}$ tels que $e = \sum_{i \in I} \lambda_i e_i$ (qui s'écrit aussi comme le fait que le sous espace $\text{Vect}(\{e_i\}_{i \in I})$ est dense)

Cette base hilbertienne coïncide avec la base orthonormée classique d'un espace vectoriel dans le cas où \mathcal{H} est de dimension fini (ce qui n'est pas le cas en général). De plus, les vecteurs e_i sont bien indépendants dans le sens où toute sous-famille finie de $\{e_j\}_{j \in J}$, $J \subset I$ est libre.

A partir de maintenant nous noterons, $|\phi\rangle$ les éléments de \mathcal{H} . A chaque vecteur

$|\phi\rangle$, on associe une forme linéaire continue $\langle\phi|$ définie par

$$\begin{aligned}\langle\phi| : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{H} \\ |\psi\rangle &\longmapsto \langle\phi|(|\psi\rangle) = (|\phi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle\end{aligned}\quad (1.1.1)$$

où l'on a noté le produit scalaire $\langle\cdot|\cdot\rangle$. On note l'espace des formes linéaires par \mathcal{H}^* .

Avec ces nouvelles notations il est facile de déterminer les coefficients intervenant dans la décomposition d'un $|\phi\rangle$ sur une base hilbertienne de \mathcal{H} . Soit par exemple $|\psi_k\rangle$, $k \in \mathbb{N}$, une telle base. Il vient alors facilement,

$$|\phi\rangle = \sum_{k \in \mathbb{N}} \frac{\langle\psi_k|\phi\rangle}{\langle\psi_k|\psi_k\rangle} |\psi_k\rangle \quad (1.1.2)$$

Si la base choisie est normalisée, nous avons également $\langle\psi_k|\psi_k\rangle = 1^*$.

En mécanique quantique on rencontrera souvent une base d'états *continus* telle que $|\vec{x}\rangle$ faisant référence aux positions possibles d'une particule dans l'espace. Toutefois, la discussion précédente indique qu'une base hilbertienne devrait être dénombrable. Nous cherchons donc à définir plus formellement une telle base continue. Pour ce faire nous suivons la discussion de Weinberg [10].

On remplace alors l'indice discret utilisé précédemment $k \in \mathbb{N}$ par un indice continu $x \in \mathbb{R}^\dagger$. L'indice x n'est pas forcément lié à la position d'une particule. On cherche alors à définir des états $|\psi_x\rangle$.

Pour ce faire nous discrétisons l'ensemble de définition de l'indice x . On suppose alors que dans un petit intervalle $[x, x + \Delta x]^\ddagger$, l'indice x peut prendre un nombre dénombrable de valeurs que nous notons $\rho(x)\Delta x$. Jusqu'ici, pour Δx fini, nous pouvons décrire l'ensemble de définition de x comme une réunion dénombrable de ces intervalles. L'union dénombrable d'ensembles dénombrables étant dénombrable, les résultats exposés précédemment sont toujours valables. On peut alors définir des états $|\psi_x\rangle$, où x décrit l'ensemble discrétisé, et les normaliser sous la forme,

$$\langle\psi_i|\psi_{x'}\rangle = \rho(x)\delta_{xx'} \quad (1.1.3)$$

Nous avons alors,

$$|\phi\rangle = \sum_x \frac{\langle\psi_x|\phi\rangle}{\rho(x)} |\psi_x\rangle \quad (1.1.4)$$

Faisons désormais tendre $\Delta x \rightarrow 0$ en gardant ρ fixe. En supposant que les fonctions de $x \mapsto \frac{\langle\psi_x|\phi\rangle}{\rho(x)} |\psi_x\rangle$ se comportent suffisamment bien (supposition que nous admettons simplement ici), il vient

$$|\phi\rangle = \int \frac{\langle\psi_x|\phi\rangle}{\rho(x)} |\psi_x\rangle \rho(x) dx \quad (1.1.5)$$

*. En réalité en supposant que c'est une base hilbertienne telle que nous l'avons définie elle devrait être normalisée, toutefois pour garder une certaine liberté qui peut s'avérer utile lorsque les concepts abordés sont plus avancés, il peut être utile de ne pas s'engager trop rapidement sur la normalisation.

†. En réalité l'indice ne parcourt pas forcément \mathbb{R} mais peut-être un sous-ensemble non dénombrable de \mathbb{R} , ce n'est pas important pour la discussion que nous proposons ici, il suffit que l'indice soit défini sur un ensemble non dénombrable pour décrire la manière de procéder

‡. La discussion est présentée pour un indice évoluant sur un espace de dimension 1, le raisonnement se ferait de manière similaire pour un indice évoluant sur un espace de dimension n . On peut par exemple refaire le raisonnement sur un réseau 2D à titre d'exercice.

Ce qui justifie alors le choix de notre normalisation pour les états $|\psi_x\rangle$ de sorte que,

$$|\phi\rangle = \int dx \langle \psi_x | \phi \rangle |\psi_x\rangle \quad (1.1.6)$$

Dans l'unique but de perturber les étudiants en mécanique quantique *, Dirac décida d'introduire la notation,

$$\langle \psi_x | \psi_{x'} \rangle = \rho(x) \delta_{xx'} = \delta(x - x') \quad (1.1.7)$$

Cette notation cache un peu sous le tapis les problèmes que nous avons rencontré mais est en réalité maligne, car tout se passe effectivement comme si ce produit scalaire était effectivement une distribution de Dirac (au sens mathématique des distributions). En effet,

$$\int dx \delta(x - x') = \int dx \rho(x) \delta_{xx'} = \sum_x \delta_{xx'} = 1 \quad (1.1.8)$$

et également,

$$\int dx \delta(x - x') f(x) = \int dx \rho(x) \delta_{xx'} f(x) = \sum_x f(x) \delta_{xx'} = f(x') \quad (1.1.9)$$

qui sont bien les relations attendues pour une distribution de Dirac.

A présent, nous traiterons donc la variable x comme une variable continue sur laquelle nous devons intégrer, et remplaçons la normalisation des états par une distribution de Dirac. Cette distribution est réellement une distribution au sens mathématique du terme et transporte alors toutes les opérations qui lui sont associées (notamment la dérivée d'un Dirac par exemple).

Sur un espace de Hilbert à *base continue* on peut alors écrire un état $|\phi\rangle$ sous la forme,

$$|\phi\rangle = \int dx \phi(x) |\psi_x\rangle \quad (1.1.10)$$

et la norme de cet état vaut alors,

$$\langle \phi | \phi \rangle = \int dx |\phi(x)|^2 \quad (1.1.11)$$

Ceci nous permet alors d'identifier l'espace de Hilbert comme $L^2(x)$, l'espace des fonctions continues de carré intégrable sur l'ensemble de définition de la variable x et par rapport à la mesure définie sur cet ensemble.

Enfin, tous les vecteurs de l'espace de Hilbert ne sont pas des vecteurs états physiques. Pour une raison que nous expliquons dans le paragraphe suivante, nous définissons les vecteurs états physiques comme les vecteurs de \mathcal{H} de norme 1, c'est à dire les $|\psi\rangle$ tels que $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

*. Humour...

1.1.2 Opérateurs

Maintenant que nous sommes équipés d'un espace de Hilbert \mathcal{H} dans lequel nous trouvons nos vecteurs-états, il est naturel de définir les opérateurs qui agissent sur cet espace de Hilbert, c'est-à-dire les applications linéaires

$$\begin{aligned} O : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{H} \\ |\psi\rangle &\longmapsto O(|\psi\rangle) = O|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.1.12)$$

que l'on appelle mathématiquement les endomorphismes de \mathcal{H} et que l'on note $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Pour un espace de Hilbert de dimension finie, ces opérateurs sont en bijection avec les matrices carrées $\mathcal{M}(\dim \mathcal{H}, \mathbb{C})$. En dimension infinie, ces *matrices* prennent naturellement une taille infinie (dénombrable) et nous continuerons de les appeler matrices bien qu'elles soient de dimension infinie.

En mécanique quantique, il y a un certain type d'opérateurs qui nous intéresse particulièrement car ils représentent des quantités physiques mesurables. Nous nommons ces opérateurs des *observables* et nous les définissons comme les opérateurs hermitiens c'est-à-dire les opérateurs O tels que

$$O^\dagger = O \quad (1.1.13)$$

où \cdot^\dagger désigne le trans-conjugué $*$.

Choisissons une base $\mathcal{B} = \{|\psi_k\rangle\}$ de l'espace de Hilbert physique. Soit un opérateur A quelconque agissant sur \mathcal{H} . On peut toujours décrire l'opérateur A en calculant ses valeurs prises sur la base \mathcal{B} . C'est à dire nous calculons les coefficients,

$$A_{ij} = (|\psi_i\rangle, A|\psi_j\rangle) \quad (1.1.15)$$

où nous avons adopté de nouveau la notation (\cdot, \cdot) pour le produit scalaire. De la sorte, A agit sur un état $|\psi\rangle = \sum_k a_k |\psi_k\rangle$ sous la forme,

$$A|\psi\rangle = \sum_k a_k A|\psi_k\rangle = \sum_{kl} a_k A_{lk} |\psi_l\rangle \quad (1.1.16)$$

Et il est alors naturel d'écrire,

$$A = \sum_{ij} A_{ij} |\psi_i\rangle \langle \psi_j| \quad (1.1.17)$$

Revenons alors aux opérateurs hermitiens. Soit O un tel opérateur. Tous les résultats décrits pour A restent vrais pour O , et nous pouvons même clarifier nos notations. Nous pouvons écrire de la même manière,

$$O = \sum_{ij} O_{ij} |\psi_i\rangle \langle \psi_j| \quad (1.1.18)$$

Or O étant hermitien nous avons désormais, $O_{ji}^* = O_{ij}$. Ce simple fait nous permet alors d'écrire,

$$O_{ij} = (|\psi_i\rangle, O|\psi_j\rangle) = (|\psi_i\rangle O^\dagger, |\psi_j\rangle) = \langle \psi_i| O |\psi_j\rangle \quad (1.1.19)$$

*. Nous avons en réalité déjà fait apparaître l'opération de trans-conjugaison plus haut mais nous l'avons cachée. En effet,

$$(|\psi\rangle)^\dagger = \langle \psi| \quad (1.1.14)$$

où nous avons levé l'ambiguïté sur le dernier membre de cette équation, qui serait mal défini si O n'était pas hermitien.

Ces opérateurs hermitiens ont également la particularité d'avoir des valeurs propres réelles, ce qui se révèle être fondamental lorsque nous leur associons des quantités physiques mesurables. Le lien entre opérateur hermitien et observable physique est comme suit. A toute quantité physique mesurable \mathcal{O} on associe un opérateur hermitien $O \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Supposons le système étudié dans un état $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, la mesure de l'observable physique \mathcal{O} dans cet état fournit nécessairement une valeur $o_i \in \text{Sp } O \subset \mathbb{R}$, ce qui justifie après coup notre choix des opérateurs hermitiens. Remarquons en outre, que le lien est unidirectionnel, à chaque observable physique on associe un opérateur hermitien, mais tous les opérateurs hermitiens ne correspondent pas forcément à des observables physiques.

A ce stade, nous savons simplement que la mesure d'une observable physique donne nécessairement une valeur propre de l'opérateur associé, cependant nous ne savons pas comment cette mesure dépend du vecteur état $|\psi\rangle$ considéré. C'est ce qui constitue l'aspect probabiliste de la mécanique quantique et que nous décrivons désormais.

Considérons une observable physique \mathcal{O} , son opérateur hermitien associé O . Comme O est hermitien il est diagonalisable et il existe donc une base orthogonale de vecteurs propres pour O . Notons o_i les valeurs propres de O et

$$g_i = \dim \ker(O - o_i \text{id}_{\mathcal{H}}) \quad (1.1.20)$$

On construit alors une base orthogonale pour O sous la forme

$$\mathcal{B} = \{|\phi_i^l\rangle\}_{i, 1 \leq l \leq g_i} \quad (1.1.21)$$

de sorte que $\mathcal{B}_i = \text{Vect} \{|\phi_i^l\rangle\}_{1 \leq l \leq g_i}$ forme une base de $\ker(O - o_i \text{id}_{\mathcal{H}})$. L'orthogonalité s'exprime par,

$$\langle \phi_i^l | \phi_j^k \rangle \propto \delta_{ij} \delta_{lk} \quad (1.1.22)$$

Considérons alors un état $|\psi\rangle$ quelconque, on peut le décomposer sous la forme,

$$|\psi\rangle = \sum_{i,l} a_i^l |\phi_i^l\rangle \quad (1.1.23)$$

où $a_i^l = \frac{\langle \phi_i^l | \psi \rangle}{\langle \phi_i^l | \phi_i^l \rangle}$ (remarquons que nous ne nous sommes pas engagé sur la normalisation des $|\phi_i^l\rangle$).

C'est ici qu'apparaît alors le postulat physique probabiliste connu sous le nom de *règle de Born*. Une mesure de l'observable \mathcal{O} donne la valeur o_i avec la probabilité,

$$P(o_i) = \sum_{l=1}^{g_i} |\langle \phi_i^l | \psi \rangle|^2 \quad (1.1.24)$$

Pour que l'interprétation probabiliste soit valable il faut encore que,

$$\sum_i P(o_i) = 1 \quad (1.1.25)$$

Ce qui s'écrit,

$$\begin{aligned}
\sum_i \sum_{l=1}^{g_i} |\langle \phi_i^l | \psi \rangle|^2 &= \sum_{il} |a_i^l|^2 \\
&= \sum_{il} \left| \frac{\langle \phi_i^l | \psi \rangle}{\langle \phi_i^l | \phi_i^l \rangle} \right|^2 \\
&= \sum_{il} \frac{\langle \phi_i^l | \psi \rangle \langle \phi_i^l | \psi \rangle^*}{|\langle \phi_i^l | \phi_i^l \rangle|^2} \\
&= \langle \psi | \left(\sum_{il} \frac{|\phi_i^l\rangle \langle \phi_i^l|}{|\langle \phi_i^l | \phi_i^l \rangle|^2} \right) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | \psi \rangle = 1
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé le résultat (facile à démontrer),

$$\sum_{il} \frac{|\phi_i^l\rangle \langle \phi_i^l|}{|\langle \phi_i^l | \phi_i^l \rangle|^2} = \text{id}_{\mathcal{H}} \quad (1.1.26)$$

Cette interprétation probabiliste explique alors pourquoi nous avons choisi de prendre des états de norme 1 comme vecteurs états physiques.

Comme nous l'avons expliqué dans la section précédente, nous pouvons généraliser ce résultat à des opérateurs prenant un ensemble continu de valeurs propres indicées par x . La base orthogonale associée est alors continue et définie comme décrit dans la section précédente par

$$\langle \phi_x^v | \phi_y^w \rangle \propto \delta(x - y) \delta(v - w) \quad (1.1.27)$$

où x et y sont des variables continues faisant référence à la valeur propre o_x et v, w sont aussi continues faisant référence à la multiplicité de la valeur propre. La généralisation des résultats précédents est alors triviale.

Ainsi, à chaque vecteur état $|\psi\rangle$ on peut définir une mesure de probabilité P_ψ telle que décrit au-dessus. Cette mesure permet de définir l'espérance, la variance et l'écart-type des opérateurs hermitiens dans l'état $|\psi\rangle$. Nous ne revenons pas sur ces concepts qui peuvent être trouvés dans des cours plus basiques de mécanique quantique.

1.1.3 Etats physiques

Si tous les vecteurs états de l'espace de Hilbert représentent un état physique, ces états physique ne sont pas forcément différents. En effet, comme nous l'étudions ici, ce ne sont pas les vecteurs états qui définissent l'état physique mais plutôt les *rayons** de l'espace de Hilbert \mathcal{H} .

Pour étudier ceci, soit un état $|\psi\rangle$ de norme 1. Considérons également l'état $|\phi\rangle = e^{i\theta} |\psi\rangle$ avec $\theta \in \mathbb{R} - 2\pi\mathbb{Z}$. Soit une observable physique \mathcal{O} et une valeur propre associée o_i . Il est évident que,

$$P_\psi(o_i) = P_\phi(o_i) \quad (1.1.28)$$

*. Nous définissons ce que sont les rayons plus loin.

Ce qui montre plus généralement que,

$$P_\psi = P_\phi \quad (1.1.29)$$

Ce résultat s'interprète de la manière suivante. Si deux vecteurs états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ ne diffèrent que d'une phase, alors on ne peut pas les différencier en mesurant n'importe quelle quantité physique du système entre ses deux vecteurs états. Il est alors naturel de considérer que les états physiques représentés par $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont les mêmes. Quel est alors l'espace des états physiques ?

Le raisonnement précédent montre que les états physiques sont en bijection avec les *rayons* de \mathcal{H} . On définit un rayon comme un ensemble

$$\mathcal{R} = \{e^{i\theta} |\psi\rangle, \theta \in \mathbb{R}, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \text{ t.q. } \langle\psi|\psi\rangle = 1\} \quad (1.1.30)$$

Une autre construction de l'espace des états physiques est de considérer l'espace projectif $\mathbb{P}\mathcal{H} = \mathcal{H}/\sim$ où \sim désigne la relation d'équivalence,

$$|\psi\rangle \sim |\phi\rangle \iff \exists \lambda \in \mathbb{C} \quad |\phi\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad (1.1.31)$$

Il suffit alors de prendre le sous espace de $\mathbb{P}\mathcal{H}$ dont les éléments sont de norme 1.

Cette petite discussion peut sembler anodine et bien lourde pour signifier que les états sont définis à une phase près. En réalité, nous verrons quand nous étudierons les symétries que la présence des espaces projectifs compliquent grandement la manière dont les opérations de symétrie peuvent agir sur les vecteurs états.

1.1.4 Evolution des états

Le dernier postulat de la mécanique quantique explique la manière dont les états quantiques évoluent dans le temps. Il est connu sous le nom d'*équation de Schrödinger* et s'écrit comme suit. Pour tout système quantique, il existe un opérateur hermitien particulier que l'on note H et qui représente l'énergie du système. Si le système est régi par le vecteur état $|\psi\rangle$, le système évoluera alors dans le temps selon l'équation,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (1.1.32)$$

Il semblerait alors que nous soyons armés pour étudier finalement des systèmes quantiques. En fait ce n'est pas totalement le cas, il reste un postulat qui explique la manière dont l'état est modifié lorsque l'on effectue une mesure. En effet, imaginons que l'on mesure l'observable physique \mathcal{O} d'un système quantique à l'instant $t = 0$. D'après la règle de Born nous obtenons une valeur $o_i \in \text{Sp } \mathcal{O}$. Si l'on effectue de nouveau cette mesure à un instant infinitésimalement ultérieur, on imagine trouver la même valeur o_i ce qui nous indique alors que suite à la mesure, l'état initial du système $|\psi\rangle$ se transforme en un état $|\psi'\rangle \in \ker(\mathcal{O} - o_i \text{id}_{\mathcal{H}})$. C'est ce que traduit ce dernier postulat qui nous indique que à la suite de la mesure de l'observable \mathcal{O} avec pour valeur obtenue o_i , l'état est alors,

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{P(o_i)}} \sum_{l=1}^{g_i} \langle\phi_i^l|\psi\rangle |\phi_i^l\rangle \quad (1.1.33)$$

Ces deux derniers postulats sont contradictoires l'un de l'autre. En effet, si la mécanique quantique est *vraie*, elle doit s'appliquer également à l'appareil de mesure et en particulier à l'action de la mesure, ainsi l'équation de Schrödinger devrait

prendre en compte la manière dont la mesure affecte l'état quantique. On pourrait alors imaginer que l'hamiltonien que nous utilisons habituellement n'est qu'une approximation et que l'hamiltonien réel est bien plus compliqué et inclus la manière dont une particule va interagir avec l'appareil de mesure. En réalité cela ne résout pas notre problème. Même avec un hamiltonien très compliqué l'équation de Schrödinger reste déterministe et ne peut donc tenir compte des phénomènes probabilistes décrits par la règle de Born. Ce que nous venons de décrire brièvement est plus connu sous le nom de *problème de la mesure*. La mécanique quantique serait-elle alors *pourrie* à la racine? En pratique la mécanique quantique décrite par ces postulats fournit des résultats plus que convaincants. Ainsi ce problème théorique *fondamental*, n'est en pratique qu'une chaussette sale cachée sous le tapis.

1.2 Matrices densité

Comme nous l'explique notamment la règle de Born, la mécanique quantique est intrinsèquement probabiliste. Toutefois, ce n'est pas la seule manière dont les probabilités peuvent intervenir en mécanique quantique. En effet, comme classiquement, on peut ignorer l'état réel du système et supposer être d'un état $|\phi_i\rangle$ avec une probabilité $p_i \in \mathbb{R}^+$. Un tel état est alors en général représenté par une *matrice densité* ρ définie par,

$$\rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (1.2.1)$$

où les états $|\phi_i\rangle$ sont quelconques (évidemment normalisés) et

$$\sum_i p_i = 1 \quad (1.2.2)$$

1.2.1 Propriétés basiques

On expose ici quelques propriétés basiques des matrices densité. Premièrement il est évident qu'elles sont hermitiennes,

$$\rho^\dagger = \rho \quad (1.2.3)$$

et qu'elles sont de trace égale à 1,

$$\text{tr } \rho = 1 \quad (1.2.4)$$

ce qui est une pure conséquence de la définition des probabilités p_i .

On peut également montrer que ces matrices sont positives. Pour cela considérons un état quelconque $|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \rho | \psi \rangle &= \langle \psi | \left(\sum_i p_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \right) | \psi \rangle \\ &= \sum_i p_i \langle \psi | \phi_i \rangle \langle \phi_i | \psi \rangle \\ &= \sum_i p_i \langle \psi | \phi_i \rangle \langle \psi | \phi_i \rangle^* \\ &= \sum_i p_i |\langle \psi | \phi_i \rangle|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Remarquons qu'elles ne sont pas forcément définies. Par exemple si l'on considère $\dim \mathcal{H} = n$, et que l'on en choisit une base orthonormée $\{|\phi_n\rangle\}$, la matrice densité définie par,

$$\rho = \sum_{k=0}^{n-1} p_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (1.2.5)$$

vérifie,

$$\langle \phi_n | \rho | \phi_n \rangle = 0 \quad (1.2.6)$$

Réciproquement, tout opérateur ρ de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ vérifiant,

- $\rho^\dagger = \rho$
- $\text{tr } \rho = 1$
- $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \setminus \{0\}, \langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$

peut définir une matrice densité. En effet, un tel opérateur étant hermitien, on peut le diagonaliser sur une base $\{|\phi_i\rangle\}$ et alors l'écrire sous la forme,

$$\rho = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (1.2.7)$$

où les λ_i sont les valeurs propres (qui sont réelles) de ρ . Comme $\text{tr } \rho = 1$, il vient bien $\sum_i \lambda_i = 1$. De plus, ρ étant positif, $\lambda_i \in \mathbb{R}^+$.

Finalement, notons qu'on peut toujours réécrire une matrice densité quelconque sous la forme,

$$\rho = \sum_i p'_i |\phi'_i\rangle \langle \phi'_i| \quad (1.2.8)$$

où les $|\phi'_i\rangle$ sont désormais orthonormés. Ce résultat découle du simple fait que ρ est hermitienne.

1.2.2 Mesures

La présence de matrice densité change alors légèrement la manière dont la mesure influe sur le système. En effet, un état n'est alors plus un *ket*, mais un opérateur ρ . Quelles sont alors les probabilités de mesurer la valeur propre o pour une observable physique \mathcal{O} , et comment l'état change-t-il après la mesure (en tant qu'état représenté par un opérateur) ?

Pour répondre à ces questions, nous reprenons les notations développées précédemment. Soit une observable physique \mathcal{O} , son opérateur hermitien associé O , ses valeurs propres o_i et une base orthonormée* $\{|\phi_i^l\rangle\}_{i, 1 \leq l \leq g_i}$. Nous pouvons alors écrire O sous la forme,

$$O = \sum_i o_i \sum_{l=1}^{g_i} |\phi_i^l\rangle \langle \phi_i^l| \quad (1.2.9)$$

Introduisons la notation,

$$P_i = \sum_{l=1}^{g_i} |\phi_i^l\rangle \langle \phi_i^l| \quad (1.2.10)$$

La lettre P n'est pas choisi au hasard. En effet, nous montrons que P_i est le projecteur sur $\ker(O - o_i \text{id}_{\mathcal{H}})$. Pour ce faire, il nous faudrait déjà montrer que $\text{Im } P_i = \ker(O -$

*. Nous choisissons ici la base orthonormée pour simplifier les calculs, remarquons que nous n'avions considéré qu'une base orthogonale précédemment.

$o_i \text{id}_{\mathcal{H}}$). Cette égalité est triviale à démontrer* et nous ne le ferons pas ici. Pour que P_i soit un projecteur il faut également que $P_i^2 = P_i$, ce qui se vérifie également très facilement. De plus on remarque,

$$P_i P_j = 0 \quad \forall i \neq j \quad (1.2.11)$$

Nous pouvons alors écrire

$$O = \sum_i o_i P_i \quad (1.2.12)$$

Et la règle de Born nous indique que,

$$P_\psi(o_i) = \langle \psi | P_i | \psi \rangle \quad (1.2.13)$$

et qu'une mesure donnant le résultat o_i transforme l'état $|\psi\rangle$ en le nouvel état,

$$|\psi'\rangle = \frac{P_i |\psi\rangle}{\sqrt{P_\psi(o_i)}} \quad (1.2.14)$$

Ces résultats se généralisent alors très facilement pour un état défini par la matrice densité,

$$\rho = \sum_j p_j |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j| \quad (1.2.15)$$

écrite dans une base orthonormée. La formule des probabilités totales nous indique alors facilement que,

$$\begin{aligned} P_\rho(o_i) &= \sum_j P_{\varphi_j}(o_i) p_j \\ &= \sum_j \langle \varphi_j | P_i p_j | \varphi_j \rangle \\ &= \sum_j \langle \varphi_j | P_i \rho | \varphi_j \rangle \end{aligned}$$

Soit alors plus compactement,

$$P_\rho(o_i) = \text{tr}(\rho P_i) \quad (1.2.16)$$

et la matrice densité est transformée comme si chacun de ses *bra* et *ket* étaient transformés, à savoir,

$$\rho' = \frac{P_i \rho P_i^\dagger}{\sqrt{P_\rho(o_i)}} = \frac{P_i \rho P_i}{\sqrt{P_\rho(o_i)}} \quad (1.2.17)$$

où l'on a utilisé le fait que P_i est hermitien (facile à vérifier).

Pour une discussion plus approfondie sur les matrices densité, la mesure et leur lien avec les produits tensoriels d'espace de Hilbert, le lecteur est invité à consulter les notes de cours de David Tong [9].

*. Pour toute difficulté, procéder par double inclusion. Pour le cas $\ker(O - o_i \text{id}_{\mathcal{H}}) \subset \text{Im} P_i$, remarquer que si $|\psi\rangle \in \ker(O - o_i \text{id}_{\mathcal{H}})$ alors $P_i |\psi\rangle = |\psi\rangle$. L'autre inclusion se montre en calculant $(O - o_i \text{id}_{\mathcal{H}})P_i = 0$ avec les notations précédentes.

1.3 Symétries

Supposons qu'un observateur étudie un système physique dans un repère \mathcal{R} . Comment se comporte le système pour un autre observateur qui l'étudie dans un autre repère $\mathcal{R}' = \mathcal{R} + \vec{a}$? Il est clair que les résultats physiques que l'on peut obtenir à partir de ces deux points de vue différents ne devraient pas changer. On dit alors que le système respecte une symétrie, ici la symétrie de translation.

De manière plus générale, on définit une symétrie comme le fait qu'un changement de point de vue du système n'influe pas sur la nature des résultats physiques obtenus. Plusieurs symétries des systèmes sont naturelles telles que les symétries de translation et rotation. Des symétries plus compliquées apparaissent quand nous étudions la physique quantique relativiste telles que les symétries par action d'une transformation de Lorentz.

Dans cette section nous exposons la manière dont les symétries agissent sur les états quantiques ainsi que leur lien avec la théorie des groupes. Nous montrons alors le célèbre *théorème de Wigner* et étudions quelques symétries basiques qui apparaissent en théorie quantique non relativiste.

1.3.1 Transformation générale des états

Avant d'étudier plus en profondeur les symétries, il importe d'être plus précis sur ce qu'elles sont réellement. Comme nous l'avons expliqué précédemment, les états quantiques physiques sont les rayons d'un espace de Hilbert \mathcal{H} . On définit alors une symétrie comme une application inversible

$$\begin{aligned} S : \mathbb{P}\mathcal{H} &\longrightarrow \mathbb{P}\mathcal{H} \\ \mathcal{R} &\longmapsto S\mathcal{R} \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

telle que les résultats d'une expérience physique soient invariants par cette application. En particulier, les probabilités sont conservées,

$$P(\mathcal{R}_1 \rightarrow \mathcal{R}_2) = P(S(\mathcal{R}_1) \rightarrow S(\mathcal{R}_2)) \quad (1.3.2)$$

(nous ajoutons les parenthèses à l'opérateur S pour la clarté des notations ici). Cette simple propriété nous permet déjà d'en déduire l'important *Théorème de Wigner* qui nous indique la manière dont les éléments de l'espace de Hilbert se transforment,

Théorème de Wigner

Toute symétrie d'un système quantique agit sur les états $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ sous la forme d'un opérateur

$$\begin{aligned} U(S) : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{H} \\ |\psi\rangle &\longmapsto U(S)|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

tel que $U(S)$ soit linéaire unitaire ou antilinéaire ou anti-unitaire, c'est à dire

$$\begin{aligned} \langle U(S)\psi | U(S)\phi \rangle &= \langle \psi | \phi \rangle \\ U(S)(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) &= \alpha U(S)|\psi\rangle + \beta U(S)|\phi\rangle \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

ou

$$\begin{aligned} \langle U(S)\psi | U(S)\phi \rangle &= \langle \psi | \phi \rangle^* \\ U(S)(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) &= \alpha^* U(S)|\psi\rangle + \beta^* U(S)|\phi\rangle \end{aligned} \quad (1.3.5)$$

où la notation $*$ désigne le complexe conjugué.

Démonstration. Pour montrer ce résultat nous suivons la preuve de Weinberg [11]. Considérons alors une base orthonormée $|\psi_k\rangle \in \mathcal{R}_k$ de l'espace de Hilbert \mathcal{H} , où les \mathcal{R}_k dénotent les rayons de \mathcal{H} . Sous l'action de S ,

$$\mathcal{R}_k \xrightarrow{S} S\mathcal{R}_k \quad (1.3.6)$$

Choisissons alors des vecteurs états $|\psi'_k\rangle \in S\mathcal{R}_k$. L'orthonormalité des $|\psi_k\rangle$ et la conservation de la probabilité par S , implique l'orthonormalité des $|\psi'_k\rangle$. En effet,

$$\begin{aligned} P(\mathcal{R}_k \rightarrow \mathcal{R}_l) = P(S\mathcal{R}_k \rightarrow S\mathcal{R}_l) &\iff |\langle \psi_k | \psi_l \rangle|^2 = |\langle \psi'_k | \psi'_l \rangle|^2 \\ &\iff |\langle \psi'_k | \psi'_l \rangle|^2 = \delta_{kl} \\ &\iff \langle \psi'_k | \psi'_l \rangle = \delta_{kl} \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que $\langle \psi'_k | \psi'_k \rangle = 1 \geq 0$ à la dernière équivalence. Il n'est pas difficile de montrer que ces vecteurs forment aussi une base. En effet, supposons que ce ne soit pas le cas, il existe alors un vecteur $|\phi\rangle \in \mathcal{R}$ qui est orthogonal à tous les $|\psi'_k\rangle$. La transformation S étant inversible, on peut alors trouver un vecteur $|\varphi\rangle \in S^{-1}\mathcal{R}$. La conservation de la probabilité nous indique,

$$0 = |\langle \psi'_k | \phi \rangle|^2 = |\langle \psi_k | \varphi \rangle|^2 \quad (1.3.7)$$

ce qui est absurde car les $|\psi_k\rangle$ forment une base complète de \mathcal{H} .

Choisissons arbitrairement $|\psi_1\rangle$ et définissons $\forall k$,

$$|\phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_k\rangle + |\psi_1\rangle] \in \mathcal{T}_k \quad (1.3.8)$$

des vecteurs états appartenant à des rayons \mathcal{T}_k . Soient alors $|\phi'_k\rangle \in S\mathcal{T}_k$ que l'on décompose sur la base des $|\psi'_k\rangle$,

$$|\phi'_k\rangle = \sum_k a_{kl} |\psi'_l\rangle \quad (1.3.9)$$

Par conservation de la probabilité il vient,

$$\frac{1}{2}[\delta_{lk} + \delta_{1l}] = |\langle \phi_k | \psi_l \rangle|^2 = |\langle \phi'_k | \psi'_l \rangle|^2 = a_{kl}^2 \quad (1.3.10)$$

Soit alors,

$$|a_{kk}| = |a_{k1}| = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ et } a_{kl} = 0, \quad l \notin \{k, 1\} \quad (1.3.11)$$

Supposons alors par exemple, $a_{kk} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$. Nous pouvons redéfinir simplement $|\psi'_k\rangle \rightarrow e^{i\theta} |\psi'_k\rangle \in S\mathcal{R}_k$. On peut ainsi toujours se ramener à $a_{kk} = a_{k1} = \frac{1}{2}$. On note alors les états ainsi définis par $U |\phi_k\rangle$ et $U |\psi'_k\rangle$ et il vient alors,

$$U \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_k\rangle + |\psi_1\rangle] = U |\phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[U |\psi_k\rangle + U |\psi_1\rangle] \quad (1.3.12)$$

Nous commençons alors à entrevoir une forme de linéarité dans U , toutefois on ne peut pas à ce stade parler d'opérateurs car U n'est même pas défini sur tous les

états $|\psi\rangle$. C'est précisément ce que nous étudions désormais. Soit un état $|\psi\rangle \in \mathcal{R}$ d'un rayon arbitraire \mathcal{R} . On peut l'écrire*,

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle \quad (1.3.13)$$

Un état $|\psi'\rangle \in S\mathcal{R}$ peut également s'écrire,

$$|\psi'\rangle = \sum_k c'_k U |\psi_k\rangle \quad (1.3.14)$$

La conservation de la probabilité nous indique encore une fois que,

$$|\langle\psi_k|\psi\rangle|^2 = |\langle U\psi_k|\psi'\rangle|^2 \quad (1.3.15)$$

Ce qui se traduit sur les coefficients par,

$$|c_k|^2 = |c'_k|^2 \quad (1.3.16)$$

Nous pouvons utiliser la conservation de la probabilité sur les $|\phi_k\rangle$ pour obtenir de la même manière,

$$|c_k + c_1|^2 = |c'_k + c'_1|^2 \quad (1.3.17)$$

On peut réécrire cette dernière égalité en se servant de la précédente,

$$\begin{aligned} |c_k + c_1|^2 = |c'_k + c'_1|^2 &\iff |c_k|^2 + c_k c_1^* + c_k^* c_1 + |c_1|^2 = |c'_k|^2 + c'_k c_1'^* + c'_k^* c_1' + |c_1'|^2 \\ &\iff c_k c_1^* + c_k^* c_1 = c'_k c_1'^* + c'_k^* c_1' \\ &\iff \operatorname{Re}(c_k c_1^*) = \operatorname{Re}(c'_k c_1'^*) \end{aligned}$$

De plus la première relation nous indique,

$$\begin{aligned} |c_k|^2 |c_1|^2 = |c'_k|^2 |c_1'|^2 &\iff |c_k c_1^*|^2 = |c'_k c_1'^*|^2 \\ &\iff \operatorname{Re}(c_k c_1^*)^2 + \operatorname{Im}(c_k c_1^*)^2 = \operatorname{Re}(c'_k c_1'^*)^2 + \operatorname{Im}(c'_k c_1'^*)^2 \\ &\iff \operatorname{Im}(c_k c_1^*) = \pm \operatorname{Im}(c'_k c_1'^*) \end{aligned}$$

Puis il vient alors,

$$c_k c_1^* = c'_k c_1'^* \text{ ou } c_k c_1^* = (c'_k c_1'^*)^* \quad (1.3.18)$$

Nous voyons ici apparaître le caractère linéaire ou antilinéaire de l'opérateur U que nous construisons. Cependant, à ce stade, nous avons seulement montré que pour un état $|\psi\rangle$, décomposé sur la base des $|\psi_k\rangle$, chacun de ses coefficients transformés peuvent vérifier l'une ou l'autre des relations précédentes. Il importe alors de montrer que la même relation doit être vérifiée par tous les coefficients de l'état $|\psi\rangle$. Il restera alors enfin seulement à montrer que ce même choix doit être fait pour tous les états $|\psi\rangle$. Nous commençons par montrer le premier point.

Supposons qu'il existe $k \neq l$ tels que $k \neq 1 \neq l$ et tel que

$$c_k c_1^* = c'_k c_1'^* \text{ et } c_l c_1^* = (c'_l c_1'^*)^* \quad (1.3.19)$$

Soit l'état défini par

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|\psi_1\rangle + |\psi_k\rangle + |\psi_l\rangle] \quad (1.3.20)$$

*. Et on parlera parfois par abus de langage de l'état c pour alléger les notations.

Pour cet état $c_i \in \mathbb{R}$ et pour un état $|\phi'\rangle$ du rayon transformé, les égalités suivantes sont triviales

$$(c'_i c_1^*)^* = c_i c_1^* = (c_i c_1^*)^* = c'_i c_1^* \quad (1.3.21)$$

impliquant alors que $c'_i c_1^* \in \mathbb{R}$. Ecrivons alors,

$$|\phi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [\alpha U |\psi_1\rangle + \beta U |\psi_k\rangle + \gamma U |\psi_l\rangle] \quad (1.3.22)$$

avec $|\alpha| = |\beta| = |\gamma| = 1$ et $\alpha\beta^* = \alpha\gamma^* = 1 = \alpha\alpha^*$ puis alors, $\alpha = \beta = \gamma$ puis,

$$|\phi'\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{3}} [U |\psi_1\rangle + U |\psi_k\rangle + U |\psi_l\rangle] \quad (1.3.23)$$

On applique désormais la conservation de la probabilité sous la forme,

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi'|\psi'\rangle \quad (1.3.24)$$

pour obtenir les relations (les c et c' sont de nouveau les coefficients de $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$)

$$|c_1 + c_k + c_l|^2 = |c'_1 + c'_k + c'_l|^2 \quad (1.3.25)$$

soit alors,

$$|c_1 + c_k + c_l|^2 = \left| c'_1 + c_k \left(\frac{c_1}{c'_1} \right)^* + c_l^* \frac{c_1}{c'_1} \right|^2 \quad (1.3.26)$$

puis en divisant par $|c_1|^2 = |c'_1|^2$,

$$\left| 1 + \frac{c_k}{c_1} + \frac{c_l}{c_1} \right|^2 = \left| 1 + \frac{c_k}{c_1} + \frac{c_l^*}{c_1^*} \right|^2 \quad (1.3.27)$$

qui se réécrit facilement sous la forme

$$\operatorname{Re} \left(\frac{c_k}{c_1} \frac{c_l^*}{c_1^*} \right) = \operatorname{Re} \left(\frac{c_k}{c_1} \frac{c_l}{c_1} \right) \quad (1.3.28)$$

que l'on peut écrire,

$$\operatorname{Im} \left(\frac{c_k}{c_1} \right) \operatorname{Im} \left(\frac{c_l}{c_1} \right) = 0 \quad (1.3.29)$$

d'où $\frac{c_k}{c_1} \in \mathbb{R}$ ou $\frac{c_l}{c_1} \in \mathbb{R}$. Par exemple, $\frac{c_k}{c_1} \in \mathbb{R}$ et il vient trivialement

$$c'_k c_1^* = c_k c_1^* = (c_k c_1^*)^* \quad (1.3.30)$$

et les termes c_k et c_l vérifient alors la même relation.

Il vient alors,

$$c_k c_1^* = c'_k c_1^*, \forall k \text{ ou } c_k c_1^* = (c'_k c_1^*)^*, \forall k \quad (1.3.31)$$

On définit $U |\psi\rangle$ en choisissant sa phase, dans le premier cas on adapte la phase de $|\psi'\rangle$ de sorte que $c_1 = c'_1$, dans le second cas, on l'adapte de sorte que $c_1^* = c'_1$ et il vient alors,

$$U \left(\sum_k c_k |\psi_k\rangle \right) = \sum_k c_k U |\psi_k\rangle \text{ ou } U \left(\sum_k c_k |\psi_k\rangle \right) = \sum_k c_k^* U |\psi_k\rangle \quad (1.3.32)$$

Il reste finalement seulement à montrer que si l'une de ces deux relations est vérifiée pour un jeu coefficients $\{c_k\}$, la même sera vérifiée pour un autre jeu de

coefficients $\{b_k\}$.

Supposons alors par l'absurde qu'il existe deux états telles que,

$$U\left(\sum_k a_k |\psi_k\rangle\right) = \sum_k a_k U|\psi_k\rangle \quad \text{ou} \quad U\left(\sum_k b_k |\psi_k\rangle\right) = \sum_k b_k^* U|\psi_k\rangle \quad (1.3.33)$$

où les a_k n'ont pas tous la même phase et les b_k non plus (sinon ces équations sont les mêmes). La conservation de la probabilité sur ces deux états indiquent que

$$\left|\sum_k a_k b_k^*\right|^2 = \left|\sum_k a_k b_k\right|^2 \quad (1.3.34)$$

que l'on réécrit sous la forme,

$$\sum_{ij} \text{Im}(a_i^* a_j) \text{Im}(b_i^* b_j) = 0 \quad (1.3.35)$$

Nous construisons alors un troisième état de la manière suivant :

- S'il existe $k \neq l$ tels que $a_k^* a_l, b_k^* b_l \notin \mathbb{R}$. Définissons $c_i = 0$ pour tout $i \notin \{k, l\}$ et $c_k = 1, c_l = e^{i\theta} \notin \mathbb{R}$.
- S'il existe $k \neq l$ tels que $a_k^* a_l \in \mathbb{R}$ et $b_k^* b_l \notin \mathbb{R}$. Comme nous avons choisi les a_i avec des phase différentes il existe forcément $m \neq n$ tels que $(m, n) \neq (k, l)$ et $a_m^* a_n \notin \mathbb{R}$. Si $b_m^* b_n \notin \mathbb{R}$, on définit $c_i = 0$ pour tout $i \notin \{m, n\}$ et $c_m = 1, c_n = e^{i\theta} \notin \mathbb{R}$. Si $b_m^* b_n \in \mathbb{R}$, on définit $c_i = 0$ pour tout $i \notin \{k, l, m, n\}$ et c_k, c_l, c_m, c_n des nombres complexes avec des phases toutes différentes.
- S'il existe $k \neq l$ tels que $a_k^* a_l \notin \mathbb{R}$ et $b_k^* b_l \in \mathbb{R}$. On réalise le raisonnement précédent avec les rôles de a et b inversés.

Dans tous les cas nous obtenons un état $\sum_k c_k |\psi_k\rangle$ tel que

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \text{Im}(a_i^* a_j) \text{Im}(c_i^* c_j) &\neq 0 \\ \sum_{ij} \text{Im}(b_i^* b_j) \text{Im}(c_i^* c_j) &\neq 0 \end{aligned}$$

Or l'état c doit se transformer comme a ou b et au moins une des deux relations précédentes doit être vérifiée*, nous sommes alors face à une contradiction. Ainsi U est soit linéaire soit antilinéaire. L'unitarité ou l'antiunitarité se démontrent trivialement. \square

Remarquons que les symétries telles que nous venons de les définir agissent premièrement sur les rayons et non pas sur les vecteurs. A première vue cela peut paraître insignifiant, mais nous verrons quand nous étudierons les rotations, et plus particulièrement le spin, que c'est en réalité cet aspect qui permet aux fermions d'exister. Considérons alors un état $|\psi\rangle \in \mathcal{R}$ et effectuons une première transformation de symétrie S_1 . Nous obtenons un état $U(S_1) |\psi\rangle$ appartenant au rayon $S_1 \mathcal{R}$. Si nous effectuons de nouveau une transformation de symétrie S_2 sur ce dernier nous obtenons l'état $U(S_2)U(S_1) |\psi\rangle \in S_2 S_1 \mathcal{R}$. Cet état est alors à comparer à l'état que nous aurions obtenu si nous avions effectué directement la transformation de symétrie $S_2 S_1$ (il est facile de vérifier que c'en est aussi une, plus généralement les transformations de symétrie forment un groupe), à savoir l'état $U(S_2 S_1) |\psi\rangle \in S_2 S_1 \mathcal{R}$.

. Par exemple, si c se transforme comme a , la conservation de la probabilité avec b donne $\sum_{ij} \text{Im}(b_i^ b_j) \text{Im}(c_i^* c_j) = 0$. De la même manière si c se transforme comme b

Ces deux états appartenant au même rayon $S_2 S_1 \mathcal{R}$, ils ne peuvent différer que d'une phase,

$$U(S_2)U(S_1)|\psi\rangle = e^{i\theta}U(S_2 S_1)|\psi\rangle \quad (1.3.36)$$

on peut montrer, mais nous ne le ferons pas ici *, que la phase θ ne dépend en général pas de l'état $|\psi\rangle$ qui subit la transformation. Lorsque $\theta = 0$, les vecteurs forment une représentation linéaire du groupe des transformations de symétrie, si $\theta \neq 0$, on dit qu'ils forment une représentation projective.

Tous les groupes de transformation de symétrie n'admettent pas forcément de représentations projectives. Cependant, s'ils en admettent, il est en général possible d'étendre le groupe considéré pour éliminer les représentations projectives. Weinberg expose la manière dont ce processus est effectué lorsqu'il considère le groupe de transformations de Poincaré. Ce groupe peut s'identifier à $SL(2, \mathbb{C})/\mathbb{Z}_2$, groupe que l'on peut étendre à $SL(2, \mathbb{C})$ pour éliminer les représentations projectives. Nous ferons la même chose lorsque nous considérerons les rotations $SO(3) \simeq SU(2)/\mathbb{Z}_2$, et que nous étendrons ce groupe à $SU(2)$.

Revenons sur la structure des transformations de symétrie. En mécanique quantique, il y a un certain type de groupes que nous rencontrerons régulièrement, à savoir les groupes de Lie. Ces groupes ont la particularité d'être des variétés différentielles et peuvent en tant que telles être localement décrits par un vecteur $\theta \in \mathbb{R}^n$, où n est la dimension du groupe en tant que variété. On peut alors localement décrire les éléments d'un groupe de Lie g par $g(\theta)$ pour $\theta \in V$ un ouvert de \mathbb{R}^n . En tant que groupe,

$$g(\theta) \cdot g(\theta') = g(f(\theta, \theta')) \quad (1.3.37)$$

ce qui se décrit sur les opérateurs agissant sur les vecteurs états par

$$U(\theta)U(\theta') = U(f(\theta, \theta')) \quad (1.3.38)$$

dans le cas où nous considérons des représentations classiques non projectives du groupe G .

1.3.2 Translations et quantité de mouvement

On s'intéresse désormais à la manière dont les translations transforment les états quantiques.

Considérons un état quantique $|\psi\rangle$. Nous souhaitons déterminer la manière dont cet état est transformé sous l'effet d'une translation. Une translation est définie par l'opération

$$x^i \longrightarrow x^i + a^i \quad (1.3.39)$$

Pour un vecteur \vec{a} fixé on définit la translation de vecteur \vec{a} , comme l'application

$$\begin{aligned} T_{\vec{a}} : \mathbb{R}^3 &\longrightarrow \mathbb{R}^3 \\ \vec{x} &\longmapsto \vec{x} + \vec{a} \end{aligned}$$

L'ensemble,

$$\mathbf{T} = \{T_{\vec{a}} \mid \vec{a} \in \mathbb{R}^3\} \quad (1.3.40)$$

*. Voir S. Weinberg *The Quantum Theory of Fields* Vol.1 Chap. 2 pour plus d'informations sur ce phénomène et plus généralement sur les représentations projectives.

forme un groupe abélien pour la loi de composition \circ . Il est de plus évident que,

$$T_{\vec{a}} \circ T_{\vec{b}} = T_{\vec{a}+\vec{b}} \quad (1.3.41)$$

Le théorème de Wigner indique que ce groupe induit une transformation unitaire sur les états quantiques,

$$|\psi\rangle \xrightarrow{T_{\vec{a}}} U(T_{\vec{a}}) |\psi\rangle \quad (1.3.42)$$

Où U est un opérateur unitaire et linéaire ou antiunitaire et antilinéaire. On notera plus simplement, $U(T_{\vec{a}}) = U(\vec{a})$. De plus, U forme une représentation du groupe \mathbf{T} ,

$$U(\vec{a})U(\vec{b}) = U(\vec{a} + \vec{b}) \quad (1.3.43)$$

(on admet ce résultat sans s'occuper des possibles représentations projectives). De plus,

$$U(\vec{0}) = \text{id}_{\mathcal{H}} \quad (1.3.44)$$

Qui est un opérateur linéaire et unitaire. Comme T est connexe, toute translation est reliée par un chemin continu à $T_{\vec{0}}$, ainsi tout opérateur $U(\vec{a})$ est relié à $\text{id}_{\mathcal{H}}$ par un chemin continu et tout opérateur $U(\vec{a})$ est unitaire et linéaire quelque soit $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$. De manière plus générale, pour un groupe de Lie G , les éléments de la composante connexe de l'identité sont représentés par des opérateurs unitaires. Ce résultat, bien qu'intuitif, n'est pas si simple à démontrer et nous ne le ferons pas ici.

Dans un voisinage de $\vec{0}$, nous pouvons écrire,

$$U(\vec{\varepsilon}) = 1 - i\varepsilon^i T_i + \dots \quad (1.3.45)$$

où T^i forment une base de la représentation de l'algèbre de Lie de \mathbf{T} . (Remarquons aussi que nous avons remplacé $\text{id}_{\mathcal{H}}$ par 1.) Comme \mathbf{T} est de dimension 3, son algèbre de Lie est aussi de dimension 3, d'où $i \in \{1, 2, 3\}$. Les T^i vérifient aussi les relations de commutation de l'algèbre de Lie de \mathbf{T} , qui sont très simples car \mathbf{T} est abélien, c'est à dire,

$$[T_i, T_j] = 0, \quad \forall i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (1.3.46)$$

Remarquons que U est unitaire, forçant alors les T_i à être hermitiennes, elles peuvent donc représenter des observables physiques.

Il est très simple d'obtenir une formule pour U quelque soit la translation \vec{a} ,

$$U(\vec{a}) = \lim_{n \rightarrow \infty} U\left(\frac{\vec{a}}{N}\right)^N = e^{-i\vec{a} \cdot \vec{T}} \quad (1.3.47)$$

où l'on a noté $\vec{T} = (T_1, T_2, T_3)$.

Nous avons donc déterminé la forme que prennent les translations représentées sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} . Toutefois, nous ne savons toujours rien de plus sur les matrices T , outre le fait qu'elles sont hermitiennes. C'est d'ailleurs ceci qui nous pousse à leur trouver un sens plus profond, elles pourraient correspondre à des observables physiques. Pour ce faire, nous imposons une condition de plus sur ces transformations de translation, à savoir le fait qu'elles translatent bien les états quantiques d'une quantité \vec{a} . Cela se traduit par le fait que, pour une particule n , l'opérateur position \hat{x}_n associé à cette particule doit se transformer sous la forme,

$$U(\vec{a})^{-1} \hat{\mathbf{X}}_n U(\vec{a}) = \hat{\mathbf{X}}_n + \vec{a} \text{id}_{\mathcal{H}} \quad (1.3.48)$$

Ce qui s'écrit alors pour une transformation infinitésimale,

$$i\varepsilon_j T^j \hat{\mathbf{X}}_n - i\varepsilon_i \hat{\mathbf{X}}_n T^i = \vec{\varepsilon} \quad (1.3.49)$$

En identifiant les coefficients de $\vec{\varepsilon}$, de chaque côté de cette équation, il vient,

$$[\hat{X}_n^i, T^j] = i\delta_{ij} \quad (1.3.50)$$

On remarque alors que $\hbar T^j$ vérifie les relations de commutations associées à l'opérateur quantité de mouvement et on identifie alors $\hbar T^j = \hat{P}^j$. En règle générale, nous avons,

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_n \hat{\mathbf{P}}_n \quad (1.3.51)$$

où l'indice n réfère à chaque particule du système considéré, et il vient alors,

$$[\hat{X}_n^i, \hat{P}_m^j] = i\hbar\delta_{mn}\delta_{ij} \quad (1.3.52)$$

On peut alors naturellement définir la base classique des états propres de position à une particule. Considérons un état propre de $\hat{\mathbf{X}}$ associé à la valeur propre $\vec{0}$. On le note $|\vec{0}\rangle$. On définit alors les états $|\vec{x}\rangle$ par,

$$|\vec{x}\rangle = U(\vec{x}) |\vec{0}\rangle \quad (1.3.53)$$

On peut calculer leur position,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{X}} |\vec{x}\rangle &= \hat{\mathbf{X}} U(\vec{x}) |\vec{0}\rangle \\ &= U(\vec{x}) (\hat{\mathbf{X}} + \vec{x}) |\vec{0}\rangle \\ &= \vec{x} U(\vec{x}) |\vec{0}\rangle \\ &= \vec{x} |\vec{x}\rangle \end{aligned}$$

qui montre alors bien que $|\vec{x}\rangle$ est localisé en \vec{x} .

On peut alors décomposer chaque état $|\psi\rangle$ sur cette base en faisant apparaître la fonction d'onde $\psi(\vec{x})$,

$$|\psi\rangle = \int d^3\vec{x} \psi(\vec{x}) |\vec{x}\rangle \quad (1.3.54)$$

De la même manière on peut définir des états propres de quantité de mouvement* que l'on note $|\vec{p}\rangle$ et qui vérifient,

$$\hat{\mathbf{P}} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle \quad (1.3.55)$$

Il vient alors les relations connues de la mécanique quantique,

$$\langle \vec{p} | \vec{x} \rangle = \langle \vec{p} | e^{-i\hat{\mathbf{P}} \cdot \vec{x} / \hbar} | \vec{x} \rangle = e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar} \langle \vec{p} | \vec{0} \rangle \quad (1.3.56)$$

*. On peut le faire exactement de la même manière en définissant les translations dans l'espace des quantités de mouvement et en montrant qu'une base de l'algèbre de Lie associée sont les opérateurs de position.

que l'on décide de normaliser sous la forme,

$$\langle \vec{p} | \vec{0} \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \quad (1.3.57)$$

de sorte que* le complexe conjugué de cette quantité nous donne l'onde plane classique pour une particule de quantité de mouvement \vec{p} ,

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle^* = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x} / \hbar} \quad (1.3.58)$$

Cette normalisation est surtout un choix qui fixe le produit scalaire sur la base des quantités de mouvement de sorte que,

$$\langle \vec{y} | \vec{x} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \implies \langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{q} - \vec{p}) \quad (1.3.59)$$

La démonstration de cette implication est facile.

1.3.3 Rotations et moment angulaire

Nous nous intéressons désormais aux rotations qui agissent sous la forme,

$$x^i \longrightarrow R_{ij} x^j \quad (1.3.60)$$

où $R \in SO(3)$ est une matrice de rotation dans un espace de dimension 3. Comme précédemment, elles se représentent sur les vecteurs de \mathcal{H} sous la forme,

$$|\psi\rangle \xrightarrow{R} U(R) |\psi\rangle \quad (1.3.61)$$

Si nous procédons comme pour les translations, à ce stade nous dirions que les matrices U fournissent une représentation du groupe $SO(3)$, c'est-à-dire,

$$U(R_1 R_2) = U(R_1) U(R_2) \quad (1.3.62)$$

Nous pourrions alors décomposer U comme une somme directe de représentations irréductibles de $SO(3)$,

$$U(R) = D^{(j_1)}(R) \oplus D^{(j_2)}(R) \oplus \dots \oplus D^{(j_k)}(R) \quad (1.3.63)$$

$$= \begin{pmatrix} D^{(j_1)}(R) & & & \\ & D^{(j_2)}(R) & & \\ & & \ddots & \\ & & & D^{(j_k)}(R) \end{pmatrix} \quad (1.3.64)$$

où les $D^{(j_i)}$ sont des matrices de dimension $2j_i + 1$, $j_i \in \mathbb{N}$, fournissant des représentations irréductibles de $SO(3)$ [†]. Il est alors naturel de définir comme *particule* les composantes d'un état $|\psi\rangle$ se transformant sous une de ces représentations irréductibles. Ces particules auraient alors un spin $j_i \in \mathbb{N}$. Ainsi, les particules de spin demi-entier n'apparaissent pas, ce qui ne nous arrange guère étant donné que nous les observons dans la nature!

*. En réalité nous cachons ici une subtilité, liée au fait que $\langle \vec{p} | \vec{0} \rangle = \langle \vec{p} = \vec{0} | \vec{0} \rangle$ lorsque l'on fait le calcul à partir des translations dans l'espace des quantités de mouvement. Ainsi, le produit scalaire $\langle \vec{p} | \vec{0} \rangle$ ne dépend pas de \vec{p} et nous pouvons le normaliser comme nous venons de le faire.

†. En réalité, $U(R)$ pourrait s'écrire sous cette forme à un changement de base près, que nous supposons faire ici.

Ce problème tire son origine des représentations projectives. Considérons alors plus rigoureusement des matrices U qui vérifient la relation,

$$U(R_1)U(R_2) = e^{i\phi(R_1, R_2)}U(R_1R_2) \quad (1.3.65)$$

On peut montrer que $\phi(R_1, R_2) = \pm 1^*$. Ainsi, pour chaque représentation de $SO(3)$, nous avons en réalité 2 représentations correspondant aux représentations projectives. Cela nous indique que le groupe à étudier n'est en réalité pas $SO(3) = SU(2)/\mathbb{Z}_2$ mais plutôt $SU(2)$. Il apparaît alors bien toutes les représentations de dimensions $2j + 1$ pour $j \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$, et les fermions existent bien !

Nous reprenons alors le raisonnement comme pour les translations et étudions une rotation infinitésimalement proche de l'identité $R = 1 + r$. r est antisymétrique (facile à vérifier en utilisant $R^T R = I$). On peut alors écrire,

$$U(R(\vec{\phi})) = 1 + \frac{i}{2}r_{ij}L_{ij} + \dots \quad (1.3.66)$$

où les $L_{ij} \in \mathfrak{so}(3)$ sont 3 matrices hermitiennes (pour que U soit unitaire) et que l'on définit antisymétriques en i et j , $L_{ij} = -L_{ji}$. On veut définir les rotations de sorte que,

$$U(R)^{-1}\hat{\mathbf{P}}U(R) = R\hat{\mathbf{P}} \quad (1.3.67)$$

soit alors, pour la transformation infinitésimale précédente,

$$(1 - \frac{i}{2}r_{ij}L_{ij} + \dots)\hat{\mathbf{P}}(1 + \frac{i}{2}r_{kl}L_{kl} + \dots) = (1 + r)\hat{\mathbf{P}} \quad (1.3.68)$$

puis en identifiant les coefficients d'ordre 1 en r , nous obtenons,

$$-iL_{ki}\hat{P}^k + iL_{ki}\hat{P}^k = \hat{P}^i \quad (1.3.69)$$

ou encore,

$$[L_{ki}, \hat{P}^k] = i\hat{P}^i \quad (1.3.70)$$

où nous ne sommes pas sur k dans cette dernière expression. Définissons alors,

$$L_i = \varepsilon^{ijk}L_{jk} \quad (1.3.71)$$

où ε est le symbole totalement antisymétrique. On a de manière équivalente,

$$L_{jk} = \varepsilon^{ijk}L_i \quad (1.3.72)$$

Les relations de commutation deviennent,

$$\varepsilon^{jki}[L_j, \hat{P}^k] = i\hat{P}^i \quad (1.3.73)$$

où nous sommes implicitement sur j mais pas sur k . Nous pouvons inverser cette expression pour finalement obtenir (nous renommons au passage quelques indices),

$$[L_i, \hat{P}^j] = i\varepsilon^{ijk}\hat{P}^k \quad (1.3.74)$$

*. Ce résultat n'est pas trivial et ne sera pas détaillé ici. Il vient majoritairement du fait que $\pi(SO(3)) = \mathbb{Z}_2$. Pour plus de précisions il faut consulter un cours sur les représentations projectives ainsi que sur la topologie algébrique.

où nous sommes sur i dans cette dernière expression. Nous retrouvons alors les relations de commutation qui sont vérifiées par le moment angulaire et identifions (ou définissons) le moment angulaire par,

$$\widehat{J}_i = L_i \quad (1.3.75)$$

Le groupe de Lie $SO(3)$ (ou $SU(2)$, comme nous avons remarqué que c'était le groupe qui nous intéressait réellement ici) est une variété différentielle de dimension 3, on peut donc la paramétrer dans un voisinage de l'identité par un vecteur $\vec{\phi} \in \mathbb{R}^3$ et écrire,

$$U(R(\vec{\phi})) = 1 + i\phi_i J_i + \dots \quad (1.3.76)$$

puis pour $\vec{\theta} \in \mathbb{R}^3$ il vient,

$$U(R(\vec{\theta})) = e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{J}} \quad (1.3.77)$$

où $\vec{J} = (J_1, J_2, J_3)$ et $J_i \in \mathfrak{so}(3)$ (plus précisément dans la représentation de $\mathfrak{so}(3)$ agissant sur \mathcal{H})*. Les J_i forment une base de $\mathfrak{so}(3) \simeq \mathfrak{su}(2)$ et vérifient les relations de commutation,

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon^{ijk} J_k \quad (1.3.78)$$

1.3.4 Translations dans le temps et point de vue de Heisenberg

Une autre symétrie importante se réfère au fait que les mesures effectuées ne doivent pas dépendre de l'origine des temps fixée. Autrement dit, les transformations

$$S : t \mapsto t + \tau \quad (1.3.79)$$

ne doivent pas changer la physique du système. Un rayon \mathcal{R} engendré par un vecteur état $|\psi(t)\rangle$ est transformé en un rayon $S\mathcal{R}$ engendré par $|\psi(t + \tau)\rangle$, impliquant alors que

$$|\psi(t + \tau)\rangle = U(\tau) |\psi(t)\rangle \quad (1.3.80)$$

où U est unitaire[†].

En réalité ce résultat n'est pas si étonnant, il nous était déjà donné par l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (1.3.81)$$

nous indiquant alors que

$$U(\tau) = e^{-iH\tau/\hbar} \quad (1.3.82)$$

H étant hermitien, U est bien unitaire.[‡]

*. Il est légitime de se demander s'il est possible pour n'importe quel groupe de Lie d'écrire ses éléments sous la forme d'une exponentielle agissant sur l'algèbre de Lie associée. Ce résultat est en général faux, il suffit de prendre un élément qui n'est pas dans la composante connexe de l'identité. Enfin, il n'y a même pas de surjection de l'application exponentielle dans la composante connexe de l'identité. Toutefois, ce dernier résultat est vrai pour un groupe compact.

†. Encore une fois, l'unitarité vient du fait que cette transformation représente un élément du groupe des translations dans le temps dans la composante connexe de l'identité, car ce groupe est connexe !

‡. Remarquons que l'on pourrait prendre l'argument dans l'autre sens, en forçant l'invariance par translation dans le temps. Les translations dans le temps forment un groupe de Lie de dimension 1, l'algèbre de Lie correspondante est alors aussi de dimension 1, et l'on pourrait définir l'hamiltonien H comme ce générateur de l'algèbre de Lie.

De la sorte, on peut éliminer toute dépendance temporelle des états quantiques en écrivant,

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle \quad (1.3.83)$$

et ainsi inclure toute dépendance temporelle dans les opérateurs sous la forme,

$$O(t) = U(t)^\dagger O U(t) \quad (1.3.84)$$

Ce nouveau formalisme, complètement équivalent au formalisme de Schrödinger, prend le nom de *point de vue d'Heisenberg*. La dynamique est alors incluse dans les opérateurs et non plus dans les états sous la forme de l'équation,

$$i\hbar \frac{d}{dt} O_H(t) = [O_H(t), H] \quad (1.3.85)$$

où l'on a introduit les indices H pour indiquer le point de vue d'Heisenberg. Remarquons au passage que $H_H = H_S$ que l'on note alors simplement H .

2 Etats composés de plusieurs particules

Nous nous intéressons désormais aux aspects multiparticulaires, c'est à dire la manière dont l'espace de Hilbert, les états physiques et leurs propriétés se transforment lorsque l'on considère des systèmes composés de plusieurs particules.

2.1 Particules identiques

Avant toute chose, il sera intéressant pour nous d'étudier les systèmes avec des particules identiques. En particulier, nous revenons sur l'origine des *statistiques* des particules. Dans un premier temps, nous exposons la manière dont la présence de particules identiques influe sur la géométrie de l'espace des configurations. Nous utilisons alors les résultats obtenus sur cette géométrie afin d'en déduire les statistiques que peuvent respecter les particules.

Comme nous le verrons, les statistiques possibles dépendent de la dimension de l'espace considéré, et pour cette raison nous travaillerons, jusqu'à qu'il ne soit précisé autre chose, avec des particules évoluant dans \mathbb{R}^d .

2.1.1 Aspects géométriques classiques

Nous nous penchons en premier lieu sur les aspects géométriques (alors purement classiques), qui apparaissent en présence de n particules identiques. Les références pour cette section sont nombreuses et on s'appuiera notamment sur l'article [6].

On considère alors disposer de N particules identiques évoluant dans \mathbb{R}^d . Pour un observateur, les configurations sont des vecteurs

$$(x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{Nd} \quad (2.1.1)$$

où $x_i \in \mathbb{R}^d$ est un vecteur indiquant la position d'une particule. On suppose de plus que les particules ne peuvent pas se rencontrer c'est-à-dire que $x_i \neq x_j$. Cette hypothèse signifie physiquement que les particules se repoussent mutuellement et ne peuvent alors occuper une même position.

Ainsi le vecteur décrit précédemment est un élément de $\mathbb{R}^{Nd} \setminus \Delta$ où Δ décrit l'ensemble où deux particules seraient à la même position, soit,

$$\Delta = \{(x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{Nd} \text{ t.q. } \exists i \neq j \ x_i = x_j\} \quad (2.1.2)$$

En outre, pour un vecteur $(x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^{Nd} \setminus \Delta$, comme les particules sont identiques, pour $\sigma \in \mathcal{S}_n^*$, l'observateur ne peut pas distinguer cet état de l'état $(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)})$. Mathématiquement, en définissant une action de \mathcal{S}_n agissant sur $\mathbb{R}^{Nd} \setminus \Delta$ comme décrit précédemment, l'espace des configurations est (en empruntant les notations de [6]),

$$M_N^d = (\mathbb{R}^{Nd} \setminus \Delta) / \mathcal{S}_n \quad (2.1.3)$$

A première vue, nous avons seulement changé l'espace des configurations de \mathbb{R}^{Nd} à M_N^d , mais les conséquences de ce changement sont en réalité drastiques. La géométrie de l'espace a profondément changé, en particulier l'espace des configurations

*. \mathcal{S}_n désigne le groupe symétrique d'ordre n , à savoir le groupe des permutations d'ordre n .

n'est plus simplement connexe*.

La propriété de simple connexité s'exprime par le *groupe fondamental* (auss appelé premier groupe d'homotopie) de l'espace des configurations. En particulier, nous avons[†],

$$\pi_1(M_N^d) = \begin{cases} \mathcal{S}_N & \text{si } d \geq 3 \\ \mathcal{B}_N & \text{si } d = 2 \end{cases} \quad (2.1.4)$$

où \mathcal{B}_N est le *groupe des tresses d'Artin*[‡] que nous décrivons ci-dessous.

Ainsi, en dimension 3, échanger continûment dans M_N^3 des particules revient[§] à simplement choisir une permutation des N particules[¶]. En dimension 2, le groupe à considérer n'est plus le groupe des permutations mais le groupe \mathcal{B}_N défini par^{||},

$$\mathcal{B}_N = \langle \sigma_1, \dots, \sigma_{N-1} \mid \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_i = \sigma_{i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} \text{ pour } 1 \leq i \leq N-2, \\ \sigma_i \sigma_j = \sigma_j \sigma_i \text{ pour } |i-j| \geq 2 \rangle \quad (2.1.5)$$

En mécanique quantique, comme nous le décrivons dans le paragraphe suivant, ce qui nous intéresse sont les représentations unitaires de dimension 1 de ces groupes. Les résultats, que nous ne prouverons pas non plus**, sont les suivants,

- \mathcal{S}_n admet deux représentations unitaires de dimension 1, la représentation triviale et la représentation de signature définies respectivement par,

$$U(\sigma) = 1 \text{ et } U(\sigma) = \text{sgn}(\sigma) \quad (2.1.6)$$

- Les représentations unitaires de \mathcal{B}_N sont définies par un paramètre réel $\nu \in [0, 2[$ tel que, pour tout $k \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$,

$$U(\sigma_k) = e^{-i\nu\pi} \quad (2.1.7)$$

2.1.2 Statistiques : bosons, fermions et anyons

Nous passons alors à l'aspect quantique du phénomène. En effet, jusqu'ici nous n'avons fait qu'une analyse classique de l'espace des configurations. En mécanique quantique, nous travaillons avec des vecteurs états d'un espace de Hilbert. Soit alors un état,

$$|\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N\rangle \quad (2.1.8)$$

constitué de N particules identiques. Comme expliqué précédemment, nous ne pouvons pas différencier cet état avec l'état,

$$|\vec{p}_{\sigma(1)}, \dots, \vec{p}_{\sigma(N)}\rangle \quad (2.1.9)$$

*. En langage *séculaire*, pour ceux tenant à conserver leur virginité mathématique, entre deux points de M_N^d il existe des chemins continus différents reliant ces deux points et qui ne peuvent être continûment déformés pour être égaux (les chemins).

†. Nous évoquons ce résultat sans démonstration, non pas que la preuve soit triviale (je n'en ai aucune idée) mais que ce résultat a été démontré par des mathématiciens de nombreuses années auparavant

‡. *Artin's braid group* en anglais, mais j'ignore la traduction française...

§. Nous décrivons plus précisément dans le paragraphe suivant ce fait.

¶. Ce résultat peut avoir un aspect *intuitif* pour ceux pour qui il est simple d'imaginer des particules dans \mathbb{R}^3 et de remarquer qu'il est toujours possible de *démêler* des chemins entrelacés qui ne se croisent pas. Un peu d'exercice mental suffit à se convaincre que ce n'est pas le cas en dimension 2.

||. Remarquons que \mathcal{S}_N apparaît comme sous groupe de \mathcal{B}_N en ajoutant la condition, $\sigma_i^2 = 1$.

**. La preuve pour \mathcal{S}_N est simple, il suffit de remarquer que toute permutation s'écrit comme produit de transposition et qu'une transposition vérifie, $\tau^2 = 1$.

pour une permutation σ quelconque. Ainsi ces deux états doivent représenter le même état physique et donc appartenir au même rayon de l'espace de Hilbert. Ainsi,

$$|\vec{p}_{\sigma(1)}, \dots, \vec{p}_{\sigma(N)}\rangle = \alpha |\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N\rangle \quad (2.1.10)$$

Pour déterminer ce α on peut imaginer échanger les particules en un changement continu dans l'espace des configurations M_N^d en un temps T . Ce formalisme est représenté par l'intégrale de chemin*. Or l'intégrale de chemin n'est définie que pour des chemins topologiquement homotopes (c'est à dire au sein d'une même classe d'homotopie)†. Ainsi la phase α ne peut dépendre que de la classe d'homotopie du chemin suivi, et doit en particulier en fournir une représentation (ce résultat non trivial est démontré par exemple par [4] et plus proprement par [2]). D'où alors l'apparition de statistiques différentes en dimension 2‡.

Toutefois, en dimension 3, nous sommes rassurés de remarquer que nous avons bien deux types de particules (car deux représentations) correspondant aux fermions (représentation de signature) et bosons (représentation triviale).

Remarquons finalement que l'on aurait pu prévoir§ le fait que les statistiques étaient désormais nombreuses car en dimension 2, le groupe des rotations (qui donne naissance au spin) $SO(2)$ est isomorphe à $U(1)$ dont les représentations irréductibles sont toutes de dimension 1 et indexées par $n \in \mathbb{Z}$. Le théorème spin-statistique indique alors qu'il n'y a plus de raison de voir apparaître deux types de particules que sont bosons et fermions.

2.2 Espaces de Hilbert

Nous nous concentrons ici sur des particules évoluant dans un espace de dimension $d \geq 3$. Dans cette section, nous exposerons dans un premier temps la construction mathématique naturelle de l'espace de Hilbert pour plusieurs particules, c'est-à-dire le *produit tensoriel*. Ensuite nous séparerons notre étude en deux axes différents suivant si le système de particules est composé de particules distinguables ou pas. Cette séparation nous permet de traiter n'importe quel système de particules. En effet, supposons que nous sommes en présence d'un système avec k types de particules différentes, chaque type ayant n_i particules pour un total de N particules, c'est à dire,

$$N = \sum_{i=1}^k n_i \quad (2.2.1)$$

Comme nous supposons travailler en dimension supérieure ou égale à 3, nous avons deux grandes familles de particules à savoir les bosons et les fermions. Ainsi, chaque type i de particule est associée à un statistique $s_i \in \{b, f\}$, en accord avec les notations que nous développerons quand nous étudierons les particules non-distinguables.

*. Nous décrirons ce formalisme quand nous parlerons de l'approche canonique de la mécanique quantique.

†. Voir par exemple [8].

‡. De nombreux arguments sont en réalité omis et le sujet est loin d'être aussi trivial que je peux le laisser entendre. Une discussion précise du sujet est offerte par A. Mouchet dans [7].

§. L'argument est en réalité ici un peu circulaire. Le théorème spin-statistique se démontrant en théorie quantique des champs en utilisant les représentations de $SU(2)$, il n'y a plus de raison qu'en dimension 2 un tel argument persiste.

Nous pouvons alors concevoir l'espace de Hilbert comme,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{s_1}^{n_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{s_k}^{n_k} \quad (2.2.2)$$

où $\mathcal{H}_{s_i}^{n_i}$ est l'espace de Hilbert à n_i particules identiques respectant la statistique s_i .

Enfin, l'étude des particules non distinguables permet également de construire l'espace de Fock qui décrit un système de particules identiques sans en connaître le nombre. Ainsi, pour un système avec k types de particules obéissant respectivement à la statistique s_i , nous pouvons construire l'espace de Hilbert total comme,

$$\mathcal{H} = \mathcal{F}_{s_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{F}_{s_k} \quad (2.2.3)$$

où \mathcal{F}_{s_i} est l'espace de Fock pour la statistique s_i .

2.2.1 Particules distinguables

Le produit tensoriel d'espaces de Hilbert fournit un cadre naturel à l'association de plusieurs systèmes quantiques. En particulier, considérons N particules toutes distinguables appartenant à des espaces de Hilbert respectifs \mathcal{H}_i , l'espace de Hilbert total du système sera alors

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i \quad (2.2.4)$$

Dans ce cas l'étude du système est triviale, on définit des bases $\{|e_n^i\rangle\}$ pour chacun des espaces de Hilbert \mathcal{H}_i et nous formons alors la base pour \mathcal{H} définie par,

$$|e_{n_1}^1, \dots, e_{n_N}^N\rangle = |e_{n_1}^1\rangle \otimes \dots \otimes |e_{n_N}^N\rangle \quad (2.2.5)$$

Notons ici un élément important, les emplacements des différents $|e_n^i\rangle$ dans le produit tensoriel sont importants. En effet, si nous les permutons selon une permutation $\sigma \in \mathcal{S}_N$, nous obtenons un vecteur,

$$|e_{n_1}^{\sigma(1)}, \dots, e_{n_N}^{\sigma(N)}\rangle = |e_{n_1}^{\sigma(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |e_{n_N}^{\sigma(N)}\rangle \quad (2.2.6)$$

Cependant ce vecteur n'est plus un élément de \mathcal{H} mais un élément de \mathcal{H}' défini par,

$$\mathcal{H}' = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_{\sigma(i)} \quad (2.2.7)$$

Toutefois, nous aurions pu travailler dès le départ avec cet espace de Hilbert \mathcal{H}' et la physique n'en serait pas changée. Ainsi ce qu'il est important de retenir est qu'une fois que nous avons fixé notre espace de Hilbert par un ordre sur le produit tensoriel, nous ne pouvons plus le changer et nous devons nous conformer à l'ordre que nous avons choisi lorsque nous définissons les *kets*.

2.2.2 Particules indistinguables

Nous nous penchons désormais sur le cas plus complexe des particules indistinguables. Dans ce cas les espaces de Hilbert \mathcal{H}_i sont forcément égaux à un espace de Hilbert que nous noterons \mathcal{H}_0 . Par exemple supposons

$$\mathcal{H}_0 = L^2(\vec{p}) \quad (2.2.8)$$

C'est à dire qu'on représente les états de chaque particules par leur quantité de mouvement \vec{p} . Nous serions tenté de dire que l'espace de Hilbert total est alors $L^2(\vec{p})^{\otimes N}$. C'est à dire que nous écririons nos états,

$$|\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N\rangle = |\vec{p}_1\rangle \otimes \dots \otimes |\vec{p}_N\rangle \quad (2.2.9)$$

Cependant, en définissant les états de cette manière, il n'y a pas de raison qu'ils vérifient les relations que nous avons trouvé dans la section sur les Particules Identiques. En effet, nous avons vu que sous l'action d'une permutation^{*}, les états ne doivent changer que d'un facteur \pm . Ainsi en réalité, il faut identifier les états qui correspondent à une simple permutation des quantités de mouvement. Plus précisément, suivant le type de particules que l'on considère, elles peuvent se transformer sous deux représentations différentes à savoir la représentation triviale et la représentation signature. On définit alors deux opérateurs[†] agissant linéairement sur $\mathcal{H}_0^{\otimes N}$ sous la forme[‡],

$$\begin{aligned} P_b &= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} U(\sigma) \\ P_f &= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn}(\sigma) U(\sigma) \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

où $U(\sigma) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_0^{\otimes N})$ est l'opérateur linéaire défini par,

$$U(\sigma) |\phi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_N}\rangle = |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \quad (2.2.11)$$

où nous avons repris une base $\{|\phi_i\rangle\}$ quelconque de \mathcal{H}_0 .

Définis de la sorte ces opérateurs semblent dépendre de la base choisie pour \mathcal{H}_0 . En réalité il n'en est rien, prenons par exemple une autre base $\{|\psi_i\rangle\}$ de \mathcal{H}_0 . Nous la décomposons sur la base $\{|\phi_i\rangle\}$ sous la forme,

$$|\psi_j\rangle = \sum_i \alpha_{ji} |\phi_i\rangle \quad (2.2.12)$$

On peut désormais calculer l'action de $U(\sigma)$ sur un état défini par le produit tensoriel sur les $|\psi_j\rangle$,

$$\begin{aligned} U(\sigma) |\psi_{j_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_N}\rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_N} \alpha_{j_1 i_1} \dots \alpha_{j_N i_N} U(\sigma) |\phi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_N}\rangle \\ &= \sum_{i_1, \dots, i_N} \alpha_{j_1 i_1} \dots \alpha_{j_N i_N} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \\ &= \sum_{i_1, \dots, i_N} \alpha_{j_{\sigma(1)} i_{\sigma(1)}} \dots \alpha_{j_{\sigma(N)} i_{\sigma(N)}} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \\ &= \sum_{i_{\sigma(1)}, \dots, i_{\sigma(N)}} \alpha_{j_{\sigma(1)} i_{\sigma(1)}} \dots \alpha_{j_{\sigma(N)} i_{\sigma(N)}} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \\ &= \left(\sum_{i_{\sigma(1)}} \alpha_{j_{\sigma(1)} i_{\sigma(1)}} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \right) \otimes \dots \otimes \left(\sum_{i_{\sigma(N)}} \alpha_{j_{\sigma(N)} i_{\sigma(N)}} |\phi_{i_{\sigma(N)}}\rangle \right) \\ &= |\psi_{j_{\sigma(1)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_{\sigma(N)}}\rangle \end{aligned}$$

*. Rappelons que nous travaillons en dimension $d \geq 3$.

†. Nous suivons ici la discussion proposée dans [1].

‡. Les indices f et b font respectivement référence à *fermions* et *bosons*.

Remarquons que dans ce précédent calcul nous n'avons à aucun moment utilisé le fait que les $|\psi_i\rangle$ formaient une base de \mathcal{H}_0 , ainsi le résultat reste vrai pour une famille quelconque de vecteurs. Ainsi, on retiendra que $U(\sigma)$ agit sur les produits tensoriels en changeant l'ordre des éléments du produit, quel que soit leur nature.

U fournit évidemment une représentation du groupe \mathcal{S}_N qui n'a cependant aucune raison d'être irréductible.

La notation P pour ces opérateurs n'est pas anodine, car comme nous le montrons, ils forment des projecteurs. En effet, par exemple pour P_f ,

$$P_f^2 = \frac{1}{(N!)^2} \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \text{sgn}(\sigma) U(\sigma) \text{sgn}(\tau) U(\tau) \quad (2.2.13)$$

$$= \frac{1}{(N!)^2} \sum_{\sigma} \left(\sum_{\tau} \text{sgn}(\sigma \circ \tau) U(\sigma \circ \tau) \right) \quad (2.2.14)$$

$$= \frac{1}{(N!)^2} \sum_{\sigma} \left(\sum_{\tau'} \text{sgn}(\tau') U(\tau') \right) \quad (2.2.15)$$

$$= \sum_{\tau'} \text{sgn}(\tau') U(\tau') = P_f \quad (2.2.16)$$

où nous avons utilisé à la troisième égalité le fait que l'application,

$$\begin{array}{ccc} l_{\sigma} : \mathcal{S}_N & \longrightarrow & \mathcal{S}_N \\ & \tau & \longmapsto \sigma \circ \tau \end{array}$$

est bijective pour changer l'indice de sommation.

Ainsi P_f et P_b sont des projecteurs dont nous notons respectivement les images,

$$\mathcal{H}_f^N = \text{Im } P_f \quad (2.2.17)$$

$$\mathcal{H}_b^N = \text{Im } P_b \quad (2.2.18)$$

Nous sommes désormais armés pour définir l'espace de Hilbert de notre théorie suivant si les particules que l'on considère sont des bosons ou des fermions. L'espace de Hilbert à considérer est,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_f^N &= P_f (\mathcal{H}_0^{\otimes N}) \quad \text{pour des fermions} \\ \mathcal{H}_b^N &= P_b (\mathcal{H}_0^{\otimes N}) \quad \text{pour des bosons} \end{aligned}$$

Si l'on prend par exemple, $\mathcal{H}_0 = L^2(\vec{p})$ et que l'on considère des fermions, on définit alors les états,

$$|\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N\rangle = P_f |\vec{p}_1\rangle \otimes \dots \otimes |\vec{p}_N\rangle \quad (2.2.19)$$

On peut vérifier que les états ainsi définis vérifient les bonnes règles de permutation,

$$\begin{aligned} |\vec{p}_{\sigma(1)}, \dots, \vec{p}_{\sigma(N)}\rangle &= P_f |\vec{p}_{\sigma(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |\vec{p}_{\sigma(N)}\rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\tau} \text{sgn}(\tau) U(\tau) U(\sigma) |\vec{p}_1\rangle \otimes \dots \otimes |\vec{p}_N\rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\tau'} \text{sgn}(\tau' \circ \sigma^{-1}) U(\tau') |\vec{p}_1\rangle \otimes \dots \otimes |\vec{p}_N\rangle \\ &= \text{sgn}(\sigma^{-1}) P_f |\vec{p}_1\rangle \otimes \dots \otimes |\vec{p}_N\rangle \\ &= \text{sgn}(\sigma) |\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N\rangle \end{aligned}$$

où nous avons utilisé à l'avant dernière ligne l'égalité (triviale) $\text{sgn}(\sigma^{-1}) = \text{sgn}(\sigma)$. Ainsi les états tels que nous venons de les définir se transforment correctement. Remarquons que nous avons pris $\mathcal{H}_0 = L^2(\vec{p})$ par exemple, mais le processus serait le même pour un espace \mathcal{H}_0 quelconque accompagné d'une base $|\phi_i\rangle$ quelconque.

Supposons désormais que $\dim \mathcal{H}_0 = d$ est finie. Notons en $\{|\psi_i\rangle\}_{1 \leq i \leq d}$ une base. Nous cherchons les dimensions de \mathcal{H}_f^N et \mathcal{H}_b^N . Commençons par le cas le plus simple, à savoir le cas de \mathcal{H}_f^N . En reprenant les notations précédentes, remarquons que*

$$|\psi_{i_1}, \dots, \psi_{i_N}\rangle = 0 \text{ dès qu'il existe } i_k = i_l \quad (2.2.20)$$

De plus, ces vecteurs sont égaux à signe et permutation près. Ainsi pour former un vecteur de P_f il faut choisir N vecteurs différents parmi les $|\psi_i\rangle$, peu importe leur ordre. Cela correspond à choisir une partie à N éléments d'un ensemble à d éléments, soit alors,

$$\dim \mathcal{H}_f^N = \begin{cases} \binom{d}{N} & \text{si } N \leq d \\ 0 & \text{si } N > d \end{cases} \quad (2.2.21)$$

Le cas des bosons est légèrement plus compliqué. Remarquons qu'un état est uniquement identifié par le nombre de n_i de $|\psi_i\rangle$. En effet, les autres états s'obtiennent par une permutation de ce type d'états et sont donc égaux dans la représentation bosonique. On peut de plus choisir ces états pour que les $|\psi_1\rangle$ soient placés à gauche des $|\psi_2\rangle$ eux-même à gauche des ... à gauche des $|\psi_d\rangle$.

$$\left| \underbrace{\psi_1, \dots, \psi_1}_{n_1}, \underbrace{\psi_2, \dots, \psi_2}_{n_2}, \dots, \underbrace{\psi_d, \dots, \psi_d}_{n_d} \right\rangle \quad (2.2.22)$$

Le but est alors de déterminer les partitions de N en d entiers n_d . Ainsi présenté ce problème de dénombrement n'est pas trivial. Toutefois on peut transformer ce problème en changeant de point de vue et en cherchant alors à placer les *séparations* entre $|\psi_i\rangle$ à $|\psi_{i+1}\rangle$, ce qui revient à déterminer la valeur des n_i . Le problème se ramène alors à placer $d - 1$ séparations dans $N + d - 1$ boîtes[†]. Ainsi, on obtient la dimension de \mathcal{H}_b^N , donnée par,

$$\dim \mathcal{H}_b^N = \binom{N + d - 1}{d - 1} \quad (2.2.23)$$

La démonstration permettant de calculer la dimension de \mathcal{H}_b^N nous indique assez remarquablement que l'on peut indexer les états bosoniques plutôt par le nombre de bosons dans chaque état. C'est le concept de *nombre d'occupation* que nous détaillons désormais.

On considère alors de nouveau une base de \mathcal{H}_0 (plus nécessairement de dimension finie) $\{|\psi_i\rangle\}$ orthonormale et un système à N particules. Et on définit les états

$$|n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = c(n_i) \left| \underbrace{\psi_1, \dots, \psi_1}_{n_1}, \underbrace{\psi_2, \dots, \psi_2}_{n_2}, \dots, \underbrace{\psi_k, \dots, \psi_k}_{n_k}, \dots \right\rangle \quad (2.2.24)$$

*. La démonstration est triviale, il suffit d'utiliser la transposition τ_{kl} de signature -1 .

†. Un élément est une séquence de N éléments $1, 1, 1, 2, 2, \dots, d, d, d$ et en ajoutant $d - 1$ séparateurs, nous obtenons alors $N + d - 1$ boîtes à remplir, le reste étant entièrement déterminé par le fait que nous ordonnons les éléments par ordre croissant d'indice.

où les n_i représentent le nombre de particules dans l'état $|\psi_i\rangle$ et $c(n_i)$ est un coefficient dépendant seulement des n_i que l'on va déterminer par la suite. Nous avons de plus la relation,

$$\sum_i n_i = N \quad (2.2.25)$$

Notre calcul de la dimension de \mathcal{H}_b^N montre que ces états forment une base de \mathcal{H}_b^N . Pour le cas de \mathcal{H}_f^N , ce résultat reste vrai si on ajoute la condition $n_i \in \{0, 1\}$, et les états multiparticulaires fermioniques sont caractérisés par une séquence de 0 et de 1 (encodés en binaire!).

Pour que cette base soit plus commode, on choisit les coefficients $c(n_i)$ de sorte qu'elle soit orthonormale. L'orthogonalité de ces états se montrent facilement en revenant aux opérateurs P_s^* . On se concentre plutôt sur le calcul des coefficients $c(n_i)$. Par exemple, pour des bosons,

$$\begin{aligned} 1 &= \langle n_1, \dots, n_k, \dots | n_1, \dots, n_k, \dots \rangle \\ &= |c(n_i)|^2 \left\langle \underbrace{\psi_1, \dots, \psi_1}_{n_1}, \dots, \underbrace{\psi_k, \dots, \psi_k}_{n_k} \dots \middle| \underbrace{\psi_1, \dots, \psi_1}_{n_1}, \dots, \underbrace{\psi_k, \dots, \psi_k}_{n_k} \dots \right\rangle \\ &= |c(n_i)|^2 \langle \psi_1 |^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes \langle \psi_k |^{\otimes n_k} \otimes \dots P_b P_b | \psi_1 \rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes | \psi_k \rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots \\ &= |c(n_i)|^2 \langle \psi_1 |^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes \langle \psi_k |^{\otimes n_k} \otimes \dots P_b | \psi_1 \rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes | \psi_k \rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots \\ &= |c(n_i)|^2 \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \langle \psi_1 |^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes \langle \psi_k |^{\otimes n_k} \otimes \dots U(\sigma) | \psi_1 \rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes | \psi_k \rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots \end{aligned}$$

Les notations peuvent être quelque peu[†] lourdes, mais il faut se souvenir qu'en réalité, il n'y a que N facteurs dans le produit tensoriel de chacun de ces états. L'opérateur $U(\sigma)$ associe à l'indice au i -ème l'indice $\sigma(i)$. Il ne faut pas confondre cette manière d'agir avec le fait que $U(\sigma)$ transforme $|\psi_i\rangle$ en $|\psi_{\sigma(i)}\rangle$ [‡]. Comme la base de \mathcal{H}_0 est choisie orthonormale, il est évident que,

$$\langle \psi_1 |^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes \langle \psi_k |^{\otimes n_k} \otimes \dots U(\sigma) | \psi_1 \rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes | \psi_k \rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots \in \{0, 1\} \quad (2.2.26)$$

On cherche alors à déterminer le nombre de permutations pour lesquels ce résultat fait 1. Si l'on suppose le résultat d'un tel produit scalaire non nul, remarquons premièrement que σ s'écrit forcément comme un produit de permutation ,

$$\sigma = \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_k \dots \quad (2.2.27)$$

où σ_i est une permutation des indices $\{\sum_{k=0}^{i-1} n_k + 1, \dots, \sum_{k=0}^{i-1} n_k + n_i\}$. En effet, si ce n'était pas le cas, on permutterait au moins un des $|\phi_i\rangle$ en un $|\phi_j\rangle$ avec $i \neq j$ rendant alors directement le produit scalaire nul. Ainsi σ_i est une permutation de n_i éléments et il y en a $n_i!$. Le nombre de permutation σ qui s'écrivent de la sorte est alors $\prod_i n_i!$. Réciproquement, il est évident que toutes les permutations qui s'écrivent sous cette forme donnent bien,

$$\langle \psi_1 |^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes \langle \psi_k |^{\otimes n_k} \otimes \dots U(\sigma_1 \dots \sigma_k \dots) | \psi_1 \rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes | \psi_k \rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots = 1 \quad (2.2.28)$$

*. En utilisant le fait que $P_s^2 = P_s$, on se ramène à une simple somme sur des opérateurs $U(\sigma)$ et si les nombres d'occupation ne sont pas tous les mêmes il n'existe pas de permutation qui n'annule pas le produit scalaire naturel sur $\mathcal{H}_0^{\otimes N}$.

†. Enormément

‡. Ceci ne peut pas être vrai, les indices i indexent une base de \mathcal{H}_0 potentiellement infinie, et $\sigma(k)$ n'est pas défini pour $k > N$!

En reprenant le calcul on trouve ainsi,

$$1 = |c(n_i)|^2 \frac{1}{N!} \prod_i n_i! \cdot 1 \quad (2.2.29)$$

d'où on peut choisir les coefficients c_i sous la forme,

$$c(n_i) = \sqrt{\frac{N!}{\prod_i n_i!}} \quad (2.2.30)$$

Le cas des bosons fournit le même résultat et nous achevons alors la construction de la base des *nombre d'occupation*.

Nous ne nous étendrons pas plus ici sur ce sujet, pour des applications orientées vers l'étude de la théorie quantique des champs, voir [5], Chapitre 3.

2.2.3 Espace de Fock

On généralise désormais la discussion précédente à un système dont on ne connaît pas le nombre de particules. On suppose alors être en présence de particules respectant la statistique $s \in \{b, f\}$. On construit l'espace de Fock de la manière suivante,

$$\mathcal{F}_s = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \mathcal{H}_s^k \quad (2.2.31)$$

Il faut tout de même revenir sur ce que signifie \mathcal{H}_s^0 , qui correspond à l'espace de Hilbert lorsqu'il n'y a pas de particules, à savoir l'espace de Hilbert du vide. En général il peut y avoir plusieurs états qui sont des états du vide (peut-être même un continuum), au sens où ils minimisent l'énergie du système. L'étude de la brisure spontanée de symétrie* nous indique que le système va choisir préférentiellement un état de vide $|\Omega\rangle$. On peut alors identifier l'espace de Hilbert du vide sous la forme,

$$\mathcal{H}_s^0 = \text{Vect } |\Omega\rangle \simeq \mathbb{C} \quad (2.2.32)$$

Sur l'espace de Fock le produit scalaire est défini en décomposant un élément[†] $|\phi\rangle \in \mathcal{F}_s$ sous la forme,

$$|\phi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \quad (2.2.33)$$

où $\phi_n \in \mathcal{H}_s^k$ et en prenant le produit scalaire sous la forme,

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_n \langle \phi_n | \psi_n \rangle \quad (2.2.34)$$

il est facile de montrer qu'ainsi définir cette forme bilinéaire complexe définit bien un produit scalaire (au sens hermitien).

Remarquons que si \mathcal{H}_0 est de dimension finie d ,

$$\dim \mathcal{F}_s = \begin{cases} 2^d & \text{si } s = f \\ \infty & \text{si } s = b \end{cases} \quad (2.2.35)$$

*. Nous ne nous étendrons pas ici sur ce sujet, pour plus de détails il faut consulter des ouvrages sur la théorie quantique des champs.

†. Remarquons qu'il n'y a pas de problème à cette définition car la décomposition est unique, par définition de la somme directe.

On s'intéresse alors à la dynamique de la mécanique quantique sur l'espace de Fock. Remarquons que le simple fait d'écrire notre espace de Hilbert comme un produit tensoriel présuppose que les particules n'interagissent pas entre elles*. Ainsi il est naturel d'écrire, pour un système à N particules identiques, que l'énergie est,

$$E = E_1 + \dots + E_N \quad (2.2.36)$$

Ce qui s'écrit en tant qu'Hamiltonien sous la forme†,

$$H_N = \sum_{i=0}^{N-1} \underbrace{\mathbb{I} \otimes \dots \otimes \mathbb{I}}_i \otimes H_0 \otimes \underbrace{\mathbb{I} \otimes \dots \otimes \mathbb{I}}_{N-1-i} \quad (2.2.37)$$

où H_0 est l'hamiltonien pour une seule particule.

L'Hamiltonien sur l'espace de Fock est alors,

$$H = \bigoplus_{n=0}^{\infty} H_n \quad (2.2.38)$$

La dynamique sur l'espace de Fock est alors décrite, suivant le point de vue, par l'équation de Schrödinger ou l'équation d'Heisenberg définie avec cet Hamiltonien.

2.2.4 Opérateurs création et annihilation

Nous avons désormais un espace de Hilbert nous permettant d'étudier un système avec un nombre quelconque de particules. Toutefois, nous n'avons toujours pas de moyen clair d'ajouter ou d'enlever des particules au système, c'est-à-dire de naviguer entre les espace \mathcal{H}_s^N . Pour un état $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_0$ et pour un nombre N quelconque de particules, on définit l'opérateur de création $a_s^\dagger(|\phi\rangle)^\ddagger$ par,

$$\begin{aligned} a_s^\dagger(|\phi\rangle) : \mathcal{H}_s^N &\longrightarrow \mathcal{H}_s^{N+1} \\ |\psi\rangle &\longmapsto \sqrt{N+1} P_s^{N+1} |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle \end{aligned} \quad (2.2.39)$$

où nous avons introduit la notation P_s^n pour l'opérateur P_s agissant sur \mathcal{H}_s^n . L'intérêt du facteur $\sqrt{N+1}$ deviendra clair dans quelques instants. Remarquons que cet opérateur est bien défini car $\text{Im } a_s^\dagger(|\phi\rangle) \subset \text{Im } P_s^{N+1} = \mathcal{H}_s^{N+1} \S$. On peut même montrer (assez facilement) l'égalité et l'on aurait alors pu construire une base de l'espace de Fock à partir de ces opérateurs de création.

Montrons dès lors une première propriété des opérateurs création. Pour rendre la démonstration plus générale, on introduit la notation $s = \pm$ respectivement pour des bosons et fermions. Soient alors deux états $|\psi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_0$ et un état $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_s^N$

*. Ou du moins interagissent très faiblement

†. Remarquons que nous trouvons ici l'hamiltonien par *sens physique*. En réalité, nous pourrions également le trouver en considérant la représentation de l'algèbre de Lie des translations dans le temps, et en utilisant la représentation naturelle de cette algèbre de Lie sur le produit tensoriel $\mathcal{H}^{\otimes N}$. Pour un exemple de la procédure voir notre traitement de l'algèbre de Lie des rotations plus loin.

‡. La notation \ddagger sera rendue claire par la suite.

§. Physiquement, cet opérateur *crée* bien un mode (particule) avec la statistique s .

pour N quelconque et considérons par exemple $s = +$ dans un premier temps,

$$\begin{aligned} a_s^\dagger(|\psi\rangle) a_s^\dagger(|\phi\rangle) |\Psi\rangle &= \sqrt{(N+2)(N+1)} P_s^{N+2} |\psi\rangle \otimes P_s^{N+1} |\phi\rangle \otimes |\Psi\rangle \\ &= \frac{\sqrt{(N+2)(N+1)}}{(N+2)!(N+1)!} \\ &\quad \times \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_{N+2}} \sum_{\tau \in \mathcal{S}_{N+1}} U_{N+2}(\sigma) |\psi\rangle \otimes U_{N+1}(\tau) |\phi\rangle \otimes |\Psi\rangle \end{aligned}$$

On peut décomposer $|\Psi\rangle$ sous la forme,

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_3, \dots, i_{N+2}} \alpha_{i_3, \dots, i_{N+2}} |\phi_{i_3}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{N+2}}\rangle \quad (2.2.40)$$

où nous avons astucieusement indexé notre base de 3 à n . On définit alors, $|\psi\rangle = |\phi_{i_1}\rangle$ et $|\phi\rangle = |\phi_{i_2}\rangle$ pour rendre le calcul plus simple. On reprend le calcul en laissant de côté les facteurs multiplicatifs constants,

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \sum_{i_j} \alpha_{i_3 \dots i_{N+2}} U(\sigma) |\phi_{i_1}\rangle \otimes U(\tau) |\phi_{i_2}\rangle \otimes |\phi_{i_3}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{N+2}}\rangle \\ = \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \sum_{i_j} \alpha_{i_3 \dots i_{N+2}} U(\sigma) |\phi_{i_1}\rangle \otimes |\phi_{i_{\tau(2)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\tau(3)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\tau(N+2)}}\rangle \\ = \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \sum_{i_j} \alpha_{i_3 \dots i_{N+2}} |\phi_{i_{\sigma(1)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\sigma\tau(2)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\sigma\tau(3)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\sigma\tau(N+2)}}\rangle \end{aligned}$$

Définissons $\tau' \in \mathcal{S}_{N+2}$ telle que $\tau'(1) = 1$ et $\tau'(k) = \tau(k)$ pour $k \neq 1$. La somme précédente s'écrit alors,

$$\sum_{\sigma} \sum_{\tau} \sum_{i_j} \alpha_{i_3 \dots i_{N+2}} |\phi_{i_{\sigma\tau'(1)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\sigma\tau'(2)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\sigma\tau'(3)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\sigma\tau'(N+2)}}\rangle$$

L'application $r'_\tau : \sigma \mapsto \sigma \circ \tau'$ est bijective on peut écrire la somme précédente sous la forme,

$$\sum_{\pi} \sum_{\tau} \sum_{i_j} \alpha_{i_3 \dots i_{N+2}} |\phi_{i_{\pi(1)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\pi(2)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\pi(3)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\pi(N+2)}}\rangle$$

On introduit désormais la transposition τ_{12} de \mathcal{S}_{N+2} et on peut écrire, la dernière somme sous la forme,

$$\begin{aligned} \sum_{\pi} \sum_{\tau} \sum_{i_j} \alpha_{i_3 \dots i_{N+2}} |\phi_{i_{\pi\tau_{12}(2)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\pi\tau_{12}(1)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\pi\tau_{12}(3)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\pi\tau_{12}(N+2)}}\rangle = \\ \sum_{\theta} \sum_{\tau} \sum_{i_j} \alpha_{i_3 \dots i_{N+2}} \alpha_{i_3 \dots i_{N+2}} |\phi_{i_{\theta(2)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\theta(1)}}\rangle \otimes |\phi_{i_{\theta(3)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_{\theta(N+2)}}\rangle \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que l'application $r_{\tau_{12}} : \pi \mapsto \pi \circ \tau_{12}$ pour obtenir la dernière égalité. Il n'est pas difficile de se convaincre que la dernière égalité est exactement ce que l'on aurait obtenu si l'on avait simplement inversé $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ au début du calcul. Ainsi,

$$a_b^\dagger(|\psi\rangle) a_b^\dagger(|\phi\rangle) = a_b^\dagger(|\phi\rangle) a_b^\dagger(|\psi\rangle) \quad (2.2.41)$$

On reprend désormais le cas des fermions. Le calcul est le même il suffit de garder la trace des signatures. Notons qu'avec nos notations nous avons $\text{sgn}(\tau') = \text{sgn}(\tau)$ et $\text{sgn}(\tau_{12}) = -1$. Ainsi, le calcul fait simplement apparaître un signe $-$, et alors,

$$a_f^\dagger(|\psi\rangle) a_f^\dagger(|\phi\rangle) = -a_f^\dagger(|\phi\rangle) a_f^\dagger(|\psi\rangle) \quad (2.2.42)$$

On résume ces deux équations en,

$$[a_s^\dagger(|\psi\rangle), a_s^\dagger(|\phi\rangle)]_s = a_s^\dagger(|\psi\rangle) a_s^\dagger(|\phi\rangle) \pm a_s^\dagger(|\phi\rangle) a_s^\dagger(|\psi\rangle) = 0 \quad (2.2.43)$$

Ces relations sont plus connues sous le nom de *relations de commutation canoniques**.

On définit également l'opérateur d'annihilation $a_s(|\phi\rangle) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_s^N, \mathcal{H}_s^{N-1})$ d'un état $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_0$ sur une base de $\mathcal{H}_0^{\otimes N}$,

$$\begin{aligned} a_s(|\phi\rangle) |\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N s^{k-1} \\ &\times P_s^{N-1} |\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{k-1}}\rangle \otimes \langle \phi | \psi_{i_k} \rangle |\psi_{i_{k+1}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle \end{aligned} \quad (2.2.44)$$

De la même manière que pour l'opérateur de création, $\text{Im } a_s(|\phi\rangle) = \text{Im } P_s^{N-1}$ d'où la bonne définition de cet opérateur.

Nous démontrons alors que $a_s(|\phi\rangle)$ est bien l'opérateur adjoint de $a_s^\dagger(|\phi\rangle)$. Il suffit de faire le calcul pour une base orthonormée $|\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle$ de \mathcal{H}_s^N . Nous calculons la quantité

$$(|\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle, a_s^\dagger(|\phi\rangle) |\psi_{j_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_N}\rangle)$$

Nous avons astucieusement introduit à droite de cette équation les indices allant de 2 à N afin d'introduire la notation $|\phi\rangle = |\psi_{j_1}\rangle$. Effectuons ce calcul pour des fermions. Il vient alors,

$$\begin{aligned} a_s^\dagger(|\phi\rangle) |\psi_{j_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_N}\rangle &= \frac{\sqrt{N}}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn}(\sigma) |\psi_{j_{\sigma(1)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_{\sigma(N)}}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn}(\sigma) |\psi_{j_{\sigma(1)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_{\sigma(N)}}\rangle \end{aligned}$$

*. Ce n'en sont en réalité qu'une partie, les autres étant formulées par la suite.

Puis le produit scalaire devient alors,

$$\begin{aligned}
& (|\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle, a_s^\dagger(|\phi\rangle) |\psi_{j_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_N}\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \langle \psi_{i_1} | \psi_{j_{\sigma(1)}} \rangle \dots \langle \psi_{i_N} | \psi_{j_{\sigma(N)}} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \langle \psi_{i_{\sigma^{-1}(1)}} | \psi_{j_{\sigma \circ \sigma^{-1}(1)}} \rangle \dots \langle \psi_{i_{\sigma^{-1}(N)}} | \psi_{j_{\sigma \circ \sigma^{-1}(N)}} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \langle \psi_{i_{\sigma^{-1}(1)}} | \psi_{j_1} \rangle \dots \langle \psi_{i_{\sigma^{-1}(N)}} | \psi_{j_N} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sgn}(\sigma) \langle \psi_{i_{\sigma(1)}} | \psi_{j_1} \rangle \dots \langle \psi_{i_{\sigma(N)}} | \psi_{j_N} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{k=1}^N \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{S}_N \\ \sigma(1)=k}} \text{sgn}(\sigma) \langle \psi_{i_k} | \psi_{j_1} \rangle \dots \langle \psi_{i_{\sigma(N)}} | \psi_{j_N} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{k=1}^N \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{S}_N \\ \sigma(1)=k}} \text{sgn}(\sigma) \times \langle \psi_{i_k} | \phi \rangle \dots \langle \psi_{i_{\sigma(N)}} | \psi_{j_N} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{k=1}^N \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{S}_N \\ \sigma(1)=k}} \text{sgn}(\sigma) \\
&\quad \times (U(\sigma) |\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes \langle \phi | \psi_{i_k} \rangle |\psi_{i_{k+1}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle, |\Psi\rangle)
\end{aligned}$$

où nous avons noté,

$$|\Psi\rangle = |\psi_{j_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_N}\rangle$$

Dans la somme sur σ nous faisons le changement de variable

$$\sigma' = \sigma \circ \tau_{12} \circ \tau_{23} \circ \dots \circ \tau_{k-1k} \quad (2.2.45)$$

La somme devient donc une somme sur les σ' tels que $\sigma'(k) = k$ et $\text{sgn}(\sigma) = \text{sgn}(\sigma')(-1)^{k-1}$. Sommer sur les $\sigma' \in \mathcal{S}_N$ tels que $\sigma'(k) = k$ revient à sommer sur $\pi \in \mathcal{S}_{N-1}$ et $\text{sgn}(\pi) = \text{sgn}(\sigma)$. Ainsi nous obtenons,

$$\begin{aligned}
& (|\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle, a_s^\dagger(|\phi\rangle) |\psi_{j_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_N}\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{k=1}^N \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{S}_N \\ \sigma(1)=k}} \text{sgn}(\sigma) \\
&\quad \times (U(\sigma) |\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes \langle \phi | \psi_{i_k} \rangle |\psi_{i_{k+1}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle, |\Psi\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \sum_{k=1}^N (-1)^{k-1} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_{N-1}} \text{sgn}(\pi) \\
&\quad \times (U(\pi) |\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes \langle \phi | \psi_{i_k} \rangle |\psi_{i_{k+1}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle, |\Psi\rangle) \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{N}} P_f^{N-1} |\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{k-1}}\rangle \otimes \langle \phi | \psi_{i_k} \rangle |\psi_{i_{k+1}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle, |\Psi\rangle \right) \\
&= (a_f(|\phi\rangle) (|\psi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}\rangle, |\psi_{j_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{j_N}\rangle)
\end{aligned}$$

d'où le résultat. On remarque que pour les bosons la démonstration est la même voire encore plus simple car la discussion sur les signatures n'a pas lieu d'être.

Un calcul similaire au cas des opérateurs créations montre que,

$$[a_s(|\phi\rangle), a_s(|\psi\rangle)]_s = 0 \quad (2.2.46)$$

On peut aussi montrer par calcul direct* que l'on a les relations,

$$[a_s^\dagger(|\phi\rangle), a_s(|\psi\rangle)]_s = \langle\phi|\psi\rangle \mathbb{I} \quad (2.2.47)$$

Ces relations forment la seconde partie des *relations de commutation canoniques*.

Remarquons que les applications

$$a_s^\dagger : |\phi\rangle \in \mathcal{H}_0 \longmapsto a_s^\dagger(|\phi\rangle) \quad (2.2.48)$$

$$a_s : |\phi\rangle \in \mathcal{H}_0 \longmapsto a_s(|\phi\rangle) \quad (2.2.49)$$

sont respectivement linéaire et antilinéaire. Ainsi nous pouvons simplement choisir une base de \mathcal{H}_0 et décomposer tous les opérateurs sur cette base. Soit alors par exemple $\{|\phi_i\rangle\}$ une base orthonormée de \mathcal{H}_0 . Nous adoptons les notations,

$$a_{si}^\dagger = a_s^\dagger(|\phi_i\rangle) \quad \text{et} \quad a_{si} = a_s(|\phi_i\rangle) \quad (2.2.50)$$

Les relations de commutation canoniques s'écrivent alors,

$$[a_{si}^\dagger, a_{sj}^\dagger]_s = 0 = [a_{si}, a_{sj}]_s \quad (2.2.51)$$

$$[a_{si}^\dagger, a_{sj}]_s = \delta_{ij} \mathbb{I} \quad (2.2.52)$$

Dans la base des nombres d'occupation associé à la base $\{|\psi_i\rangle\}$, nous pouvons calculer explicitement les éléments de matrice de ces opérateurs. Vous pouvez être ravis (et fiers si vous avez suivi tous les calculs jusque là), ce sont les derniers calculs lourds que nous ferons[†]. On considère alors un état fermionique sur la base des nombres d'occupation[‡] $|n_1, \dots, n_k, \dots\rangle$ et on applique un opérateur a_{fi}^\dagger . Notons $N = \sum_i n_i$

$$\begin{aligned} a_{fi}^\dagger |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle &= c(n_j) \sqrt{N+1} P_f^{N+1} |\phi_i\rangle P_f^N |\psi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes |\psi_k\rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots \\ &= \frac{c(n_j) \sqrt{N+1}}{N!(N+1)!} \\ &\times \sum_{\pi \in \mathcal{S}_{N+1}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sng}(\pi) \text{sgn}(\sigma) U(\pi) |\psi_i\rangle \otimes U(\sigma) |\psi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes |\psi_k\rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots \end{aligned}$$

*. Je pense que nous (je) avons (ai) assez donné en calcul jusqu'ici et je ne pense pas me tromper en disant que tout le monde en a marre. Les calculs ne sont pas plus compliqués, certainement moins que la démonstration de l'adjoint, et les calculs précédents donnent toutes les armes pour les mener à bien.

†. Pour cette partie j'entends...

‡. Le cas bosonique n'est que plus simple.

On repasse désormais avec des indices i_1, \dots, i_{N+1} ,

$$\begin{aligned}
& \frac{c(n_j)\sqrt{N+1}}{N!(N+1)!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_{N+1}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} U(\pi) |\psi_{i_1}\rangle \otimes U(\sigma) |\psi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes |\psi_k\rangle^{\otimes n_k} \otimes \dots \\
&= \frac{c(n_j)\sqrt{N+1}}{N!(N+1)!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_{N+1}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sng}(\pi) \text{sgn}(\sigma) U(\pi) |\psi_{i_1}\rangle \otimes U(\sigma) |\psi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{N+1}}\rangle \\
&= \frac{c(n_j)\sqrt{N+1}}{N!(N+1)!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_{N+1}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sng}(\pi) \text{sgn}(\sigma) U(\pi) |\psi_{i_1}\rangle \otimes |\psi_{i_{\sigma(2)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{\sigma(N+1)}}\rangle \\
&= \frac{c(n_j)\sqrt{N+1}}{N!(N+1)!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_{N+1}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sng}(\pi) \text{sgn}(\sigma) |\psi_{i_{\pi(1)}}\rangle \otimes |\psi_{i_{\pi \circ \sigma(2)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{\pi \circ \sigma(N+1)}}\rangle
\end{aligned}$$

De nouveau on définit $\sigma' \in \mathcal{S}_{N+1}$ tel que $\sigma'(1) = 1$ et $\sigma'(k) = \sigma(k)$ pour $k \neq 1$. On a alors la relation, $\text{sgn}(\sigma) = \text{sgn}(\sigma')$ et de plus l'application $l'_\sigma : \pi \mapsto \pi \circ \sigma'$ est bijective, d'où

$$\begin{aligned}
& \frac{c(n_j)\sqrt{N+1}}{N!(N+1)!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_{N+1}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sng}(\pi) \text{sgn}(\sigma) |\psi_{i_{\pi(1)}}\rangle \otimes |\psi_{i_{\pi \circ \sigma(2)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{\pi \circ \sigma(N+1)}}\rangle \\
&= \frac{c(n_j)\sqrt{N+1}}{N!(N+1)!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_{N+1}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sng}(\pi \circ \sigma') |\psi_{i_{\pi \circ \sigma'(1)}}\rangle \otimes |\psi_{i_{\pi \circ \sigma'(2)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{\pi \circ \sigma'(N+1)}}\rangle \\
&= \frac{c(n_j)\sqrt{N+1}}{(N+1)!} \sum_{\tau \in \mathcal{S}_{N+1}} \text{sng}(\tau) |\psi_{i_{\tau(1)}}\rangle \otimes |\psi_{i_{\tau(2)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{\tau(N+1)}}\rangle \\
&= \sqrt{\frac{N!}{\prod_i n_i!}} \frac{\sqrt{N+1}}{(N+1)!} \sum_{\tau \in \mathcal{S}_{N+1}} \text{sng}(\tau) |\phi_{i_{\tau(1)}}\rangle \otimes |\psi_{i_{\tau(2)}}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{\tau(N+1)}}\rangle \\
&= \sqrt{n_i+1} \sqrt{\frac{(N+1)!}{(n_i+1)! \prod_{j \neq i} n_j!}} \frac{1}{(N+1)!} \\
&\times \sum_{\tau \in \mathcal{S}_{N+1}} \text{sng}(\tau) U(\tau) |\psi_{i_1}\rangle \otimes |\psi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{N+1}}\rangle \\
&= \sqrt{n_i+1} c[(n_j)_{j \neq i}, n_i+1] \frac{1}{(N+1)!} \\
&\times \sum_{\tau \in \mathcal{S}_{N+1}} \text{sng}(\tau) U(\tau) |\psi_{i_1}\rangle \otimes |\psi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{N+1}}\rangle
\end{aligned}$$

Cette formule ressemble énormément à un état de nombre d'occupation, le seul problème est l'ordre des facteurs du produit tensoriel. Nous les remettons alors dans le bon ordre avec une permutation $\theta \in \mathcal{S}_{N+1}$ de sorte que l'on place les $|\phi_1\rangle$ puis les $|\phi_2\rangle$ etc... Remarquons que pour des fermions, il n'y a qu'une seule permutation qui replace les éléments de la sorte car $n_k \in \{0, 1\}$. Pour des bosons il pourrait y en avoir plusieurs, mais le résultat restera le même car nous n'aurons en réalité pas de dépendance en cette permutation (encore une fois l'absence des signature simplifie le cas des bosons).

Il vient alors,

$$\begin{aligned}
& a_{fi}^\dagger |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle \\
&= \sqrt{n_i + 1} c[(n_j)_{j \neq i}, n_i + 1] \frac{1}{(N+1)!} \sum_{\tau \in \mathcal{S}_{N+1}} \text{sng}(\tau) \\
&\quad \times U(\tau) |\psi_{i_1}\rangle \otimes |\psi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{N+1}}\rangle \\
&= \sqrt{n_i + 1} c[(n_j)_{j \neq i}, n_i + 1] \frac{1}{(N+1)!} \\
&\quad \times \sum_{\tau \in \mathcal{S}_{N+1}} \text{sng}(\tau \circ \theta) U(\tau \circ \theta) |\psi_{i_1}\rangle \otimes |\psi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_{N+1}}\rangle \\
&= \sqrt{n_i + 1} c[(n_j)_{j \neq i}, n_i + 1] \text{sgn}(\theta) \frac{1}{(N+1)!} \\
&\quad \times \sum_{\tau \in \mathcal{S}_{N+1}} \text{sng}(\tau) U(\tau) |\psi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes \dots \otimes |\psi_i\rangle^{\otimes (n_i+1)} \otimes \dots \\
&= \text{sgn}(\theta) \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle
\end{aligned}$$

D'où les résultats,

$$a_{fi}^\dagger |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \text{sgn}(\theta) \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad \text{pour des fermions} \quad (2.2.53)$$

$$a_{bi}^\dagger |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad \text{pour des bosons} \quad (2.2.54)$$

Un calcul très similaire montre que,

$$a_{fi} |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \text{sgn}(\theta) \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad \text{pour des fermions} \quad (2.2.55)$$

$$a_{bi} |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad \text{pour des bosons} \quad (2.2.56)$$

ou de nouveau θ désigne la permutation qui nous permet de replacer les vecteurs du produit tensoriel dans le bon ordre pour des fermions.

Remarquons que nous avons défini les opérateurs création et annihilation pour tout nombre de particules N mais il est très facile d'étendre leur définition à l'espace de Fock tout entier par somme direct des opérateurs définis sous chaque sous espace \mathcal{H}_s^N .

2.3 Composition des moments angulaires

Il y a un aspect particulièrement intéressant pour les systèmes composé de plusieurs particules, à savoir leur spin. Dans cette partie, nous reviendrons sur la manière dont un état peut se transformer sous une rotation et construire une base de vecteur propre pour les générateurs des rotations. Nous étudierons ensuite la manière dont se comporte un état composé de plusieurs particules vis à vis des rotations et démontrerons enfin l'important *théorème de Wigner-Eckart* qui permet de trouver facilement les éléments de matrice de certains opérateurs sur une base de vecteurs propres pour les générateurs des rotations.

Nous proposons une discussion très mathématique, pour une discussion plus douce et intuitive, on peut consulter [12] ou [10].

2.3.1 Algèbre de Lie et construction des vecteurs propres

Nous revenons dans un premier temps sur l'algèbre de Lie des rotations et essayons de construire une base de vecteurs propres pour un de ses générateurs.

Comme expliqué dans la première section il importe en réalité de considérer des particules se transformant sous une représentation irréductible de $SU(2)$. De telles représentations sont dites de *spin* j et ont la dimension $2j + 1$ pour $j \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$. Notons \mathcal{H}_j un espace de Hilbert correspondant à une particule de spin j , soit alors,

$$\dim \mathcal{H}_j = 2j + 1 \quad (2.3.1)$$

Nous avons remarqué dans la première partie que les rotations étaient caractérisées par trois paramètres réels ($SU(2)$ est une variété différentielle de dimension 3) et trois opérateurs hermitiens J_i vérifiant les relations de commutation,

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon^{ijk} J_k \quad (2.3.2)$$

Ainsi nous pouvons choisir un des opérateurs J_i , arbitrairement nous choisissons J_3 , et construisons une base orthonormée de \mathcal{H}_j composée de vecteurs propres de J_3^* .

On définit également l'opérateur,

$$\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 \quad (2.3.3)$$

Nous montrons que,

$$[\mathbf{J}^2, J_3] = 0 \quad (2.3.4)$$

La démonstration se fait par calcul direct,

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, J_3] &= [J_1^2, J_3] + [J_2^2, J_3] + [J_3^2, J_3] \\ &= J_1[J_1, J_3] + [J_1, J_3]J_1 + J_2[J_2, J_3] + [J_2, J_3]J_2 \\ &= i\varepsilon^{13k} J_1 J_k + i\varepsilon^{13k} J_k J_1 + i\varepsilon^{23k} J_2 J_k + i\varepsilon^{23k} J_k J_2 \\ &= i\varepsilon^{132} (J_1 J_2 + J_2 J_1) + i\varepsilon^{231} (J_2 J_1 + J_1 J_2) \\ &= 0 \end{aligned}$$

\mathbf{J}^2 et J_3 sont alors codiagonalisables et on peut construire une base orthonormale de vecteurs propres pour \mathbf{J}^2 et J_3 .

Remarquons également que par symétrie des calculs nous avons aussi,

$$[\mathbf{J}^2, J_1] = 0 = [\mathbf{J}^2, J_2] \quad (2.3.5)$$

Et donc \mathbf{J}^2 commute avec les opérateurs J_{\pm} définis par,

$$J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2 \quad (2.3.6)$$

On peut également montrer très facilement les relations,

$$[J_3, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \quad (2.3.7)$$

*. C'est bien évidemment possible car J_3 est hermitien donc diagonalisable en base orthogonale par le théorème spectral.

Construisons alors une base orthonormale de vecteurs propres pour \mathbf{J}^2 et J_3 que l'on note $|\psi_m^\lambda\rangle$ et telle que,

$$\mathbf{J}^2 |\psi_m^\lambda\rangle = \lambda |\psi_m^\lambda\rangle \quad (2.3.8)$$

$$J_3 |\psi_m^\lambda\rangle = m |\psi_m^\lambda\rangle \quad (2.3.9)$$

$$(2.3.10)$$

Remarquons alors que pour un vecteur propre $|\psi_m^\lambda\rangle$ nous avons,

$$J_3 J_\pm |\psi_m^\lambda\rangle = (J_\pm J_3 \pm J_\pm) |\psi_m^\lambda\rangle = (m \pm 1) J_\pm |\psi_m^\lambda\rangle \quad (2.3.11)$$

Ainsi, $J_\pm |\psi_m^\lambda\rangle$ correspond à un vecteur propre associé à la valeur propre $m \pm 1$. Notons alors m_{\min} et m_{\max} les valeurs propres maximales et minimales de J_3^* . Il vient alors,

$$J_- |\psi_{m_{\min}}^\lambda\rangle = 0 \quad (2.3.12)$$

$$J_+ |\psi_{m_{\max}}^\lambda\rangle = 0 \quad (2.3.13)$$

sinon nous pourrions construire des états avec des valeurs propres plus petites et plus grandes que m_{\min} et m_{\max} . Remarquons désormais que nous avons la relation,

$$J_\pm J_\mp = \mathbf{J}^2 - J_3^2 \pm J_3 \quad (2.3.14)$$

Ainsi, en appliquant ces deux équations respectivement à $|\psi_{m_{\min}}^\lambda\rangle$ et $|\psi_{m_{\max}}^\lambda\rangle$, nous obtenons,

$$m_{\max}(m_{\max} + 1) = \lambda = m_{\min}(m_{\min} - 1) \quad (2.3.15)$$

En alliant cette équation avec la condition, $m_{\min} \leq m_{\max}$, il vient forcément

$$m_{\max} = -m_{\min} \quad (2.3.16)$$

On peut montrer que l'on construit forcément par ces opérations $2j + 1$ vecteurs propres de \mathbf{J}^2 et J_3^\dagger dont les valeurs propres associées sont les $m \in \{-j, -j + 1, \dots, j - 1, j\}$. Il est alors évident que,

$$\mathbf{J}^2 = j(j + 1)\mathbb{I} \quad (2.3.17)$$

et nous avons donc déterminé les valeurs propres qui sont données par les relations,

$$\mathbf{J}^2 |\psi_m^j\rangle = j(j + 1) |\psi_m^j\rangle \quad (2.3.18)$$

$$J_3 |\psi_m^j\rangle = m |\psi_m^j\rangle \quad (2.3.19)$$

Nous avons déterminé ces valeurs propres en construisant des vecteurs propres par application des opérateurs J_\pm aux *kets* de la base orthonormale $|\psi_m^j\rangle$. Cependant, il n'y a aucune raison que l'état $J_\pm |\psi_m^j\rangle$ soit encore normalisé. Toutefois, on sait que l'état $J_\pm |\psi_m^j\rangle$ est associé à la valeur propre $m \pm 1$ pour J_3 d'où,

$$J_\pm |\psi_m^j\rangle \propto |\psi_{m\pm 1}^j\rangle \quad (2.3.20)$$

*. Ces valeurs existent forcément car l'espace de Hilbert est de dimension finie $2j + 1$ et il y a alors au maximum $2j + 1$ valeurs propres.

†. L'argument se base principalement sur le fait que si ce n'était pas le cas, alors la représentation de $SU(2)$ choisie admettrait un sous espace stable non trivial et ne serait alors pas irréductible.

On cherche alors à déterminer ce coefficient de proportionnalité. Notons *,

$$J_{\pm} |\psi_m^j\rangle = \alpha^{\pm}(j, m) |\psi_{m\pm 1}^j\rangle \quad (2.3.21)$$

Il vient alors,

$$|\alpha^{\pm}(j, m)|^2 = (J_{\pm} |\psi_m^j\rangle, J_{\pm} |\psi_m^j\rangle) = (|\psi_m^j\rangle, J_{\mp} J_{\pm} |\psi_m^j\rangle) = j(j+1) - m^2 \mp m \quad (2.3.22)$$

On peut alors choisir les coefficients $\alpha^{\pm}(j, m)$ comme réels et positifs (il suffit d'ajuster les phases des $|\psi_m^j\rangle$) et définir,

$$J_{\pm} |\psi_m^j\rangle = \sqrt{j(j+1) - m^2 \mp m} |\psi_{m\pm 1}^j\rangle \quad (2.3.23)$$

Le moment cinétique L_i est relié aux générateurs J_i par la relation $L_i = \hbar J_i$. L'analyse précédente montre alors que pour une particule de spin j , la norme de son spin est toujours $\hbar\sqrt{j(j+1)}$ et les moments cinétiques projetés sur l'axe 3 prennent des valeurs $m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$.

2.3.2 Addition des moments angulaires

La partie précédente ne constituait probablement que des rappels. Nous entrons ici dans le vif du sujet en étudiant ce qu'il se passe lorsque l'on considère le système de deux particules[†] se transformant sous des représentations j et j' de $SU(2)$.

Avant d'étudier ce phénomène, nous donnons quelques précisions sur la manière de définir l'espace de Hilbert pour une particule de spin j . Dans la partie précédente nous avons expliqué qu'une particule de spin j évolue dans un espace de Hilbert de dimension $2j+1$. Cependant, dans la première partie de ce propos, nous avons également mentionné que l'on pouvait choisir de dénoter les états par leur quantité de mouvement. Mais alors laquelle de ces deux affirmations est la vraie ?

En réalité ces deux affirmations sont vraies et il est plus simple de le voir en terme de fonctions d'ondes. Une particule de spin j est alors représentée par $2j+1$ composantes que l'on peut voir comme $2j+1$ fonctions d'onde dépendant de p . Ainsi, il faut réellement voir l'espace de Hilbert d'une particule de spin j comme[‡],

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_j \otimes L^2(\vec{p}) \quad (2.3.24)$$

On peut noter un état propre de cet espace pour \mathbf{J}^2 et J_3 par, $|\psi_m^j(\vec{p})\rangle$. Ainsi l'action d'une rotation sur le système se décompose sous deux actions différentes. La première est évidente et est l'action d'une rotation sur $L^2(\vec{p})$. Elle transforme simplement les rayons $|\vec{p}\rangle$ en des rayons $|R\vec{p}\rangle$. De plus comme la particule a un spin j , la rotation va aussi *mixer* les différentes composantes indexées par m d'un état $|\psi_m^j(\vec{p})\rangle$. Mathématiquement,

$$|\psi(\vec{p})\rangle \xrightarrow{R(\vec{\theta})} e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{J}} |\psi(R\vec{p})\rangle \quad (2.3.25)$$

*. Nous empruntons de nouveau les notations de Weinberg.

†. On dit ici deux particules, mais en réalité le propos que nous exposons reste le même dès que nous voulons ajouter plusieurs moments angulaires et étudier le moment angulaire total, comme par exemple le spin et le moment cinétique classique.

‡. On se place dans le cas où l'on identifie les états par leur quantité de mouvement, la généralisation à d'autres identification est évidente.

où les J_i forment une représentation irréductible l'algèbre de Lie $\mathfrak{su}(2)$ sur \mathcal{H}_j .

Ainsi on se rend compte que conserver la notation de la quantité de mouvement dans le produit tensoriel est inutile, car la manière dont les rotations agissent sur les espaces de quantité de mouvement du produit tensoriel est triviale. Ainsi, dans la discussion qui suit on ne considérera que les espaces vectoriels \mathcal{H}_j sur lesquels les rotations ont des comportements intéressants.

Reprenons alors nos deux particules de spin respectifs j et j' . L'espace de Hilbert à étudier est naturellement,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_j \otimes \mathcal{H}_{j'} \quad (2.3.26)$$

dont on peut choisir une base,

$$\mathcal{B} = \left\{ |\psi_m^j\rangle \otimes |\psi_{m'}^{j'}\rangle \right\} \quad (2.3.27)$$

où $m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$ et $m' \in \{-j', -j'+1, \dots, j'-1, j'\}$. Sous l'effet d'une rotation, un état $|\phi_j\rangle \otimes |\phi_{j'}\rangle$ se transforme naturellement sous la forme,

$$|\phi_j\rangle \otimes |\phi_{j'}\rangle \xrightarrow{R(\vec{\theta})} e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{J}^j} |\phi_j\rangle \otimes e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{J}^{j'}} |\phi_{j'}\rangle \quad (2.3.28)$$

où nous avons noté J_i^j les générateurs de la représentation de l'algèbre de Lie $\mathfrak{su}(2)$ induite sur \mathcal{H}_j .

Mathématiquement, on dit alors que l'espace \mathcal{H} admet la représentation produit tensoriel définie par,

$$\rho_{j \otimes j'}(R)(|\phi_j\rangle \otimes |\phi_{j'}\rangle) = \rho_j(R) |\phi_j\rangle \otimes \rho_{j'}(R) |\phi_{j'}\rangle \quad (2.3.29)$$

En tant que représentation, on doit également pouvoir trouver des opérateurs J_i agissant sur \mathcal{H} , tels que

$$|\phi_j\rangle \otimes |\phi_{j'}\rangle \xrightarrow{R(\vec{\theta})} e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{J}} |\phi_j\rangle \otimes |\phi_{j'}\rangle \quad (2.3.30)$$

Heureusement, nous n'avons aucun calcul à faire ici, les mathématiciens nous ont déjà préparés tous les résultats ! En effet, la représentation de l'algèbre de Lie $\mathfrak{su}(2)$ à considérer pour cette représentation sur le produit tensoriel est simplement donnée par,

$$J_i = J_i^j \otimes \mathbb{I}_{2j'+1} + \mathbb{I}_{2j+1} \otimes J_i^{j'} \quad (2.3.31)$$

Ce résultat d'origine mathématique semble assez intuitif physiquement, nous ne faisons qu'additionner les moments angulaires !

Cependant, contrairement à la section précédente, la discussion est désormais plus compliquée, la représentation $\rho_{j \otimes j'}$ n'a aucune raison d'être irréductible désormais. Cela signifie notamment que la valeur prise par la norme du moment angulaire \mathbf{J}^2 n'est plus constante sur tout l'espace de Hilbert. Or nous avons décidé de classer nos particules précisément par le fait qu'elles se transforment sous une représentation irréductible. Ainsi, le système de deux particules de spin j et j' donne naissance à plusieurs particules différentes. La question qui demeure encore est alors, quels en sont le spin ? Encore une fois nous faisons appel à nos très bons amis mathématiciens qui nous indiquent que,

$$\rho_{j \otimes j'} = \rho_{|j-j'|} \oplus \rho_{|j-j'|+1} \oplus \dots \oplus \rho_{j+j'} \quad (2.3.32)$$

C'est à dire que la particule que nous obtenons peut avoir un spin compris entre $|j - j'|$ et $j + j'$ avec un pas de 1. Ainsi on ne peut pas être certain du spin de la particule que l'on crée en associant ces deux particules. Cependant, on remarque que l'on peut être certain de créer un boson ou un fermion, car pour tout k , $|j - j'| + k$ est entier ou demi entier lorsque $|j - j'|$ l'est. Remarquons déjà que cette décomposition donne le bon nombre d'états. Chaque représentation ρ_k fournit $2k + 1$ états, d'où (en supposant par exemple $j \geq j'$)

$$\begin{aligned} \sum_{k=j-j'}^{j+j'} (2k+1) &= 2 \left(\sum_{k=0}^{j+j'} k - \sum_{k=0}^{j-j'} k \right) + 2j+1 \\ &= [(j+j'+1)(j+j') + (j-j'+1)(j-j')] + 2j+1 \\ &= (2j'+1)(2j+1) \end{aligned}$$

qui est bien le nombre d'états attendus dans $\mathcal{H}_j \otimes \mathcal{H}_{j'}$.

Ce qui peut désormais être intéressant est de déterminer les coefficient des vecteurs propres associés à \mathbf{J}^2 et J_3 sur la base $|\phi_m^j\rangle \otimes |\phi_{m'}^{j'}\rangle$. Notons alors J et M les caractéristiques du moment angulaire obtenu après addition des moments angulaires,

$$|\Psi_M^J\rangle = \sum_{m=-j}^j \sum_{m'=-j'}^{j'} \left(\langle \psi_m^j | \otimes \langle \psi_{m'}^{j'} |, |\Psi_M^J\rangle \right) |\psi_m^j\rangle \otimes |\psi_{m'}^{j'}\rangle \quad (2.3.33)$$

On appelle les coefficients $\langle \psi_m^j | \otimes \langle \psi_{m'}^{j'} |, |\Psi_M^J\rangle$ les coefficients de Clebsch-Gordan et on les note,

$$C_{jj'}(J, M; m, m') = \left(\langle \psi_m^j | \otimes \langle \psi_{m'}^{j'} |, |\Psi_M^J\rangle \right) \quad (2.3.34)$$

Remarquons déjà que la double somme précédente n'est en réalité qu'une simple somme, car les seuls coefficients non nuls sont ceux tels que $M = m + m'$. Physiquement cela signifie simplement que le moment angulaire projeté sur le 3ème axe est la somme des moments angulaires projetés sur cet axe. Mathématiquement, on obtient ce résultat en appliquant l'opérateur,

$$J_3 = J_3^j \otimes \mathbb{I}_{2j'+1} + \mathbb{I}_{2j+1} \otimes J_3^{j'} \quad (2.3.35)$$

Appliquons désormais J_\pm à la somme précédente pour obtenir une relation de récurrence,

$$\begin{aligned} J_\pm |\Psi_M^J\rangle &= \sqrt{J(J+1) - M^2 \mp M} |\Psi_{M\pm 1}^J\rangle \\ &= \left(J_\pm^j \otimes \mathbb{I}_{2j'+1} + \mathbb{I}_{2j+1} \otimes J_\pm^{j'} \right) \sum_{m=-j}^j \sum_{m'=-j'}^{j'} C_{jj'}(J, M; m, m') |\psi_m^j\rangle \otimes |\psi_{m'}^{j'}\rangle \\ &= \sum_{m=-j}^j \sum_{m'=-j'}^{j'} C_{jj'}(J, M; m, m') \left(\sqrt{j(j+1) - m^2 \mp m} |\psi_{m\pm 1}^j\rangle \otimes |\psi_{m'}^{j'}\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{j'(j'+1) - m'^2 \mp m'} |\psi_m^j\rangle \otimes |\psi_{m'\pm 1}^{j'}\rangle \right) \end{aligned}$$

Un changement d'indice dans les sommes donne alors les relations de récurrence,

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M^2 \mp M} C_{jj'}(J, M \pm 1; m, m') \\ = \sqrt{j(j+1) - m^2 \mp m} C_{jj'}(J, M; m \mp 1, m') \\ + \sqrt{j'(j'+1) - m'^2 \mp m'} C_{jj'}(J, M; m, m' \mp 1) \end{aligned} \quad (2.3.36)$$

En général, pour déterminer les coefficients de Clebsch-Gordan, deux méthodes sont possibles. La première est de partir de l'état maximal $|\Psi_{j+j'}^{j+j'}\rangle$ et d'appliquer successivement l'opérateur J_- pour déterminer tous les états $|\Psi_m^{j+j'}\rangle$. Ensuite il faut descendre à $J = j' + j - 1$. Pour déterminer le premier état, on utilise l'orthogonalité de cet état avec les états précédemment déterminés puis on peut de nouveau appliquer J_- . De cette manière on arrive à construire tous les états et à déterminer les coefficients correspondant. Cette méthode est très lourde de calcul, c'est pourquoi je recommande la seconde méthode, beaucoup plus maligne : consulter une table préexistante relatant les coefficients. On en propose une ci-dessous.

Enfin, remarquons une dernière propriété des coefficients de Clebsch-Gordan. Ecrivons l'orthonormalité des états $|\Psi_M^J\rangle$,

$$\delta_{JJ'}\delta_{MM'} = \left\langle \Psi_M^J \left| \Psi_{M'}^{J'} \right. \right\rangle = \sum_{mm'} C_{jj'}(J, M; m, m') C_{jj'}(J', M'; m, m') \quad (2.3.37)$$

Autrement dit, la matrice carrée $C_{jj'}$ vérifie,

$$C_{jj'} C_{jj'}^T = 1 \quad (2.3.38)$$

Ainsi $C_{jj'}$ est inversible d'inverse $C_{jj'}^T$, on a donc également,

$$C_{jj'}^T C_{jj'} = 1 \quad (2.3.39)$$

Qui s'écrit également,

$$\sum_{JM} C_{jj'}(J, M; m_1, m'_1) C_{jj'}(J', M'; m_2, m'_2) = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (2.3.40)$$

Et on peut aussi inverser la relation sur les états,

$$|\psi_m^j\rangle \otimes |\psi_{m'}^{j'}\rangle = \sum_{JM} C_{jj'}(J, M; m, m') |\Psi_M^J\rangle \quad (2.3.41)$$

Ces relations n'ont rien de physique et ne sont que des conséquences mathématiques de l'algèbre linéaire*.

Cette manière de combiner les spins donne naissance à une gigantesque classification des différentes particules en physique des particules. Pour plus d'informations sur ce sujet, n'hésitez pas à consulter [3].

2.3.3 Théorème de Wigner-Eckart

Dans cette dernière partie, nous donnons un avant-goût de la puissance de la théorie des groupes et de ses applications en physique. Nous montrons alors le théorème de Wigner-Eckart qui montre que l'on peut dans certains cas *factoriser* la dépendance en le groupe $SU(2)$ des éléments de matrice.

Soit $j \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$. On dit qu'une famille d'opérateurs $\{O_m^j\}_{-j \leq m \leq j}$ est de spin j , si ces opérateurs se transforment sous une représentation irréductible j de $SU(2)$. On se propose d'être plus précis sur cette définition.

*. Si cette phrase, vous paraît méprisante, j'en suis désolé, bien au contraire je tiens à souligner la manière impressionnante dont les maths nous guident dans notre étude de la physique.

Les rotations définissent une représentation unitaire de $SU(2)$ sur l'espace de Hilbert,

$$\begin{aligned} \rho_{\mathcal{H}} : SU(2) &\longrightarrow GL(\mathcal{H}) \\ R &\longmapsto \rho_{\mathcal{H}}(R) \end{aligned} \quad (2.3.42)$$

Le fait de faire une rotation ne doit pas changer la mesure, et en particulier les éléments de matrice d'un opérateur O quelconque doivent rester les mêmes après transformation des rayons par une rotation. Ainsi, par une rotation les opérateurs se transforment sous la forme,

$$O \xrightarrow{R} \rho_{\mathcal{H}}(R) O \rho_{\mathcal{H}}(R)^\dagger \quad (2.3.43)$$

Ainsi il y a également une représentation de $SU(2)$ qui est induite sur les espace d'opérateurs

$$\rho_{\mathcal{L}(\mathcal{H})} : SU(2) \longrightarrow GL(\mathcal{L}(\mathcal{H})) \quad (2.3.44)$$

et cette représentation est définie par,

$$\rho_{\mathcal{L}(\mathcal{H})}(R) O = \rho_{\mathcal{H}}(R) O \rho_{\mathcal{H}}(R)^\dagger \quad (2.3.45)$$

De la même manière que sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} , on peut décomposer cette représentation en somme directe de représentations irréductibles indexées par $j \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$ de dimension respective $2j + 1$. Cette décomposition, crée une base de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ en groupes de $2j + 1$ opérateurs qui se transforment entre eux, c'est à dire en opérateurs O_m^j pour $m \in \{-j, -j + 1, \dots, j\}$ tels que,

$$\rho_{\mathcal{H}}(R) O_m^j \rho_{\mathcal{H}}(R)^\dagger = \sum_{m'=-j}^j D_{mm'}^j(R) O_{m'}^j \quad (2.3.46)$$

Ce sont ces opérateurs que l'on appelle *opérateurs de spin j* .

En étudiant une rotation infinitésimale, on peut montrer que les opérateurs O_m^j vérifient les relations de commutation,

$$[J_3, O_m^j] = m O_m^j \quad (2.3.47)$$

$$[J_\pm, O_m^j] = \sqrt{j(j+1) - m^2 \mp m} O_{\pm 1}^j \quad (2.3.48)$$

$$(2.3.49)$$

Retournons dès lors au sujet principal qu'est le théorème de Wigner-Eckart. En règle générale, nous pouvons indexer les états propres du système (c'est-à-dire états propres de l'Hamiltonien), sous la forme $\{|j, m, \alpha\rangle$ où α se réfère aux autres degrés de libertés possibles que le moment angulaire. Considérons une famille d'opérateurs O_M^J de spin J . Le théorème de Wigner-Eckart indique que,

$$\langle j', m', \alpha' | O_M^J | j, m, \alpha \rangle = C_{jJ}(j', m'; M, m) \langle j', \alpha' | O_M^J | j, \alpha \rangle \quad (2.3.50)$$

où le coefficient $\langle j', \alpha' | O_M^J | j, \alpha \rangle$ est appelé élément de matrice réduit et ne dépend pas de m et m' .

Les opérateurs de spin 1 sont appelés *opérateurs vecteurs*. Remarquons que \mathbf{J} est lui-même un opérateur vecteur. Si l'on considère un autre opérateur vecteur \mathbf{V} dont les éléments de matrice réduits sont non nuls, il vient alors directement, et remarquablement,

$$\langle j', m', \alpha' | V_i | j, m, \alpha \rangle = \frac{\langle j', \alpha' | V_i | j, \alpha \rangle}{\langle j', \alpha' | J_i | j, \alpha \rangle} \langle j', m', \alpha' | J_i | j, m, \alpha \rangle \quad (2.3.51)$$

Cela signifie que tout opérateur vecteur a des éléments de matrices qui se déduisent de ceux de \mathbf{J} par un coefficient de proportionnalité qui ne dépend pas de m ou m' .

3 Formalisme canonique

Une approche purement Hamiltonienne de la mécanique quantique, bien que fonctionnelle la plupart du temps, peut parfois s'avérer lourde ou bien même cacher des subtilités qui ne devraient pas être négligées. Dans cette section nous développons alors l'approche Lagrangienne de la mécanique quantique. Cette approche tire son origine principalement de la mécanique classique (ou mécanique analytique) et c'est donc naturellement que nous commençons par en donner un bref aperçu.

3.1 Rappels classiques

En mécanique classique, la dynamique est régie par les *équations du mouvement*. Dans une première approche elles sont données comme un postulat sous le nom de *principe fondamental de la dynamique* ou *deuxième loi de Newton*. Dans une seconde étude plus poussée de la mécanique, on préfère dire que ces derniers résultats ne sont pas des postulats, mais sont eux-mêmes obtenus à partir d'un principe plus fondamental connu sous le nom de *principe variationnel* ou *principe du maximum d'entropie*. Le principe est comme suit.

Considérons un système régi par des variables dynamiques, $q_N(t)$. On postule alors l'existence d'une quantité, $L(q, \dot{q}, t)$ * appelée *Lagrangien* telle que les équations du mouvement soient données par les points stationnaires de l'*action* définie par,

$$S[q] = \int_{-\infty}^{\infty} dt L(q, \dot{q}, t) \quad (3.1.1)$$

3.1.1 Approche Lagrangienne

Notre but est alors de trouver les variables dynamiques q_N qui extremisent l'action $S[q]$. La manière de procéder est assez simple. Considérons des coordonnées q_N qui extremisent l'action S . Par définition, l'action S est stationnaire au point q_N , ainsi, pour un changement de coordonnées $q_N + \delta q_N$, le changement de l'action δS doit être nul. Soit alors,

$$S + \delta S = \int_{-\infty}^{\infty} dt L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) = S \quad (3.1.2)$$

D'où au première ordre en la variation δ^\dagger

$$\begin{aligned} 0 = \delta S &= \sum_N \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial q_N} \delta q_N + \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_N} \delta \dot{q}_N \right] \\ &= \sum_N \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial q_N} \delta q_N - \frac{d}{dt} \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_N} \delta q_N \right] + \sum_N \left[\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_N} \delta q_N \right]_{-\infty}^{\infty} \end{aligned}$$

En supposant que le terme de bord s'annule (par exemple en considérant que les chemins q_N et $q_N + \delta q_N$ démarrent et terminent au même point) et en utilisant le fait

*. Techniquement on pourrait avoir des formules plus générales, mais on se restreint ici au cas où le Lagrangien ne dépend que de la dérivée première des coordonnées dynamiques.

†. Nous ne sommes pas mathématiquement rigoureux ici, mais tous les résultats peuvent s'obtenir de manière plus rigoureuse, mais plus lourde.

que cette égalité doit être vraie quelque soit la variation δq choisie, nous obtenons les équations,

$$\frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial q_N} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_N} \quad (3.1.3)$$

Ces équations sont précisément les *équations du mouvement* ou les *équations d'Euler-Lagrange*.

L'étude de plusieurs cas classiques permet de déterminer qu'il faut en général choisir,

$$L = T - V \quad (3.1.4)$$

où T est l'énergie cinétique et V l'énergie potentielle.

3.1.2 Symétries

L'intérêt de l'approche canonique apparaît clairement lorsque l'on étudie les symétries du système. Considérons une transformation infinitésimale* s'écrivant sous la forme,

$$q_N \rightarrow q_N + \varepsilon f_N[q; t] \quad (3.1.5)$$

où ε est une quantité infinitésimale (c'est à dire qu'il faudra toujours partir du principe que nous la faisons tendre vers 0). On appelle alors *symétrie continue*, une telle transformation qui laisse invariante l'action $S[q]$, c'est à dire telle que

$$\delta S = \varepsilon \sum_N \int dt \left[\frac{\partial L}{\partial q_N} f_N[q; t] + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} \frac{df_N[q; t]}{dt} \right] = 0 \quad (3.1.6)$$

Evidemment la considération des symétries se fait sans impliquer les équations du mouvement, c'est à dire que l'action reste invariante même si les équations du mouvement ne sont pas satisfaites (sinon l'égalité précédente est triviale, c'est un cas particulier de l'étude précédente). Remarquons dès lors que les transformations qui transforment le Lagrangien sous la forme,

$$\delta L = \varepsilon \frac{d}{dt} G \quad (3.1.7)$$

où G est une fonction décroissant assez rapidement en $t \rightarrow \pm\infty$, sont des symétries du systèmes. En effet, nous avons,

$$\delta S = \int_{-\infty}^{\infty} dt \delta L = \varepsilon [G(t)]_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad (3.1.8)$$

Dans le cas particulier où $G = 0$, on dit que la transformation est aussi une symétrie du Lagrangien.

Tout l'intérêt du formalisme canonique est de produire naturellement des quantités conservées lorsque les équations du mouvement sont satisfaites. Ce résultat est connue sous le nom du *théorème de Noether*.

*. On se restreint ici à l'étude des symétries continues qui peuvent s'exprimer comme l'action d'un groupe de Lie sur les coordonnées q_N , contrairement aux symétries discrètes qui s'expriment comme l'action d'un groupe discret, par exemple la symétrie $q_N \rightarrow -q_N$ associée au groupe \mathbb{Z}_2 . En toute généralité une symétrie est alors une transformation quelconque du système laissant l'action invariante.

Considérons une symétrie continue telle que $\delta L = \frac{d}{dt}G$. Nous avons alors,

$$\delta L = \varepsilon \sum_N \left[\frac{\partial L}{\partial q_N} f_N[q; t] + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} \frac{df_N[q; t]}{dt} \right] = \varepsilon \frac{dG}{dt} \quad (3.1.9)$$

Si l'on suppose de plus que les équations du mouvement sont satisfaites, il vient également,

$$\frac{dG}{dt} = \sum_N \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} \right) f[q; t] + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} \frac{df[q; t]}{dt} \right] = \frac{d}{dt} \left(\sum_N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} f[q; t] \right) \quad (3.1.10)$$

soit alors la loi de conservation,

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} f[q; t] - G \right) = 0 \quad (3.1.11)$$

3.1.3 Approche Hamiltonienne

A partir du formalisme Lagrangien, nous pouvons développer le formalisme Hamiltonien en prenant la transformée de Legendre du Lagrangien,

$$H = \sum_N \dot{q}_N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} - L \quad (3.1.12)$$

L'intérêt de cette définition est de remarquer que si L ne dépend pas explicitement du temps, c'est-à-dire ne dépend du temps que par q et \dot{q} , alors H est une quantité conservée lorsque les équations du mouvement sont satisfaites. Ce résultat est assez facile à démontrer, calculons simplement la dérivée de H par rapport au temps,

$$\frac{dH}{dt} = \sum_N \left[\ddot{q}_N \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} + \dot{q}_N \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} \right] - \frac{dL}{dt} \quad (3.1.13)$$

La dérivée de L par rapport au temps s'écrit,

$$\frac{dL}{dt} = \sum_N \left[\frac{\partial L}{\partial q_N} \dot{q}_N + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} \ddot{q}_N \right] + \frac{\partial L}{\partial t} \quad (3.1.14)$$

En injectant cette forme dans l'expression de $\frac{dH}{dt}$ et l'utilisation des équations du mouvement donne alors très facilement,

$$\frac{dH}{dt} = - \frac{\partial L}{\partial t} \quad (3.1.15)$$

Ainsi H est conservé si L ne dépend pas explicitement du temps.

En général les équations du mouvement sont d'ordre 2 en t . Il est plus simple de travailler avec des équations d'ordre 1, on introduit alors les variables *canoniques conjuguées* p_N aux q_N sous la forme,

$$p_N = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_N} \quad (3.1.16)$$

C'est à dire qu'au lieu d'avoir des équations d'ordre 2 en temps, nous doublons le nombre de variables et donc le nombre d'équations mais obtenons des équations

d'ordre 1 en temps. Les variables à étudier sont alors les p_N et q_N , et \dot{q}_N est à remplacer par son expression en fonction des p et q . L'Hamiltonien est désormais à regarder comme une fonction $H(p, q)$ des p_N et q_N .

Nous pouvons désormais exprimer les équations du mouvement en dérivant l'expression de l'Hamiltonien par rapport à q_N et p_N . Commençons par q_N ,

$$\frac{\partial H}{\partial q_N} = \sum_M \frac{\partial \dot{q}_M}{\partial q_N} p_M - \sum_M \left[\frac{\partial L}{\partial q_M} \frac{\partial q_M}{\partial q_N} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_M} \frac{\partial \dot{q}_M}{\partial q_N} \right] = -\frac{\partial L}{\partial q_N} \quad (3.1.17)$$

En utilisant désormais les équations du mouvement pour L ,

$$\dot{p}_N = -\frac{\partial H}{\partial q_N} \quad (3.1.18)$$

Un calcul très similaire donne également,

$$\dot{q}_N = \frac{\partial H}{\partial p_N} \quad (3.1.19)$$

Ces équations portent le nom d'*équations d'Hamilton*.

3.2 Aspects quantiques

De manière très brève, nous venons de passer en revue les aspects les plus importants du formalisme canonique en mécanique classique. Nous passons désormais aux aspects quantiques de la théorie, en particulier à la manière dont nous pouvons trouver les relations de commutation canoniques lorsque nous promouvons les variables q_N et p_N au rang d'opérateurs agissant sur l'espace de Hilbert.

3.2.1 Variables canoniques

Il n'y a probablement pas de *bonne* justification expliquant la manière dont nous nous permettons de promouvoir les variables canoniques en opérateurs. Cependant, je trouve la discussion de Weinberg dans [10], Chapitre 9.4 élégante et c'est celle que nous suivons ici.

Reprenons le cas d'une symétrie continue du système, et imposons de plus que ce soit une symétrie du Lagrangien,

$$q_N \rightarrow q_N + \varepsilon f_N[q; t] \quad (3.2.1)$$

En mécanique quantique* cette transformation est représentée, au sens mathématique du terme, par un opérateur U qui est unitaire†. De plus supposons que ces transformations forment un groupe de Lie, alors cette transformation peut s'écrire infinitésimalement sous la forme,

$$U = 1 - i\varepsilon \frac{F}{\hbar} + \dots \quad (3.2.2)$$

*. Se référer au théorème de Wigner et aux discussions de la Partie I.

†. On exclut le cas antiunitaire car les transformations infinitésimales sont dans la composante connexe de l'identité.

où F est un élément de l'algèbre de Lie associée (appelé *générateur* en physique). Nous imposons de plus que la transformation effectue bien l'effet attendu, à savoir,

$$U^{-1}q_N U = q_N + \varepsilon f_N[q; t] \quad (3.2.3)$$

où q_N est ici à considérer comme un opérateur agissant sur l'espace de Hilbert quantique du système. En développant cette dernière expression de manière infinitésimale, l'opérateur F , vérifie,

$$[F, q_N] = -i\hbar f_N[q; t] \quad (3.2.4)$$

On peut assez naturellement supposer que F est la quantité conservée associée à la symétrie que nous avons calculée précédemment, c'est-à-dire,

$$F = \sum_N p_N f_N[q; t] \quad (3.2.5)$$

Ainsi, la relation de commutation est directement vérifiée si nous imposons les relations de commutation,

$$[q_N(t), p_M(t)] = i\hbar \delta_{NM} \quad (3.2.6)$$

$$[q_N(t), q_M(t)] = [p_N(t), p_M(t)] = 0 \quad (3.2.7)$$

Remarquons que grâce à ces relations de commutation, on peut toujours placer tous les opérateurs q_N à gauche des opérateurs p_N . C'est la convention que nous adoptons désormais. On peut alors obtenir les relations de commutation suivantes pour une fonction quelconque $f(q, p)$ des q_N et p_N ,

$$[f(q, p), q_N] = -i\hbar \frac{\partial f(q, p)}{\partial p_N} \quad (3.2.8)$$

$$[f(q, p), p_N] = i\hbar \frac{\partial f(q, p)}{\partial q_N} \quad (3.2.9)$$

Démontrons ce résultat en considérant un monome,

$$f(q, p) = q_{i_1} \dots q_{i_r} p_{j_1} \dots p_{j_t} \quad (3.2.10)$$

On fait passer le terme q_N dans $f(q, p)q_N$ à gauche de tous les termes en p en utilisant les relations de commutation,

$$\begin{aligned} f(q, p)q_N &= q_{i_1} \dots q_{i_r} p_{j_1} \dots p_{j_t} q_N \\ &= q_{i_1} \dots q_{i_r} p_{j_1} \dots p_{j_{t-1}} q_N p_{j_t} - i\hbar q_{i_1} \dots q_{i_r} p_{j_1} \dots p_{j_{t-1}} \delta_{j_t N} \\ &= q_{i_1} \dots q_{i_r} q_N p_{j_1} \dots p_{j_t} - i\hbar \sum_{k=1}^t \prod_{s \neq t} p_{j_s} \delta_{j_s N} \\ &= q_N f(q, p) - i\hbar \frac{\partial f(q, p)}{\partial p_N} \end{aligned}$$

d'où le résultat. La démonstration de l'autre commutateur se démontre de manière similaire.

Remarquons alors que nous obtenons alors les équations d'Heisenberg à partir des équations d'Hamilton,

$$\dot{p}_N = -\frac{\partial H}{\partial q_N} = \frac{i}{\hbar} [H, p_N] \quad (3.2.11)$$

$$\dot{q}_N = \frac{\partial H}{\partial p_N} = \frac{i}{\hbar} [H, q_N] \quad (3.2.12)$$

Cela prouve également de nouveau que l'Hamiltonien est le générateur des translations dans le temps. Ainsi pour une fonction quelconque $f(q, p)$, nous avons la relation,

$$\dot{f}(q, p) = \frac{i}{\hbar} [H, f(q, p)] \quad (3.2.13)$$

Des calculs similaires montrent également que pour des fonctions quelconques $f(q, p)$ et $g(q, p)$, nous avons,

$$[f(q, p), g(q, p)] = i\hbar \sum_N \left[\frac{\partial f}{\partial q_N} \frac{\partial g}{\partial p_N} - \frac{\partial g}{\partial q_N} \frac{\partial f}{\partial p_N} \right] \quad (3.2.14)$$

Cette dernière quantité est connue en mécanique classique sous le nom de *crochet de Poisson* et est notée, $[\cdot, \cdot]_P$. Ainsi le commutateur en mécanique quantique hérite de toutes les propriétés du crochet de Poisson. L'antisymétrie,

$$[f, g] = -[g, f] \quad (3.2.15)$$

La composition,

$$[f, gh] = [f, g]h + g[f, h] \quad (3.2.16)$$

et l'identité de Jacobi

$$[f, [g, h]] + [h, [f, g]] + [g, [h, f]] = 0 \quad (3.2.17)$$

3.3 Intégrale de chemin

L'approche que nous allons développer dans ce propos se base sur *l'intégrale de chemin* développée par Feynman en mécanique quantique. Nous revenons dans cette première partie sur la formulation de la mécanique quantique à l'aide de l'intégrale de chemin. Nous décrivons alors la manière dont nous pouvons appliquer ces idées à des champs quantiques, puis faisons le lien avec la formulation canonique de la théorie quantique des champs.

3.3.1 L'idée de Feynman

Avant d'entrer dans la description mathématique du sujet, expliquons l'intuition de Feynman quant à l'intégrale de chemin. Pensons premièrement, à une expérience de type trous de Young, avec une source S , deux trous A_i , et un écran sur lequel on mesure l'amplitude reçue en un point O (Figure 1). La mécanique quantique nous indique que l'amplitude totale reçue est,

$$\mathcal{A}(S \rightarrow O) = \mathcal{A}(S \rightarrow A_1 \rightarrow O) + \mathcal{A}(S \rightarrow A_2 \rightarrow O) \quad (3.3.1)$$

Jusqu'ici rien ne devrait vous paraître nouveau ni révolutionnaire. L'expérience devient plus intéressante si l'on imagine ajouter plus de trous sur l'écran intermédiaire, disons un nombre n . L'amplitude obtenue sera alors :

$$\mathcal{A}(S \rightarrow O) = \sum_{i=1}^n \mathcal{A}(S \rightarrow A_i \rightarrow O) \quad (3.3.2)$$

Cette formule est une simple généralisation de la formule précédentes avec n trous au lieu de 2.

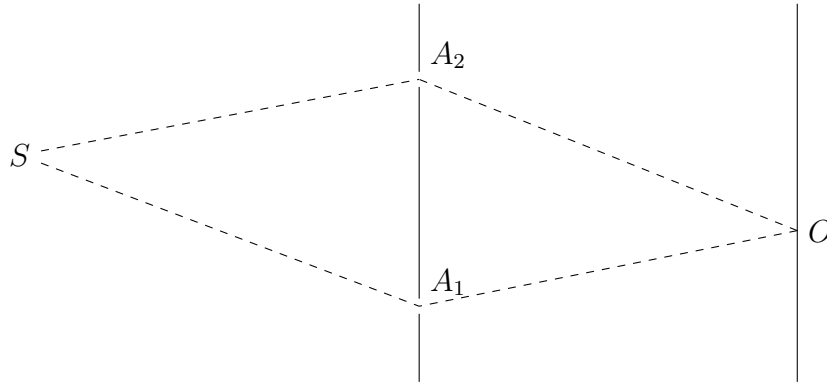


FIGURE 1 – Expérience des trous de Young

Compliquons encore légèrement l'expérience et ajoutons plus d'écrans intermédiaires, disons par exemple un nombre k . Sur chaque écran, il y a plusieurs trous, pas forcément le même nombre, disons par exemple avoir n_k trous sur l'écran k . Géométriquement, on note ces trous A_{li} , avec $l \in \llbracket 1, k \rrbracket$ et $i \in \llbracket 1, n_l \rrbracket$, l représentant l'écran, et i la position du trou sur l'écran l . La nouvelle amplitude obtenue en O pour cette expérience devient,

$$\mathcal{A}(S \rightarrow O) = \sum_{i_1 \dots i_k} \mathcal{A}(S \rightarrow A_{1i_1} \rightarrow A_{2i_2} \rightarrow \dots \rightarrow A_{ki_k} \rightarrow O) \quad (3.3.3)$$

Faisons un dernier effort, et supposons désormais faire tendre le nombre d'écrans et le nombre de trous par écran vers l'infini. Chaque écran ayant une infinité de trous, tout se passe comme si il n'y avait simplement pas d'écrans, la particule se propage dans le vide ! C'est là l'essence de l'idée de Feynman. On ne paramètre plus le chemin suivi par la particule par un ensemble de point A_{li} mais désormais par une fonction

$$\gamma : [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R}^3 \quad (3.3.4)$$

telle que $\gamma(0) = S$ et $\gamma(1) = O$. L'amplitude que l'on mesure en O est alors donnée par,

$$\mathcal{A}(S \rightarrow O) = \sum_{\gamma} \mathcal{A}(S \xrightarrow{\gamma} O) \quad (3.3.5)$$

Nous tentons désormais d'explicitier *mathématiquement** le principe que nous venons de décrire. Pour traiter plus facilement ce problème, il est confortable d'utiliser le formalisme d'Heisenberg dont nous faisons quelques rappels ci-dessous.

Du point de vue de Schrödinger, les états $|\psi\rangle$ dépendent du temps et les opérateurs n'en dépendent pas (mises à part les dépendances explicites). Les états évoluent selon l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_S = \hat{H} |\psi(t)\rangle_S \quad (3.3.6)$$

Du point de vue de Heisenberg, toute la dépendance temporelle est incluse dans les opérateurs et les états sont considérés comme constants. On choisit $t = 0$, comme

*. Nous écrivons ce mot en italique pour appuyer sur le fait que le gros mot *maths* ne va pas forcément de pair avec *rigueur*. En effet, ici nous ne donnons qu'un avant-goût de rigueur mathématique et présentons l'intégrale de chemin de manière peu précise. Nous obtiendrons plus précisément ces résultats dans la section suivante.

point de coïncidence des deux descriptions, de sorte qu'à $t = 0$, $|\psi\rangle_H = |\psi(t)\rangle_S$. On a alors $\forall t$, $|\psi(t)\rangle_S = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi\rangle_H$. De la même manière, si un opérateur indépendant du temps est dans la description de Schrödinger, on le définit du point de vue d'Heisenberg par

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{O}_S e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (3.3.7)$$

Il vient alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) &= \frac{i\hat{H}}{\hbar} \hat{O}_H(t) - \hat{O}_H(t) \frac{i\hat{H}}{\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}_H(t)] \end{aligned}$$

qui est l'équation d'Heisenberg pour les opérateurs. Notons au passage qu'avec cette définition $\hat{H}_H = \hat{H}_S$.

Désormais, s'il n'y a pas de dépendance en temps explicite des états (ou d'indice H ou S), nous considérons des états du point de vue de Heisenberg.

Revenons au problème qui nous intéresse. On considère avoir une particule dans l'état de position $|q_I\rangle$ à $t = 0$, nous voulons connaître l'amplitude de trouver cette particule en un état de position $|q_F\rangle$ après un temps T . En mécanique quantique cette amplitude est donnée par,

$$\langle q_F | q_I(T) \rangle = \langle q_F | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | q_I \rangle \quad (3.3.8)$$

Pour implémenter l'idée de l'intégrale de chemin que nous venons de décrire, nous remarquons qu'il faut segmenter la trajectoire de la particule en une infinité de petits trajets élémentaires. Pour ce faire, nous divisons l'intervalle de temps T en N intervalles de temps $\Delta t = T/N$ (N sera voué à tendre vers l'infini à la fin du calcul) et nous insérons $N - 1$ résolutions de l'identité $\hat{I} = \int dq |q\rangle \langle q|$. L'amplitude précédente devient,

$$\begin{aligned} \langle q_F | q_I(T) \rangle &= \langle q_F | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \dots e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | q_I \rangle \\ &= \langle q_F | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \int dq_{N-1} |q_{N-1}\rangle \langle q_{N-1}| e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \dots \int dq_1 |q_1\rangle \langle q_1| e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | q_I \rangle \\ &= \int \prod_i dq_i \langle q_F | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | \dots | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | q_I \rangle \end{aligned}$$

Nous décrivons ici un calcul en 1 dimension d'espace par simplicité. Cependant, le calcul en 3 dimension d'espace ne change rien en complexité simplement en lourdeur des notations. Il est laissé comme exercice au lecteur.

Renommons $|q_I\rangle = |q_0\rangle$ et $|q_F\rangle = |q_N\rangle$, et étudions chaque amplitude élémentaire $\langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | q_j \rangle$. Décomposons classiquement l'Hamiltonien en énergie cinétique et énergie potentielle,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hbar^2 \hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(q) \quad (3.3.9)$$

Dans la limite où Δt est petit (N est grand), l'opérateur $e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}$ devient ,

$$e^{-i(\hat{T}+\hat{V}(q))\Delta t/\hbar} = e^{-i\hat{T}\Delta t/\hbar} e^{-i\hat{V}(q)\Delta t/\hbar} + O(\Delta t^2) \quad (3.3.10)$$

Ainsi pour $N \rightarrow \infty$, l'amplitude élémentaire $\langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | q_j \rangle$ se calcule alors par,

$$\begin{aligned}
\langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | q_j \rangle &= \langle q_{j+1} | e^{-i\hat{T}\Delta t/\hbar} e^{-i\hat{V}(q)\Delta t/\hbar} | q_j \rangle \\
&= \langle q_{j+1} | e^{-i\hat{T}\Delta t/\hbar} | q_j \rangle e^{-i\hat{V}(q_j)\Delta t/\hbar} \\
&= \langle q_{j+1} | e^{-i\hbar \frac{\hat{p}^2}{2m} \Delta t / \hbar} \int dp | p \rangle \langle p | q_j \rangle e^{-i\hat{V}(q_j)\Delta t/\hbar} \\
&= \int dp \langle q_{j+1} | p \rangle \frac{e^{-ipq_j}}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\hbar \Delta t \frac{p^2}{2m}} e^{-i\hat{V}(q_j)\Delta t/\hbar} \\
&= \frac{e^{-i\hat{V}(q_j)/\hbar}}{2\pi} \int dp e^{-i\hbar \Delta t \frac{p^2}{2m} + ip(q_j - q_{j+1})} \\
&= \sqrt{\frac{-im}{2\pi\Delta t\hbar}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(q_j - q_{j+1})^2}{\Delta t}} e^{-i\hat{V}(q_j)/\hbar}
\end{aligned}$$

Puis on peut calculer l'amplitude totale,

$$\langle q_F | q_I(T) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{-im}{2\pi\Delta t\hbar} \right)^{N/2} \prod_{i=0}^{N-1} dq_i e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{\Delta t}} e^{-i\hat{V}(q_i)/\hbar} \quad (3.3.11)$$

Or, en considérant toujours N qui tend vers l'infini, $\Delta t \rightarrow 0$, d'où $\frac{(q_j - q_{j+1})^2}{\Delta t} \rightarrow \frac{m\dot{q}^2}{2} \Delta t$ et $\sum_i \Delta t \rightarrow \int dt$. Nous obtenons finalement

$$\langle q_F | q_I(T) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{-im\hbar}{2\pi\Delta t} \right)^{N/2} \prod_{i=0}^{N-1} dq_i e^{i \int_0^T dt \left[\frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q) \right]} = \int Dq(t) e^{i \int_0^T dt \left[\frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q)/\hbar \right]} \quad (3.3.12)$$

Où l'on a noté,

$$\int Dq(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{-im}{2\pi\Delta t\hbar} \right)^{N/2} \prod_{i=0}^{N-1} dq_i \quad (3.3.13)$$

Il est important à ce stade d'admettre qu'en tant que physicien nous avons cruellement manqué de rigueur et de faire quelques mises en garde. La première est assez simple, nous avons fait tendre N vers l'infini sans jamais se soucier de la convergence des intégrales complexes mises en jeu. De plus, nous n'avons jamais précisé sur quels chemins $q(t)$ nous *intégrons*. A ce stade nous savons seulement que les chemins sont tels que $q(0) = q_I$ et $q(T) = q_F$, ce qui n'est pas une information très restrictive. Les chemins considérés sont-ils continues, dérivables, réguliers ? Ce qui nous amène au troisième aspect problématique, cette intégrale est-elle définie ? En particulier, la quantité $\int Dq(t)$ est-elle réellement une mesure, et sur quel espace ? Nous ne répondons pas ici à ces questions et, à vrai dire, je ne suis même pas sûr que qui que ce soit en ait les réponses, du moins pas dans le cas général*. Nous faisons déjà l'effort d'admettre notre ignorance et ne cachons même pas, pour une fois, nos défauts sous le tapis, ne nous demandons pas non plus de résoudre ces défauts !

Remarquons également que $L(q, \dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q)$ est le Lagrangien et que $\int dt L(q, \dot{q}) = S[q]$ définit l'action sur le chemin q . On peut finalement réécrire l'intégrale de chemin sous la forme,

$$\langle q_F | q_I(T) \rangle = \int Dq(t) e^{\frac{iS[q]}{\hbar}} \quad (3.3.14)$$

*. Pour les fonctions continues, on peut montrer que nous réussissons bien à définir une mesure dite mesure de Wiener.

3.3.2 Formalisme pour les bosons

L'introduction précédente permet de comprendre *intuitivement*, mais vaguement le fonctionnement et la portée de l'intégrale de chemin. Elle constitue une introduction suffisante pour une compréhension *culturelle* du sujet, et permet déjà au lecteur d'entrevoir la puissance de ce formalisme. Cependant, l'introduction précédente est peu précise et générale. Nous donnons dans cette section une description beaucoup plus précise de l'intégrale de chemin. Une étude précise de cette description plus précise de l'intégrale de chemin est nécessaire pour une compréhension de sujets plus avancés dans de nombreux domaines (théorie quantique des champs et physique de la matière condensée). Ainsi, suivre rigoureusement cette section sera extrêmement gratifiant pour n'importe quel physicien en devenir.

Pour rendre les calculs plus lisibles nous travaillons en unité,

$$\hbar = 1 \quad (3.3.15)$$

Nous restaurerons \hbar là où il apparaît en temps voulu.

Commençons par introduire quelques notations. Nous considérons un système décrit par des variables canoniques Q_a dont les moments conjugués sont notés P_a . Ces variables vérifient,

$$[Q_a, P_b]_- = i\delta_{ab} \quad (3.3.16)$$

$$[Q_a, Q_b]_- = [P_a, P_b]_- = 0 \quad (3.3.17)$$

Nous avons ajouté l'indice $-$ pour appuyer sur le fait que ces crochets sont des commutateurs et non pas des anti-commutateurs. Cela signifie simplement que nous étudions des variables bosoniques et non pas fermioniques.

Les Q_a commutent entre eux et nous pouvons alors choisir une base commune de diagonalisation pour eux que l'on note $|q\rangle$. Elle vérifie,

$$Q_a |q\rangle = q_a |q\rangle \quad (3.3.18)$$

où les q_a décrivent le spectre de Q_a (ses valeurs propres). Les Q_a étant également hermitiens cette base est également choisie orthonormale. C'est-à-dire,

$$\langle q'|q\rangle = \prod_a \delta(q'_a - q_a) \quad (3.3.19)$$

La même procédure peut être effectuée pour P_a et nous obtenons une base $|p\rangle$ telle que,

$$P_a |p\rangle = p_a |p\rangle \quad (3.3.20)$$

$$\langle p'|p\rangle = \prod_a \delta(p'_a - p_a) \quad (3.3.21)$$

$$(3.3.22)$$

Nous pouvons également exprimer les q_a sur la base des p_a . Nous trouvons facilement,

$$\langle q|p\rangle = \prod_a \frac{e^{ip_a q_a}}{\sqrt{2\pi}} \quad (3.3.23)$$

Nous nous plaçons comme d'habitude du point de vue d'Heisenberg de la mécanique quantique, les opérateurs Q_a et P_a évoluent alors dans le temps selon,

$$Q_a(t) = \exp(iHt)Q_a \exp(-iHt) \quad (3.3.24)$$

$$P_a(t) = \exp(iHt)P_a \exp(-iHt) \quad (3.3.25)$$

A chaque instant t nous pouvons alors contruire des base orthonormales de vecteurs propres pour Q_a et P_a que l'on note (en empruntant les notations de Weinberg [11]),

$$|q; t\rangle = \exp(iHt) |q\rangle \quad (3.3.26)$$

$$|p; t\rangle = \exp(iHt) |p\rangle \quad (3.3.27)$$

Il est évident que le produit scalaire en reste inchangé,

$$\langle q; t | p; t \rangle = \langle q | p \rangle \quad (3.3.28)$$

Notre but est alors de calculer l'amplitude de trouver une particule dans un état $|q'; t'\rangle$ à un instant t' , sachant qu'elle était dans l'état $|q; t\rangle$ à l'instant t . C'est à dire nous souhaitons calculer la quantité,

$$\mathcal{A} = \langle q'; t' | q; t \rangle \quad (3.3.29)$$

Nous commençons par calculer l'amplitude infinitésimale*,

$$d\mathcal{A} = \langle q'; t + dt | q; t \rangle \quad (3.3.30)$$

où dt est une durée infinitésimalement petite. En utilisant la définition des états propres, il vient,

$$d\mathcal{A} = \langle q'; t | e^{-iHdt} | q; t \rangle \quad (3.3.31)$$

Tel qu'elle H est une fonction fixée de Q et P et non de $Q(t)$ et $P(t)$. Cependant, comme H commute avec lui même, il est évident que,

$$H = H(Q, P) = H(Q(t), P(t)) \quad (3.3.32)$$

De plus, nous utilisons les relations de commutation sur Q et P afin de placer les opérateur Q toujours à gauche des opérateurs P , de sorte que,

$$d\mathcal{A} = \langle q'; t | e^{-iHdt} | q; t \rangle = \langle q'; t | e^{-iH(q'(t), P(t))dt} | q; t \rangle \quad (3.3.33)$$

On insère désormais une résolution de l'identité sous la forme,

$$\mathbf{1} = \int \prod_a dp_a |p; t\rangle \langle p; t| \quad (3.3.34)$$

Il vient alors,

$$\begin{aligned} d\mathcal{A} &= \int \prod_a dp_a \langle q'; t | e^{-iH(q'(t), P(t))dt} (|p; t\rangle \langle p; t|) | q; t \rangle \\ &= \int \prod_a dp_a e^{-iH(q'(t), p(t))dt} \langle q'; t | p; t \rangle \langle p; t | q; t \rangle \\ &= \int \prod_a \frac{dp_a}{2\pi} \exp \left(-iH(q'(t), p(t))dt + i \sum_a (q'_a - q_a) p_a \right) \end{aligned}$$

*. Nous utilisons ici le mot *infinitésimal* au sens l'amplitude obtenu pour une durée infinitésimale, ce qui ne veut pas dire que cette quantité est infinitésimale en elle-même. Ceci n'a pas de sens c'est un nombre complexe!

Imaginons désormais revenir au problème de départ où nous étudions l'évolution sur une durée finie $t' - t$. On sépare cet intervalle en $\tau_0 = t, \tau_1, \dots, \tau_N, \tau_{N+1} = t'$ tels que,

$$d\tau = \tau_{k+1} - \tau_k = \frac{t' - t}{N + 1} \quad (3.3.35)$$

N est bien entendu considéré comme tendant vers l'infini de sorte que ces intervalles de temps soient infinitésimaux et que l'on puisse utiliser le résultat précédent. En effet, il nous suffit désormais d'insérer N résolutions de l'identité sous la forme,

$$\mathbf{1} = \int \prod_a dq_{k,a} |q_k; \tau_k\rangle \langle q_k; \tau_k| \quad (3.3.36)$$

L'amplitude \mathcal{A} devient alors,

$$\begin{aligned} \mathcal{A} = & \int \left(\prod_{k=1}^N \prod_a dq_{k,a} \right) \left(\prod_{k=0}^N \prod_a \frac{dp_{k,a}}{2\pi} \right) \\ & \times \exp \left[i \sum_{k=1}^{N+1} \left(\sum_a (q_{k,a} - q_{k-1,a}) p_{k-1,a} - H(q_k, p_{k-1}) d\tau \right) \right] \end{aligned}$$

où l'on a noté $q_0 = q$ et $q_{N+1} = q'$.

On choisit des fonctions $q_a(t), p_a(t)$ telles que,

$$q_a(\tau_k) = q_{k,a} \text{ et } p_a(\tau_k) = p_{k,a} \quad (3.3.37)$$

Lorsque l'on passe à la limite $N \rightarrow \infty$, soit alors $d\tau \rightarrow 0$, l'expression précédente devient,

$$\begin{aligned} \mathcal{A} = & \int_{q(t)=q, q(t')=q'} \prod_{t,a} dq_a(t) \prod_{t,a} \frac{dp_a(t)}{2\pi} \\ & \times \exp \left[-i \int dt \left(\sum_a \dot{q}_a(t) p_a(t) - H(q(t), p(t)) \right) \right] \end{aligned}$$

où l'on a défini la *mesure* sur les chemins $q(t)$ et $p(t)$ par,

$$\prod_{t,a} dq_a(t) \prod_{t,a} \frac{dp_a(t)}{2\pi} = \lim_{d\tau \rightarrow 0} \prod_{k=1}^N \prod_a dq_{k,a} \prod_{k=0}^N \prod_a \frac{dp_{k,a}}{2\pi} \quad (3.3.38)$$

Remarquons que la méthode précédente permet de calculer bien plus que des amplitudes. En effet nous pouvons calculer les éléments de matrice de n'importe quel produit d'opérateurs $O_1(Q(t_1), P(t_1)) \dots O_i(Q(t_i), P(t_i))$. Contrairement à l'Hamiltonien, nous plaçons tous les opérateur P à gauche des opérateurs Q dans les expressions de O_1, \dots, O_i . Pour,

$$t' > t_1 > \dots > t_i > t \quad (3.3.39)$$

il vient alors,

$$\begin{aligned} \langle q'; t' | O_i(Q(t_i), P(t_i)) \dots O_1(Q(t_1), P(t_1)) | q; t \rangle = & \\ & \int_{q(t)=q, q(t')=q'} \prod_{t,a} dq_a(t) \prod_{t,a} \frac{dp_a(t)}{2\pi} \\ & \times \exp \left[-i \int dt \left(\sum_a \dot{q}_a(t) p_a(t) - H(q(t), p(t)) \right) \right] \\ & \times O_1(q(t_1), p(t_1)) \dots O_i(q(t_i), p(t_i)) \end{aligned}$$

De manière plus générale, pour des opérateurs évalués à des temps, quelconques t_A, t_B, \dots , il vient

$$\begin{aligned} & \int_{q(t)=q, q(t')=q'} \prod_{t,a} dq_a(t) \prod_{t,a} \frac{dp_a(t)}{2\pi} \\ & \times \exp \left[-i \int dt \left(\sum_a \dot{q}_a(t) p_a(t) - H(q(t), p(t)) \right) \right] \\ & \times O_A(q(t_A), p(t_A)) O_B(q(t_B), p(t_B)) \dots \\ & = \langle q'; t' | T \{ O_A(Q(t_A), P(t_A)) O_B(Q(t_B), P(t_B)) \dots \} | q; t \rangle \end{aligned}$$

où T désigne l'opérateur d'ordonnement dans le temps, qui placent les opérateurs évalués aux temps les plus tards à gauche.

Ce sont ces formules qui portent le nom *d'intégrale de chemin*. Appuyons sur le fait que dans ces formules, les variables $q_a(t)$ et $p_a(t)$ n'ont aucun lien entre elles contrairement au formalisme canonique où p désigne la variable conjuguée canoniquement à q . Cependant, il y a bien une manière de faire le lien entre les variables classiques et ces variables d'intégration. Etudions ce que devient cette expression dans la limite classique où $\hbar \rightarrow 0$. Avant de pouvoir faire tendre \hbar vers sa limite classique, il faut déjà que nous le restaurions dans nos équations. Remarquons que formellement, l'intégrale de chemin fait apparaître un terme,

$$\exp(-iET) \quad (3.3.40)$$

où E est une énergie et T un temps. Pour que la quantité dans l'exponentielle reste sans dimension, il faut alors faire apparaître un terme en $[J.s]^{-1}$, soit alors $1/\hbar$. Ainsi, en unité SI, l'exponentielle prend la forme,

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}ET\right) \quad (3.3.41)$$

L'apparition de ce \hbar peut être retracée jusqu'au tout début de notre calcul.

On évalue désormais l'intégrale dans la limite $\hbar \rightarrow 0$ par l'approximation de la phase stationnaire, c'est-à-dire que les uniques contributions à cette intégrale sont celles telles que les variations d'un chemin δq_a et δp_a laissent la phase de l'intégrande stationnaire. Nous pouvons étudier ces deux variations indépendamment. Commençons par l'étude des variations δq_a , pour chaque a . La condition de stationnarité s'écrit,

$$\begin{aligned} 0 &= \int_t^{t'} \left(\delta \dot{q}_a p_a(t) - \frac{\partial H}{\partial q_a(t)} \delta q_a \right) \\ &= \int_t^{t'} \left(-\dot{p}_a(t) - \frac{\partial H}{\partial q_a(t)} \right) \delta q_a \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que nous considérons des variations qui conservent les conditions aux bords sur q_a , afin que le chemin soient bien un chemin intervenant dans l'intégrale de chemin, pour faire disparaître les termes de bord de l'intégration par parties. Cette équation donne alors une des équations d'Hamilton,

$$\dot{p}_a(t) = -\frac{\partial H(q(t), p(t))}{\partial q_a(t)} \quad (3.3.42)$$

Nous obtenons l'autre équation d'Hamilton en considérant les variations δp_a pour a fixé. Elles donnent (cette fois sans avoir besoin d'une intégration par parties donc sans aucune condition sur les comportements aux bords de p_a , ce qui est rassurant car rien dans l'intégrale de chemin ne fixe le comportement des p_a aux bords),

$$\dot{q}_a(t) = + \frac{\partial H(q(t), p(t))}{\partial p_a(t)} \quad (3.3.43)$$

3.3.3 Calculer l'intégrale de chemin : les relations fondamentales

On s'intéresse désormais à une classe particulière d'Hamiltoniens pour lesquels nous pouvons calculer explicitement l'intégrale de chemin. Ces Hamiltoniens sont ceux quadratiques en les variables P_a , c'est à dire ce que l'on peut écrire,

$$H(Q, P) = \frac{1}{2} \sum_{a,b} A_{ab}(Q) P_a P_b + \sum_a B_a(Q) P_a + C(Q) \quad (3.3.44)$$

où A est symétrique définie positive. Le facteur $1/2$ est conventionnel. Son sens apparaîtra lorsque nous évalueront les intégrales de chemin grâce aux intégrales de Gauss.

L'argument dans l'exponentielle devient alors (en oubliant les facteurs multiplicatifs inutiles),

$$\int dt \left(-\frac{1}{2} \sum_{a,b} A_{ab}(q) p_a(t) p_b(t) - \sum_a [B_a(q) - \dot{q}_a(t)] p_a(t) - C(q) \right) \quad (3.3.45)$$

Que l'on peut réécrire pour se rapprocher le plus possible d'une intégrale de Gauss sous la forme,

$$\sum_{a,b} \iint dt dt' -\frac{1}{2} A_{ab} \delta(t-t')(q) p_a(t) p_b(t') - \sum_a \int dt [B_a(q) - \dot{q}_a(t)] p_a(t) - C(q) \quad (3.3.46)$$

La raison pour laquelle nous indiquons que nous rapprochons de la forme d'une intégrale gaussienne n'est peut être pas si évidente. Cela vient du fait que nous intégrons sur une infinité de variables, à savoir les $p_a(t)$ quelque soient a et t . Pour N variables x_i réelles et des matrices M , J , M étant symétrique définie positive, nous savons calculer la quantité,

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^N dx_i \right) \exp \left(-\frac{1}{2} i x^T M x - i J x \right) \quad (3.3.47)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^N dx_i \right) \exp \left(-\frac{1}{2} i \sum_{lk} M_{lk} x_k x_l - i \sum_k J_k x_k \right) \quad (3.3.48)$$

L'intégrande qui apparaît dans l'intégrale de chemin est exactement de cette forme là, sauf que les indices k, l sont remplacés par des indices continus (a, t) et (b, t') . Ainsi comprendre comment résoudre l'intégrale pour les x_i nous permettra de comprendre comment la résoudre pour nos variables $p_a(t)$. Rappelons alors comment nous calculons l'intégrale pour les x_i .

On commence déjà par trouver une variable nous rapprochant fortement de l'intégrale de Gauss centrée. Pour ce faire, on doit trouver E , telle que,

$$\frac{1}{2}(x - E)^T M(x - E) - \frac{1}{2}E^T M E = \frac{1}{2}x^T M x + Jx \quad (3.3.49)$$

On trouve facilement,

$$\frac{1}{2}(E^T M x + x^T M E) = -Jx \quad (3.3.50)$$

et comme

$$(x^T M E)^T = E^T M^T x = E^T M x \quad (3.3.51)$$

Il vient,

$$E = -M^{-1} J^T \quad (3.3.52)$$

On effectue alors le changement de variable dans I

$$y = x - E \quad (3.3.53)$$

Le Jacobien de ce changement de variable est trivialement égal à 1, d'où

$$I = e^{-\frac{i}{2}E^T M E} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^N dy_i e^{-\frac{i}{2}y^T M y} \right) \quad (3.3.54)$$

On peut calculer plus précisément la constante exponentielle,

$$iE^T M E = -iE^T J^T = iJ M^{-1} J^T \quad (3.3.55)$$

Désormais utilisons le fait que M est symétrique pour lui trouver une matrice orthogonale O la diagonalisant. C'est à dire qu'on peut trouver $O \in O(N, \mathbb{R})$ orthogonale telle que,

$$M = O^T \text{diag}(m_1, m_2, \dots, m_N) O \quad (3.3.56)$$

où les m_i sont les valeurs propres de M (strictement positives car M est définie positive). Faisons alors le changement de variable, $z = Oy$ dans I . Le Jacobien de ce changement de variable vaut 1 car O est orthogonale. Il vient alors,

$$\begin{aligned} I &= e^{-\frac{i}{2}E^T M E} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^N dz_i e^{-\frac{i}{2}z^T \text{diag}(m_1, m_2, \dots, m_N) z} \right) \\ &= e^{-\frac{i}{2}E^T M E} \prod_i dz_i \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{2}m_i z_i^2} \right) \\ &= \prod_i \sqrt{\frac{2\pi}{im_i}} e^{-\frac{i}{2}E^T M E} \\ &= \sqrt{\frac{-i2\pi}{\det(M)}} e^{-\frac{i}{2}E^T M E} \end{aligned}$$

Le plus intéressant à remarquer dans cette expression est le terme qui apparaît dans l'exponentielle. Nous montrer désormais qu'il correspond à l'argument de l'exponentielle évalué en son point stationnaire.

Le point stationnaire se trouve en

$$\bar{x} = -M^{-1} J^T \quad (3.3.57)$$

Si l'on évalue l'argument de l'exponentielle en ce point, on obtient,

$$-i\frac{1}{2}J M^{-1} M M^{-1} J^T + J M^{-1} J^T = \frac{1}{2}iJ M^{-1} J^T \quad (3.3.58)$$

C'est le résultat principal à retenir,

Pour une intégration gaussienne d'une fonction quadratique, le résultat s'écrit comme l'exponentielle de l'argument évalué au point critique de celui-ci (à une constante de normalisation près).

Si l'on revient à notre problème physique sur l'intégrale de chemin. Il nous faut donc trouver le point stationnaire de

$$\Theta = \sum_{a,b} \iint dt dt' - \frac{1}{2} A_{ab} \delta(t-t')(q) p_a(t) p_b(t') - \sum_a \int dt [B_a(q) - \dot{q}_a(t)] p_a(t) - C(q) \quad (3.3.59)$$

Cela s'écrit,

$$0 = \frac{\delta}{\delta p_c(\tau)} \Theta = \frac{\delta}{\delta p_c(\tau)} \int dt \dot{q}_a(t) p_a(t) - H(p, q) \quad (3.3.60)$$

Le point stationnaire est alors décrit par les équations,

$$\dot{q}_c(\tau) = \frac{\delta H(p, q)}{\delta p_c(\tau)} \quad (3.3.61)$$

qui est exactement la valeur associée aux moments conjugués dans le formalisme canonique. On peut alors réécrire l'intégrale de chemin sous la forme,

$$\begin{aligned} & \int_{q(t)=q, q(t')=q'} \prod_{t,a} dq_a(t) \prod_{t,a} \frac{dp_a(t)}{2\pi} \times \exp \left[-i \int dt \left(\sum_a \dot{q}_a(t) p_a(t) - H(q(t), p(t)) \right) \right] \dots \\ &= \int_{q(t)=q, q(t')=q'} \prod_{t,a} dq_a(t) \exp \left[-i \int dt L(q, \dot{q}) \right] \dots \\ &= \int_{q(t)=q, q(t')=q'} \prod_{t,a} dq_a(t) \exp [-i S[q]] \dots \end{aligned}$$

3.3.4 Fermions

Les modes quantifiés que nous avons étudié jusqu'ici étaient bosoniques. il s'agit désormais de généraliser la démarche exposée précédemment pour des fermions. Rappelons que les relations vérifiées pour les variables fermioniques sont,

$$\{Q_a, P_b\} = i\delta_{ab} \quad (3.3.62)$$

$$\{Q_a, Q_b\} = \{P_a, P_b\} = 0 \quad (3.3.63)$$

La première étape est alors de trouver des vecteurs sur lesquels agir avec ces opérateurs.

3.4 Effet d'une métrique

References

- [1] Michael ASTWOOD. *Lecture notes of Advanced Quantum Theory by Tobias Osborne*. 2021.
- [2] J S DOWKER. “Quantum mechanics and field theory on multiply connected and on homogeneous spaces”. In : *Journal of Physics A : General Physics* 5.7 (juill. 1972), p. 936. DOI : 10.1088/0305-4470/5/7/004. URL : <https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/5/7/004>.
- [3] David GRIFFITHS. *Introduction to Elementary Particles, Second Edition*. Wiley-VCH, 2010.
- [4] Michael G. G. LAIDLAW et Cécile Morette DEWITT. “Feynman Functional Integrals for Systems of Indistinguishable Particles”. In : *Phys. Rev. D* 3 (6 mars 1971), p. 1375-1378. DOI : 10.1103/PhysRevD.3.1375. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.3.1375>.
- [5] Tom LANCASTER et Stephen J. BLUNDELL. *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*. Oxford University Press, 2021.
- [6] J.M. LEINAAS et J. MYRHEIM. “On the Theory of Identical Particles”. In : (1976).
- [7] Amaury MOUCHET. “Path integrals in a multiply-connected configuration space (50 years after)”. In : (2021). URL : [arXiv:2010.01504](https://arxiv.org/abs/2010.01504).
- [8] Lawrence SCHULMAN. “A Path Integral for Spin”. In : *Phys. Rev.* 176 (5 déc. 1968), p. 1558-1569. DOI : 10.1103/PhysRev.176.1558. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.176.1558>.
- [9] David TONG. *Applications of Quantum Mechanics*. 2017. URL : <https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/aqm/aqm.pdf><https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/aqm/aqm.pdf>.
- [10] Steven WEINBERG. *Lecture on Quantum Mechanics, Cambridge*. Cambridge University Press, 2013. ISBN : 978-1-107-02872-2.
- [11] Steven WEINBERG. *The Quantum Theory of Fields*. T. 1. Cambridge University Press, 1995.
- [12] Anthony ZEE. *Group theory in a nutshell for physicists*. Princeton University Press, 2016.