Foundations of Quantum Mechanics

Tanguy Marsault

August 12, 2024

Contents

Introduction

In this short note, we revisit a more precise definition of quantum mechanics in a broader context. We describe the basic mathematics underlying it as well as the physical-mathematical postulates that govern it. We also emphasize the important concept of symmetry, which is an extremely powerful tool in almost all areas of physics.

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 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 cette 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 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

$$\begin{array}{llll} \langle\phi| : & \mathcal{H} & \longrightarrow & \mathcal{H} \\ & |\psi\rangle & \longmapsto & \langle\phi|\left(|\psi\rangle\right) = \left(|\phi\rangle, |\psi\rangle\right) = \langle\phi|\psi\rangle \end{array} \tag{1}$$

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,

$$|\phi\rangle = \sum_{k\in\mathbb{N}} \frac{\langle\psi_k|\phi\rangle}{\langle\psi_k|\psi_k\rangle} |\psi_k\rangle \tag{2}$$

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 un telle base continue. Pour ce faire nous suivons la discussion de Weinberg [2].

On remplace alors l'indice discret utilisé précédemment $k \in \mathbb{N}$ par un indice continu $x \in \mathbb{R}$†. 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 $[x, x+\Delta x]$‡, 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 exposé 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,

$$\langle\psi_i|\psi_{x'}\rangle = \rho(x)\delta_{xx'} \tag{3}$$

Nous avons alors,

$$|\phi\rangle = \sum_x \frac{\langle\psi_x|\phi\rangle}{\rho(x)} |\psi_x\rangle \tag{4}$$

Faisons désormais tendre $\Delta x \to 0$ 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

$$|\phi\rangle = \int \frac{\langle\psi_x|\phi\rangle}{\rho(x)} |\psi_x\rangle\ \rho(x)\mathrm{d}x \tag{5}$$

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

$$|\phi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \langle\psi_x|\phi\rangle\, |\psi_x\rangle \tag{6}$$

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

$$\langle\psi_x|\psi_{x'}\rangle = \rho(x)\delta_{xx'} = \delta(x-x') \tag{7}$$

---

*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.

§Humour...

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,

$$\int \mathrm{d}x \delta(x - x') = \int \mathrm{d}x \rho(x) \delta_{xx'} = \sum_x \delta_{xx'} = 1 \tag{8}$$

et également,

$$\int \mathrm{d}x \delta(x - x') f(x) = \int \mathrm{d}x \rho(x) \delta_{xx'} f(x) = \sum_x f(x) \delta_{xx'} = f(x') \tag{9}$$

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,

$$|\phi\rangle = \int \mathrm{d}x \phi(x) \, |\psi_x\rangle \tag{10}$$

et la norme de cet état vaut alors,

$$\langle \phi | \phi \rangle = \int \mathrm{d}x |\phi(x)|^2 \tag{11}$$

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 $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

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

$$\begin{array}{rccl} O: & \mathcal{H} & \longrightarrow & \mathcal{H} \\ & |\psi\rangle & \longmapsto & O\left(|\psi\rangle\right) = O\,|\psi\rangle \end{array} \tag{12}$$

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 bijections 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

$$O^\dagger = O \tag{13}$$

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,

$$A_{ij} = (|\psi_i\rangle\,, A\,|\psi_j\rangle) \tag{15}$$

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,

$$A\,|\psi\rangle = \sum_k a_k A\,|\psi_k\rangle = \sum_{kl} a_k A_{lk}\,|\psi_l\rangle \tag{16}$$

Et il est alors naturel d'écrire,

$$A = \sum_{ij} A_{ij}\,|\psi_i\rangle\,\langle\psi_j| \tag{17}$$

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,

$$O = \sum_{ij} O_{ij}\,|\psi_i\rangle\,\langle\psi_j| \tag{18}$$

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

$$O_{ij} = (|\psi_i\rangle\,, O\,|\psi_j\rangle) = (|\psi_i\rangle\,O^\dagger, |\psi_j\rangle) = \langle\psi_i|\,O\,|\psi_j\rangle \tag{19}$$

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 $o_i \in \mathrm{Sp}\,O \subset \mathbb{R}$, 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.

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

$$(|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi| \tag{14}$$

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

$$g_i = \dim \ker(O - o_i \mathrm{id}_{\mathcal{H}}) \tag{20}$$

On construit alors une base orthogonale pour O sous la forme

$$\mathcal{B} = \left\{ \left| \phi_i^l \right\rangle \right\}_{i,\, 1 \leq l \leq g_i} \tag{21}$$

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

$$\left\langle \phi_i^l \middle| \phi_j^k \right\rangle \propto \delta_{ij}\delta_{lk} \tag{22}$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_{i,l} a_i^l \left| \phi_i^l \right\rangle \tag{23}$$

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'apparait 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,

$$P(o_i) = \sum_{l=1}^{g_i} \left| \left\langle \phi_i^l \middle| \psi \right\rangle \right|^2 \tag{24}$$

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

$$\sum_i P(o_i) = 1 \tag{25}$$

Ce qui s'écrit,

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

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

$$\sum_{il} \frac{|\phi_i^l\rangle \langle\phi_i^l|}{\left|\langle\phi_i^l|\phi_i^l\rangle\right|^2} = \mathrm{id}_{\mathcal{H}} \tag{26}$$

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 associé est alors continue et définie comme décrit dans la section précédente par

$$\left\langle \phi_x^v \middle| \phi_y^w \right\rangle \propto \delta(x-y)\delta(v-w) \tag{27}$$

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.

1.3 Etats physiques

Si tous les vecteurs états de l'espace de Hilbert représentent un état physique, ces états physique ne sont pas forcément différent. 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,

$$P_\psi(o_i) = P_\phi(o_i) \tag{28}$$

Ce qui montre plus généralement que,

$$P_\psi = P_\phi \tag{29}$$

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

$$\mathcal{R} = \left\{ e^{i\theta}|\psi\rangle\,,\ \ \theta \in \mathbb{R},\ \ |\psi\rangle \in \mathcal{H} \text{ t.q. } \langle\psi|\psi\rangle = 1 \right\} \tag{30}$$

*Nous définissons ce que sont les rayons plus loin.

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,

$$|\psi\rangle \sim |\phi\rangle \iff \exists\lambda \in \mathbb{C} \;\; |\phi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle \tag{31}$$

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.

1.4 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,

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\psi\rangle = H\,|\psi\rangle \tag{32}$$

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 $o_i \in \mathrm{Sp}\,O$. 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 $|\psi'\rangle \in \ker(O - o_i\mathrm{id}_{\mathcal{H}})$. 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,

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{P(o_i)}}\sum_{l=1}^{g_i}\left\langle \phi_i^l \middle| \psi \right\rangle \left|\phi_i^l\right\rangle \tag{33}$$

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.

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,

$$\rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i| \tag{34}$$

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

$$\sum_i p_i = 1 \tag{35}$$

2.1 Propriétés basiques

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

$$\rho^\dagger = \rho \tag{36}$$

et qu'elles sont de trace égale à 1,

$$\operatorname{tr}\rho = 1 \tag{37}$$

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,

$$\rho = \sum_{k=0}^{n-1} p_k |\phi_k\rangle \langle\phi_k| \tag{38}$$

vérifie,

$$\langle\phi_n| \rho |\phi_n\rangle = 0 \tag{39}$$

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

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

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,

$$\rho = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i| \tag{40}$$

où les λ_i sont les valeurs propres (qui sont réelles) de ρ. Comme $\operatorname{tr}\rho = 1$, 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,

$$\rho = \sum_i p'_i |\phi'_i\rangle \langle\phi'_i| \tag{41}$$

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

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* $\left\{\left|\phi_i^l\right\rangle\right\}_{i,\,1\leq l\leq g_i}$. Nous pouvons alors écrire O sous la forme,

$$O = \sum_i o_i \sum_{l=1}^{g_i} \left|\phi_i^l\right\rangle \left\langle\phi_i^l\right| \tag{42}$$

Introduisons la notation,

$$P_i = \sum_{l=1}^{g_i} \left|\phi_i^l\right\rangle \left\langle\phi_i^l\right| \tag{43}$$

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

$$P_iP_j = 0 \ \ \forall i \neq j \tag{44}$$

Nous pouvons alors écrire

$$O = \sum_i o_i P_i \tag{45}$$

Et la règle de Born nous indique que,

$$P_\psi(o_i) = \langle\psi| P_i |\psi\rangle \tag{46}$$

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

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

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

$$|\psi'\rangle = \frac{P_i |\psi\rangle}{\sqrt{P_\psi(o_i)}} \tag{47}$$

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

$$\rho = \sum_j p_j |\varphi_j\rangle \langle\varphi_j| \tag{48}$$

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,

$$P_\rho(o_i) = \mathrm{tr}(\rho P_i) \tag{49}$$

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

$$\rho' = \frac{P_i \rho P_i^\dagger}{\sqrt{P\rho(o_i)}} = \frac{P_i \rho P_i}{\sqrt{P\rho(o_i)}} \tag{50}$$

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 [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 compliqués 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.

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

$$\begin{array}{rccc} S: & \mathbb{P}\mathcal{H} & \longrightarrow & \mathbb{P}\mathcal{H} \\ & \mathcal{R} & \longmapsto & S\mathcal{R} \end{array} \tag{51}$$

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

$$P\left(\mathcal{R}_1 \to \mathcal{R}_2\right) = P\left(S(\mathcal{R}_1) \to S(\mathcal{R}_2)\right) \tag{52}$$

(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

$$\begin{array}{rcc} U(S): \mathcal{H} & \longrightarrow & \mathcal{H} \\ |\psi\rangle & \longmapsto & U(S)\,|\psi\rangle \end{array} \tag{53}$$

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

$$\begin{array}{rl} \langle U(S)\psi | U(S)\phi\rangle & = \langle\psi|\phi\rangle \\ U(S)\left(\alpha\,|\psi\rangle + \beta\,|\phi\rangle\right) & = \alpha U(S)\,|\psi\rangle + \beta U(S)\,|\phi\rangle \end{array} \tag{54}$$

ou

$$\begin{array}{rl} \langle U(S)\psi | U(S)\phi\rangle & = \langle\psi|\phi\rangle^* \\ U(S)\left(\alpha\,|\psi\rangle + \beta\,|\phi\rangle\right) & = \alpha^* U(S)\,|\psi\rangle + \beta^* U(S)\,|\phi\rangle \end{array} \tag{55}$$

où la notation * désigne le complexe conjugué.

Proof. Pour montrer ce résultat nous suivons la preuve de Weinberg [3]. 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,

$$\mathcal{R}_k \xrightarrow{S} S\mathcal{R}_k \tag{56}$$

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

$$\begin{array}{rcl} P(\mathcal{R}_k \to \mathcal{R}_l) = P(S\mathcal{R}_k \to S\mathcal{R}_l) & \Longleftrightarrow & |\langle\psi_k|\psi_l\rangle|^2 = \left|\left\langle\psi'_k|\psi'_l\right\rangle\right|^2 \\ & \Longleftrightarrow & \left|\left\langle\psi'_k|\psi'_l\right\rangle\right|^2 = \delta_{kl} \\ & \Longleftrightarrow & \left\langle\psi'_k|\psi'_l\right\rangle = \delta_{kl} \end{array}$$

où nous avons utilisé le fait que $\left\langle\psi'_k|\psi'_k\right\rangle = 1 \geq 0$ 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 $\left|\psi'_k\right\rangle$. 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,

$$0 = \left|\left\langle\psi'_k|\phi\right\rangle\right|^2 = |\langle\psi_k|\varphi\rangle|^2 \tag{57}$$

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

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

$$|\phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_k\rangle + |\psi_1\rangle] \in \mathcal{T}_k \tag{58}$$

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 $|\psi'_k\rangle$,

$$|\phi'_k\rangle = \sum_k a_{kl} |\psi'_l\rangle \tag{59}$$

Par conservation de la probabilité il vient,

$$\frac{1}{2}[\delta_{lk} + \delta_{1l}] = |\langle\phi_k|\psi_l\rangle|^2 = |\langle\phi'_k|\psi'_l\rangle|^2 = a_{kl}^2 \tag{60}$$

Soit alors,

$$|a_{kk}| = |a_{k1}| = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ et } a_{kl} = 0,\ \ l \notin \{k, 1\} \tag{61}$$

Supposons alors par exemple, $a_{kk} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$. Nous pouvons redéfinir simplement $|\psi'_k\rangle \to e^{i\theta}|\psi'_k\rangle \in S\mathcal{R}_k$. 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,

$$U\frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_k\rangle + |\psi_1\rangle] = U|\phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[U|\psi_k\rangle + U|\psi_1\rangle] \tag{62}$$

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*,

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle \tag{63}$$

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

$$|\psi'\rangle = \sum_k c'_k U|\psi_k\rangle \tag{64}$$

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

$$|\langle\psi_k|\psi\rangle|^2 = |\langle U\psi_k|\psi'\rangle|^2 \tag{65}$$

Ce qui ce traduit sur les coefficients par,

$$|c_k|^2 = |c'_k|^2 \tag{66}$$

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

$$|c_k + c_1|^2 = |c'_k + c'_1|^2 \tag{67}$$

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

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

$$\begin{aligned}|c_k+c_1|^2=|c'_k+c'_1|^2 &\iff |c_k|^2+c_1c_k^*+c_kc_1^*+|c_1|^2=|c'_k|^2+c'_1c_k^{'*}+c'_kc_1^{'*}+|c'_1|^2\\ &\iff c_1c_k^*+c_kc_1^*=c'_1c_k^{'*}+c'_kc_1^{'*}\\ &\iff \mathrm{Re}(c_kc_1^*)=\mathrm{Re}(c'_kc_1^{'*})\end{aligned}$$

De plus la première relation nous indique,

$$\begin{aligned}|c_k|^2|c_1|^2=|c'_k|^2|c'_1|^2 &\iff |c_kc_1^*|^2=\left|c'_kc_1^{'*}\right|^2\\ &\iff \mathrm{Re}(c_kc_1^*)^2+\mathrm{Im}(c_kc_1^*)^2=\mathrm{Re}(c'_kc_1^{'*})^2+\mathrm{Im}(c'_kc_1^{'*})^2\\ &\iff \mathrm{Im}(c_kc_1^*)=\pm\,\mathrm{Im}(c'_kc_1^{'*})\end{aligned}$$

Puis il vient alors,

$$c_kc_1^*=c'_kc_1^{'*}\ \text{ ou }\ c_kc_1^*=(c'_kc_1^{'*})^* \tag{68}$$

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 vérifié par tous les coefficient 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

$$c_kc_1^*=c'_kc_1^{'*}\ \text{ et }\ c_lc_1^*=(c'_lc_1^{'*})^* \tag{69}$$

Soit l'état défini par

$$|\phi\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[|\psi_1\rangle+|\psi_k\rangle+|\psi_l\rangle\right] \tag{70}$$

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

$$(c'_ic_1^{'*})^*=c_ic_1^*=(c_ic_1^*)^*=c'_ic_1^{'*} \tag{71}$$

impliquant alors que $c'_ic_1^{'*}\in\mathbb{R}$. Ecrivons alors,

$$|\phi'\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\alpha U\,|\psi_1\rangle+\beta U\,|\psi_k\rangle+\gamma U\,|\psi_l\rangle\right] \tag{72}$$

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

$$|\phi'\rangle=\frac{\alpha}{\sqrt{3}}\left[U\,|\psi_1\rangle+U\,|\psi_k\rangle+U\,|\psi_l\rangle\right] \tag{73}$$

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

$$\langle\phi|\psi\rangle=\langle\phi'|\psi'\rangle \tag{74}$$

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

$$|c_1+c_k+c_l|^2=|c'_1+c'_k+c'_l|^2 \tag{75}$$

soit alors,

$$|c_1 + c_k + c_l|^2 = \left| c_1' + c_k \left(\frac{c_1}{c_1'} \right)^* + c_l^* \frac{c_1}{c_1'^*} \right|^2 \tag{76}$$

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

$$\left| 1 + \frac{c_k}{c_1} + \frac{c_l}{c_1} \right|^2 = \left| 1 + \frac{c_k}{c_1} + \frac{c_l^*}{c_1^*} \right|^2 \tag{77}$$

qui se réécrit facilement sous la forme

$$\mathrm{Re}\left(\frac{c_k}{c_1} \frac{c_l^*}{c_1^*} \right) = \mathrm{Re}\left(\frac{c_k}{c_1} \frac{c_l}{c_1} \right) \tag{78}$$

que l'on peut écrire,

$$\mathrm{Im}\left(\frac{c_k}{c_1} \right) \mathrm{Im}\left(\frac{c_l}{c_1} \right) = 0 \tag{79}$$

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

$$c_k' c_1'^* = c_k c_1^* = (c_k c_1^*)^* \tag{80}$$

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

Il vient alors,

$$c_k c_1^* = c_k' c_1'^*, \ \forall \ k \ \text{ ou } \ c_k c_1^* = (c_k' c_1'^*)^*, \ \forall \ k \tag{81}$$

On définit $U\left|\psi\right\rangle$ en choisissant sa phase, dans le premier cas on adapte la phase de $\left|\psi'\right\rangle$ 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,

$$U(\sum_k c_k \left|\psi_k\right\rangle) = \sum_k c_k U \left|\psi_k\right\rangle \ \text{ ou } \ U(\sum_k c_k \left|\psi_k\right\rangle) = \sum_k c_k^* U \left|\psi_k\right\rangle \tag{82}$$

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,

$$U(\sum_k a_k \left|\psi_k\right\rangle) = \sum_k a_k U \left|\psi_k\right\rangle \ \text{ ou } \ U(\sum_k b_k \left|\psi_k\right\rangle) = \sum_k b_k^* U \left|\psi_k\right\rangle \tag{83}$$

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

$$\left| \sum_k a_k b_k^* \right|^2 = \left| \sum_k a_k b_k \right|^2 \tag{84}$$

que l'on réécrit sous la forme,

$$\sum_{ij} \mathrm{Im}(a_i^* a_j)\, \mathrm{Im}(b_i^* b_j) = 0 \tag{85}$$

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

$$\sum_{ij} \mathrm{Im}(a_i^* a_j)\, \mathrm{Im}(c_i^* c_j) \neq 0$$
$$\sum_{ij} \mathrm{Im}(b_i^* b_j)\, \mathrm{Im}(c_i^* c_j) \neq 0$$

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. □

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 $U(S_2)U(S_1)|\psi\rangle \in S_2S_1\mathcal{R}$. Cet état est alors à comparer à l'état que nous aurions obtenu si nous avions effectué directement la transformation de symétrie S_2S_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 $U(S_2S_1)|\psi\rangle \in S_2S_1\mathcal{R}$. Ces deux états appartenant au même rayon $S_2S_1\mathcal{R}$, ils ne peuvent différer que d'une phase,

$$U(S_2)U(S_1)|\psi\rangle = e^{i\theta} U(S_2S_1)|\psi\rangle \tag{86}$$

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 $SU(2)$.

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

†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.

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,

$$g(\theta) \cdot g(\theta') = g(f(\theta, \theta')) \tag{87}$$

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

$$U(\theta)U(\theta') = U(f(\theta, \theta')) \tag{88}$$

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

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

$$x^i \longrightarrow x^i + a^i \tag{89}$$

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

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

L'ensemble,

$$\mathbf{T} = \{T_{\vec{a}} \mid \ \vec{a} \in \mathbb{R}^3\} \tag{90}$$

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

$$T_{\vec{a}} \circ T_{\vec{b}} = T_{\vec{a}+\vec{b}} \tag{91}$$

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

$$|\psi\rangle \xrightarrow{T_{\vec{a}}} U(T_{\vec{a}})\,|\psi\rangle \tag{92}$$

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 $\mathbf{T}$,

$$U(\vec{a})U(\vec{b}) = U(\vec{a} + \vec{b}) \tag{93}$$

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

$$U(\vec{0}) = \mathrm{id}_{\mathcal{H}} \tag{94}$$

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 $\mathrm{id}_{\mathcal{H}}$ 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,

$$U(\vec{\varepsilon}) = 1 - i\varepsilon^i T_i + \dots \tag{95}$$

où T^i forment une base de la représentation de l'algèbre de Lie de $\mathbf{T}$.(Remarquons aussi que nous avons remplacé $\mathrm{id}_{\mathcal{H}}$ 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,

$$\left[T_i, T_j\right] = 0, \ \ \forall\, i,j \in \{1,2,3\} \tag{96}$$

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

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

$$U(\vec{a}) = \lim_{n\to\infty} U\left(\frac{\vec{a}}{N}\right)^N = e^{-i\vec{a}\cdot\vec{T}} \tag{97}$$

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 $\widehat{x}_n$ associé à cette particule doit se transformer sous la forme,

$$U(\vec{a})^{-1}\widehat{\mathbf{X}}_n U(\vec{a}) = \widehat{\mathbf{X}}_n + \vec{a}\,\mathrm{id}_{\mathcal{H}} \tag{98}$$

Ce qui s'écrit alors pour une transformation infinitésimale,

$$i\varepsilon_j T^j \widehat{\mathbf{X}}_n - i\varepsilon_i \widehat{\mathbf{X}} T^i = \vec{\varepsilon} \tag{99}$$

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

$$\left[\widehat{X}^i_n, T^j\right] = i\delta_{ij} \tag{100}$$

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

$$\widehat{\mathbf{P}} = \sum_n \widehat{\mathbf{P}}_n \tag{101}$$

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

$$\left[\widehat{X}^i_n, \widehat{P}^j_m\right] = i\hbar\delta_{mn}\delta_{ij} \tag{102}$$

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

$$|\vec{x}\rangle = U(\vec{x})\left|\vec{0}\right\rangle \tag{103}$$

On peut calculer leur position,

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

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 $\psi(\vec{x})$,

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3\vec{x}\ \psi(\vec{x})\,|\vec{x}\rangle \tag{104}$$

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

$$\widehat{\mathbf{P}}\,|\vec{p}\rangle = \vec{p}\,|\vec{p}\rangle \tag{105}$$

Il vient alors les relations connues de la mécanique quantique,

$$\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle = \langle\vec{p}|\, e^{-i\widehat{\mathbf{P}}\cdot\vec{x}/\hbar}\,|\vec{x}\rangle = e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}\left\langle\vec{p}\middle|\vec{0}\right\rangle \tag{106}$$

que l'on décide de normaliser sous la forme,

$$\left\langle\vec{p}\middle|\vec{0}\right\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \tag{107}$$

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

$$\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \langle\vec{p}|\vec{x}\rangle^* = (2\pi\hbar)^{-3/2}e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \tag{108}$$

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

$$\langle\vec{y}|\vec{x}\rangle = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y}) \quad\Longrightarrow\quad \langle\vec{q}|\vec{p}\rangle = \delta^{(3)}(\vec{q}-\vec{p}) \tag{109}$$

La démonstration de cette implication est facile.

3.3 Rotations et moment angulaire

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

$$x^i \longrightarrow R_{ij}x^j \tag{110}$$

*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.

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

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,

$$|\psi\rangle \xrightarrow{R} U(R)\,|\psi\rangle \tag{111}$$

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,

$$U(R_1R_2) = U(R_1)U(R_2) \tag{112}$$

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

$$\begin{align} U(R) &= D^{(j_1)}(R) \oplus D^{(j_2)}(R) \oplus \ldots \oplus D^{(j_k)}(R) \tag{113} \\ &= \begin{pmatrix} D^{(j_1)}(R) & & & \\ & D^{(j_2)}(R) & & \\ & & \ddots & \\ & & & D^{(j_k)}(R) \end{pmatrix} \tag{114} \end{align}$$

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

$$U(R_1)U(R_2) = e^{i\phi(R_1,R_2)}U(R_1R_2) \tag{115}$$

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 apparait 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,

$$U(R(\vec{\phi})) = 1 + \frac{i}{2} r_{ij} L_{ij} + \ldots \tag{116}$$

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

$$U(R)^{-1}\widehat{\mathbf{P}}U(R) = R\widehat{\mathbf{P}} \tag{117}$$

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

†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.

soit alors, pour la transformation infinitésimale précédente,

$$(1 - \frac{i}{2} r_{ij} L_{ij} + \ldots)\widehat{\mathbf{P}}(1 + \frac{i}{2} r_{kl} L_{kl} + \ldots) = (1 + r)\widehat{\mathbf{P}} \tag{118}$$

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

$$-iL_{ki}\widehat{P}^k + iL_{ki}\widehat{P}^k = \widehat{P}^i \tag{119}$$

ou encore,

$$\left[L_{ki}, \widehat{P}^k\right] = i\widehat{P}^i \tag{120}$$

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

$$L_i = \varepsilon^{ijk} L_{jk} \tag{121}$$

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

$$L_{jk} = \varepsilon^{ijk} L_i \tag{122}$$

Les relations de commutation deviennent,

$$\varepsilon^{jki}\left[L_j, \widehat{P}^k\right] = i\widehat{P}^i \tag{123}$$

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

$$\left[L_i, \widehat{P}^j\right] = i\varepsilon^{ijk}\widehat{P}^k \tag{124}$$

où nous sommons 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,

$$\widehat{J}_i = L_i \tag{125}$$

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,

$$U(R(\vec{\phi})) = 1 + i\phi_i J_i + \ldots \tag{126}$$

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

$$U(R(\vec{\theta})) = e^{i\vec{\theta}\cdot\vec{J}} \tag{127}$$

où $\vec{J} = (J_1, J_2, J_3)$ et $J_i \in \mathfrak{so}(3)$ (plus précisément dans la réprésentation 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,

$$\left[J_i, J_j\right] = i\varepsilon^{ijk} J_k \tag{128}$$

*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.

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

$$S : t \mapsto t + \tau \tag{129}$$

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

$$|\psi(t+\tau)\rangle = U(\tau)\,|\psi(t)\rangle \tag{130}$$

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

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\psi(t)\rangle = H\,|\psi(t)\rangle \tag{131}$$

nous indiquant alors que

$$U(\tau) = e^{-iH\tau/\hbar} \tag{132}$$

H étant hermitien, U est bien unitaire.†

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

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle \tag{133}$$

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

$$O(t) = U(t)^{\dagger} O U(t) \tag{134}$$

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,

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}O_H(t) = [O_H(t), H] \tag{135}$$

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.

Références

[1] David Tong. *Applications of Quantum Mechanics*. 2017. URL: `https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/aqm/aqm.pdfhttps://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/aqm/aqm.pdf`.

[2] Steven Weinberg. *Lecture on Quantum Mechanics, Cambridge*. Cambridge University Press, 2013. ISBN: 978-1-107-02872-2.

[3] Steven Weinberg. *The Quantum Theory of Fields*. Vol. 1. Cambridge University Press, 1995.

*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.