

# Chapitre 3

## Cours #3 : symétries continues et discrètes

### 3.1 Symétrie en mécanique quantique

Les principes très fondamentaux de symétrie fournissent toutes les observables que l'on a pu découvrir jusque là : énergie, quantité de mouvement, moment cinétique mais aussi les charges (électromagnétique, faible, forte), le spin, etc.

Une symétrie par une certaine transformation (translation, rotation, etc) est l'assurance que par cette transformation les lois de la nature ne changent pas. Ainsi, les lois de la nature ne doivent pas changer suivant que l'on réalise une expérience dans un laboratoire à Paris ou qu'on la réalise dans un laboratoire à New-York (invariance par translation dans l'espace). De même, ces lois ne doivent pas changer à Paris si l'on décide d'orienter la paillasse, qui été initialement dirigée vers le nord, vers l'est (invariance par rotation). Elles ne doivent pas non plus changer si, au lieu de faire les expériences aujourd'hui, on décide de les réaliser demain ou dans un million d'années (invariance par translation dans le temps)

#### 3.1.1 Une symétrie est une transformation unitaire

En mécanique quantique, comme en mécanique classique, on mesure des quantités scalaires réelles, c'est à dire, des nombres réels qui sont indiqués par un appareil de mesure à l'aide d'une aiguille ou d'un affichage numérique. Pour déterminer le vecteur vitesse d'un véhicule, par exemple, on va mesurer deux quantités scalaires : la norme du vecteur vitesse (donnée par

l'indicateur de vitesse du tableau de bord) et la direction du véhicule (à l'aide d'une boussole qui donne un angle par rapport à une direction de référence donnée par le nord magnétique). A partir de ces deux scalaires, on peut reconstituer le vecteur vitesse dans le système de coordonnées que l'on souhaite. Dans tous les cas, on ne mesure jamais directement un vecteur mais on mesure un ensemble de scalaires.

En mécanique quantique, les scalaires que l'on peut mesurer sont des probabilités (il faut répéter un grand nombre de fois une expérience pour que la mesure devienne suffisamment précise). La probabilité, avant transformation, partant d'un état  $|\Psi\rangle$ , pour aboutir à l'état  $|\Phi\rangle$  est donnée par  $|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2$ . Il faut impérativement qu'après la transformation de symétrie, engendrée mathématiquement par une matrice  $U$  qui agit sur l'espace de Hilbert selon

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= U |\Psi\rangle, \\ |\Phi'\rangle &= U |\Phi\rangle, \end{aligned}$$

la probabilité de transition reste inchangée. Le résultat expérimental ne doit pas être modifié par le changement de point de vue, par la symétrie. On doit donc, dans tous les cas, avoir

$$|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2 = |\langle\Psi'|\Phi'\rangle|^2. \quad (3.1)$$

Or,

$$|\langle\Psi'|\Phi'\rangle|^2 = |\langle\Psi|U^\dagger U|\Phi\rangle|^2, \quad (3.2)$$

ce qui signifie que la matrice associée à la transformation doit vérifier

$$U^\dagger U = e^{i\alpha} \mathbb{I},$$

où  $\alpha = 0$  car les éléments diagonaux de  $U^\dagger U$  (quelque soit  $U$ ) sont identiquement réels et positifs. On a donc au final

$$U^\dagger U = \mathbb{I}, \quad (3.3)$$

ce qui veut aussi dire que  $U^\dagger = U^{-1}$ .

En langage mathématique, cela signifie qu'une transformation de symétrie en mécanique quantique est opérée par une matrice unitaire (les matrices, ou opérateurs, qui vérifient l'eq.(3.3)). L'évolution de  $|\Psi(t=0)\rangle \rightarrow |\Psi(t)\rangle$

par l'équation de Schrödinger (avant mesure) est une transformation unitaire. La mesure, en revanche, n'est pas une transformation unitaire ; c'est une projection.

On distingue deux types de transformations. Les transformations continues (rotation, translation, etc) et les transformations discrètes (symétrie par rapport à un plan, un point, etc).

### 3.1.2 Les générateur d'une symétrie continue

Une transformation de symétrie continue ( $U$ ) doit être connectée continuellement à l'identité<sup>1</sup>. Ainsi, pour une transformation infinitésimale par cette symétrie, il existe des matrices  $G_\alpha$  telles que

$$U = \mathbb{I} + i \varepsilon_\alpha G_\alpha, \quad (3.4)$$

(développement à l'ordre 1 en  $\varepsilon$ ) où les  $\varepsilon_\alpha$  sont les nombres paramétrisant la transformation (distance pour une translation, angle pour une rotation, etc) et les  $G_\alpha$  sont des matrices appelées les générateurs de la symétrie. Ainsi,

$$U^\dagger U = (\mathbb{I} - i \varepsilon_\alpha G_\alpha^\dagger)(\mathbb{I} + i \varepsilon_\alpha G_\alpha) = \mathbb{I} + \varepsilon_\alpha (G_\alpha - G_\alpha^\dagger) + O(\varepsilon^2).$$

Pour que (3.3) soit vérifiée, il faut donc que

$$G_\alpha = G_\alpha^\dagger \quad (3.5)$$

ce qui veut simplement dire que les générateurs d'une symétrie doivent être hermitiens. On voit que les opérateurs hermitiens apparaissent naturellement en mécanique quantique pour des raisons de symétrie. Tous les opérateurs représentant une observable en mécanique quantique sont les générateurs d'une symétrie.

Pour obtenir l'expression de  $U(g)$  pour une transformation non-infinitésimale  $g_\alpha$ , on découpe  $g_\alpha$  en une infinité de morceaux  $\varepsilon_\alpha = g_\alpha/N$ . La transformation suivant  $g_\alpha$  va donc être une succession de  $N$  transformations infinitésimales  $U(\varepsilon)$ , c'est à dire

$$U(g) = U(\varepsilon)^N = U(g/N)^N = \left( \mathbb{I} + i \frac{g_\alpha}{N} G_\alpha \right)^N,$$

---

1. L'identité est la transformation correspondant à l'absence de transformation.

qui tend vers

$$U(g) = e^{i g_\alpha G_\alpha} \quad (3.6)$$

si les  $G_\alpha$  commutent entre eux et qu'ils ne dépendent pas de  $g$ .

### 3.1.3 Effet d'une symétrie sur la moyenne d'une observable

On sait que la valeur moyenne d'une observable  $A$  dans un état  $|\Psi\rangle$  est donnée par  $\langle\Psi|A|\Psi\rangle$ . Lors d'une transformation de symétrie,  $g$ , où l'on passe de  $|\Psi\rangle$  à  $|\Psi'\rangle = U(g)|\Psi\rangle$ , cette valeur moyenne se transforme en

$$\langle\Psi'|A|\Psi'\rangle = \langle\Psi|U(g)^\dagger A U(g)|\Psi\rangle.$$

Ainsi, on verra en pratique que pour déterminer explicitement  $U$  pour une symétrie donnée, il faut évaluer l'effet du transport de  $A$  par la transformation  $A \mapsto U(g)^\dagger A U(g)$ , au résultat de la transformation,  $\text{Sym}[g, A]$ , qui dépend de la symétrie (voir les §3.2, §3.3 et §3.4 pour quelques exemples). Ainsi, on étudiera les conséquences de l'égalité

$$U(g)^\dagger A U(g) = \text{Sym}[g, A]. \quad (3.7)$$

En remplaçant  $U(g)$  par son expression (3.4), on trouve

$$\langle A \rangle' = \langle\Psi'|A|\Psi'\rangle = \langle(\mathbb{I} - i\varepsilon_\alpha G_\alpha) A (\mathbb{I} + i\varepsilon_\alpha G_\alpha)\rangle$$

qui, en se restreignant à l'ordre 1 en  $\varepsilon$ , donne la variation de la moyenne sous l'effet de la symétrie

$$\langle A \rangle' = \langle A \rangle - i\varepsilon_\alpha \langle [G_\alpha, A] \rangle. \quad (3.8)$$

On voit que l'effet d'une symétrie sur la valeur moyenne d'une observable est encodée dans la valeur du commutateur  $[G, A]$  du générateur  $G$  de la symétrie avec l'observable  $A$ .

On va utiliser cette relation (3.8) pour déterminer les générateurs des trois symétries fondamentales et certaines de leurs relations dans ce qui suit.

## 3.2 Symétrie par translation dans l'espace : quantité de mouvement

L'opérateur unitaire de translation dans l'espace,  $U(\mathbf{a})$ , dépend du vecteur de translation  $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$  qui correspond à une translation quelconque dans  $\mathbb{R}^3$ .

Soit  $\mathbf{X}$ , l'observable position. Sous l'effet d'une translation de  $\mathbf{a}$  dans l'espace, le résultat de la symétrie sur  $\mathbf{X}$  est évidemment

$$\text{Sym}[\mathbf{a}, \mathbf{X}] = \mathbf{X} + \mathbf{a}.$$

Ainsi, pour trouver  $U(\mathbf{a})$  on utilise la relation (3.7)

$$U(\mathbf{a})^\dagger \mathbf{X} U(\mathbf{a}) = \mathbf{X} + \mathbf{a}. \quad (3.9)$$

On va chercher les générateurs de  $U$  en posant (3.4) avec  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{a}$  et  $\mathbf{G} = -\mathbf{P}/\hbar$  qui n'est qu'un changement de notation pour se ramener aux conventions habituelles. Ainsi,

$$X_\alpha + \frac{i}{\hbar} a_\beta [P_\beta, X_\alpha] = X_\alpha + a_\alpha,$$

qui doit être valable  $\forall \mathbf{a}$  ce qui n'est possible que si

$$[P_\beta, X_\alpha] = -i \hbar \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.10)$$

qui n'est autre que la relation de commutation entre l'opérateur position et l'opérateur quantité de mouvement (responsable de la relation d'incertitude entre ces deux grandeurs en mécanique quantique).

On vient de montrer que l'observable position ne commute pas avec le générateur des translations. Cette dernière relation permet d'affirmer que les opérateurs de position,  $\mathbf{X}$ , et quantité de mouvement,  $\mathbf{P}$ , ne peuvent se représenter que dans un espace de dimension infinie. En effet, dans la cas contraire (où la représentation serait dans un espace fini de dimension  $n > 0$  par exemple), la trace de l'égalité (3.10) donnerait zéro à gauche (trace nulle d'un commutateur en dimension finie) et  $-i \hbar n \neq 0$  à droite, ce qui est absurde.

Puisque la translation par un vecteur  $\mathbf{a}$  et ensuite par un vecteur  $\mathbf{b}$  est équivalente à la translation par un vecteur  $\mathbf{b}$  et ensuite par un vecteur  $\mathbf{a}$  (dans un espace non courbe), on a

$$U(\mathbf{a})U(\mathbf{b}) = U(\mathbf{b})U(\mathbf{a}),$$

et donc

$$[P_\beta, P_\alpha] = 0, \quad (3.11)$$

que l'on peut aussi retrouver en disant que la direction et l'amplitude de  $\mathbf{P}$  ne sont pas affectées par une translation ce qui se traduit par

$$\text{Sym}[\mathbf{a}, \mathbf{P}] = \mathbf{P},$$

et donc

$$U(\mathbf{a})^\dagger \mathbf{P} U(\mathbf{a}) = \mathbf{P}, \quad (3.12)$$

qui implique (3.11) aussi.

Puisque les  $P_\alpha$  commutent entre eux on peut donc affirmer que

$$U(\mathbf{x}) = e^{i \frac{P_\alpha}{\hbar} x_\alpha} \quad (3.13)$$

et que

$$\frac{\partial}{\partial x_i} U(\mathbf{x}) = i \frac{P_i}{\hbar} e^{i \frac{P_\alpha}{\hbar} x_\alpha} = i \frac{P_i}{\hbar} U(\mathbf{x}).$$

De là, on déduit que le générateur des translations est

$$P_i = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad (3.14)$$

où l'on reconnaît l'opérateur quantique de quantité de mouvement.

On peut montrer [à faire en exercice] que la valeur propre d'un état propre de  $P_x$  dans une boîte 1D de taille finie  $L$  varie comme  $1/L$ . Cela signifie que la vitesse d'une particule libre dans une telle boîte finie varie comme  $1/L$  (si l'on modifie la taille de la boîte de façon adiabatique [vitesse des parois très petite devant la vitesse de la particule dans la boîte]). Ce résultat est parfaitement classique. En effet, une particule qui évolue entre deux parois en  $x = L(t)/2$  et  $-L(t)/2$ , initialement avec une vitesse  $v(0)$ , perd à chaque rebond une vitesse correspondant à 2 fois la vitesse du mur, c'est à dire,  $2 \times \dot{L}(t)/2 = \dot{L}(t)$ . Cela se produit tous les  $L(t)/v(t)$  (le temps d'un aller ou d'un retour). Ainsi,  $\frac{dv}{dt} = -\frac{dL/dt}{L/v}$  ce qui signifie que  $v \propto 1/L$ .

### 3.3 Symétrie par translation dans le temps : énergie

L'opérateur unitaire de translation dans le temps,  $U(t)$ , ne dépend que d'un seul paramètre  $t$ .

Soit  $\mathbf{O}(\tau)$ , une observable dépendante du temps. Sous l'effet d'une translation de  $\mathbf{t}$  dans le temps, le résultat de la symétrie sur  $\mathbf{O}$  est

$$\text{Sym}[t, \mathbf{O}(\tau)] = \mathbf{O}(\tau + t).$$

Ainsi, pour trouver  $U(t)$  on utilise, comme précédemment, la relation (3.7)

$$U(t)^\dagger \mathbf{O}(\tau) U(t) = \mathbf{O}(\tau + t). \quad (3.15)$$

On va chercher le générateur de  $U$  en posant (3.4) avec  $\varepsilon = t$  et  $G = -H/\hbar$  qui n'est qu'un changement de notation pour se ramener aux conventions habituelles. Ainsi,

$$\mathbf{O}(\tau) + \frac{i}{\hbar} t [H, \mathbf{O}(\tau)] = \mathbf{O}(\tau) + t \frac{d}{d\tau} \mathbf{O}(\tau),$$

qui doit être valable  $\forall t$  ce qui n'est possible que si

$$\frac{d}{d\tau} \mathbf{O}(\tau) = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{O}(\tau)]. \quad (3.16)$$

On retrouve, comme on le savait déjà, que la variation temporelle d'un opérateur est nulle si cet opérateur commute avec le Hamiltonien  $H$ . En calculant la moyenne de (3.16) on trouve l'équation

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathbf{O}(\tau) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \mathbf{O}(\tau)] \rangle. \quad (3.17)$$

qui permet de retrouver les équations classiques de la mécanique.

En effet, prenons par exemple  $\mathbf{O} = \mathbf{X}$  (l'opérateur position). En supposant, sans le démontrer, mais comme on le sait très bien dans le cas d'un système quantique ponctuel soumis à un potentiel classique  $V$ , que l'Hamiltonien est de la forme  $H = P^2/2m + V$ , on a

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathbf{X}(\tau) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [P^2/2m + V, \mathbf{X}(\tau)] \rangle.$$

Puisque  $V$  commute avec  $\mathbf{X}$ , il reste à calculer  $[P^2, \mathbf{X}]$ , c'est à dire  $-\hbar^2/2m [\Delta, \mathbf{X}]$ . On montre simplement (à faire en exercice) que  $[\Delta, X_\alpha] = 2 \partial_\alpha$ , ce qui se traduit par  $[\Delta, \mathbf{X}] = 2 \frac{i}{\hbar} \mathbf{P}$  et donc

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathbf{X}(\tau) \rangle = \frac{\langle P \rangle}{m}, \quad (3.18)$$

qui est la définition de la vitesse classique à partir de la quantité de mouvement.

De la même manière, si l'on pose  $O = \mathbf{P}$ , en supposant aussi que l'Hamiltonien est de la forme  $H = P^2/2m + V$ , on obtient

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathbf{P}(\tau) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [P^2/2m + V, \mathbf{P}(\tau)] \rangle.$$

Or, puisque  $P^2$  commute avec  $\mathbf{P}$ , il reste à calculer  $[V, \mathbf{P}]$ . On montre aussi simplement que  $[V, P_\alpha] = i \hbar \partial_\alpha V$ , c'est à dire  $[V, \mathbf{P}] = i \hbar \nabla V$ . Ainsi,

$$\frac{d}{d\tau} \langle \mathbf{P}(\tau) \rangle = -\langle \nabla V \rangle, \quad (3.19)$$

qui n'est autre que le principe fondamental de la mécanique classique appliqué à une particule ponctuelle soumise à un système de forces dérivant d'une énergie potentielle ( $V$ ). Il faut noter que dans (3.19), il s'agit bien de  $\langle \nabla V \rangle$  qui ne se réduit à  $\nabla \langle V \rangle$  que dans le cas où l'extension du paquet d'onde est faible devant la longueur de gradient du potentiel  $V$ .

Il reste maintenant à déterminer l'expression de  $H$  comme on l'avait fait précédemment pour  $\mathbf{P}$ . Par définition de  $U(t)$ , on sait que

$$|\Psi(\tau + t)\rangle = U(t) |\Psi(\tau)\rangle. \quad (3.20)$$

Pour une évolution infinitésimale, on peut développer (3.20) à l'ordre 1 en  $t$

$$|\Psi(\tau + t)\rangle = |\Psi(\tau)\rangle + t \frac{d}{d\tau} |\Psi(\tau)\rangle = (\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} t H) |\Psi(\tau)\rangle,$$

et on retrouve, en égalisant les termes à l'ordre 1, l'équation de Schrödinger

$$i \hbar \frac{d}{d\tau} |\Psi(\tau)\rangle = H |\Psi(\tau)\rangle. \quad (3.21)$$



On aboutit donc à la conclusion que

$$H = i\hbar \frac{d}{d\tau}, \quad (3.22)$$

et

$$U(t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}. \quad (3.23)$$

## 3.4 Symétrie par rotation

### 3.4.1 Moment cinétique

Dans ce cas, il est important de prendre en compte la dimensionnalité de l'espace car il y a des différences profondes entre une rotation dans le plan (en 2d) et une rotation dans l'espace (en 3d). En effet, il ne faut qu'un paramètre en 2d pour caractériser une rotation (l'angle  $\theta$  de rotation) alors qu'il en faut trois, les angles d'Euler ( $\alpha, \beta, \gamma$ ), pour caractériser une rotation en 3d. D'autre part, l'ordre d'une succession de rotations n'a pas d'importance en 2d (le résultat est le même quelque soit l'ordre), ce qui n'est pas du tout le cas en 3d. Nous allons traiter le cas le plus compliqué, 3d, ensemble et je vous laisse le cas 2d à faire tout seul.

Une rotation est une isométrie, c'est à dire une transformation qui laisse invariante les longueurs. Soit  $\mathbf{X}$  un vecteur avant rotation et  $\mathbf{X}'$  le vecteur après rotation. Il existe un opérateur linéaire  $\mathbf{R}(g)$  tel que

$$\mathbf{X}' = \mathbf{R}(g) \mathbf{X},$$

où  $g = \theta$  en 2d et  $g = (\alpha, \beta, \gamma)$  en 3d (on ne prend pas en compte la translation, déjà traitée, qui est aussi une isométrie). La longueur d'un vecteur quelconque  $\mathbf{X}$  est donnée par le carré scalaire, ce qui, sous forme matricielle, se traduit par  $|\mathbf{X}|^2 = \mathbf{X}^T \mathbf{X}$  où  $^T$  est la transposée. L'isométrie se traduit donc par

$$|\mathbf{X}'|^2 = \mathbf{X}'^T \mathbf{X}' = \mathbf{X}^T (\mathbf{R}(g)^T \mathbf{R}(g)) \mathbf{X} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} = |\mathbf{X}|^2,$$

qui n'est vérifiée  $\forall \mathbf{X}$  que si

$$\mathbf{R}(g)^T \mathbf{R}(g) = \mathbb{I}. \quad (3.24)$$

Cette relation est vraie pour une rotation 2d comme pour une rotation 3d. Elle définit le groupe des rotations que l'on appelle  $O(n)$  où  $n$  est la dimensionnalité ( $n = 2$  en 2d et  $n = 3$  en 3d).

Comme les matrices de rotation sont des matrices réelles, en prenant le déterminant de la relation précédente, on trouve que  $\det(R) = \pm 1$ . Les transformations qui nous intéressent pour l'instant sont les rotations pures (pas de réflexion par rapport à un axe ou de symétrie par rapport à un point qui sont aussi des isométries pour lesquelles  $\det(R) = -1$ ) qui sont continûment reliées à l'unité et qui vérifient donc  $\det(U) = +1$ . Cette condition supplémentaire définit le sous-groupe de  $O(n)$ , appelé  $SO(n)$ .

On peut trouver les générateurs  $\hat{\omega} = (\hat{\omega}_\alpha)$ , où  $\alpha \in \{1, 2, 3\}$ , de ces transformations en posant

$$\mathbf{R}(g) = \mathbb{I} + g_\alpha \hat{\omega}_\alpha.$$

La relation (3.24) se traduit par

$$\mathbf{R}(g)^T \mathbf{R}(g) = (\mathbb{I} + g_\alpha \hat{\omega}_\alpha)^T (\mathbb{I} + g_\beta \hat{\omega}_\beta) = \mathbb{I} + g_\alpha (\hat{\omega}_\alpha^T + \hat{\omega}_\alpha) + O(g^2) = \mathbb{I},$$

qui implique, à l'ordre 1 en  $g$ , que  $\forall \alpha$

$$\hat{\omega}_\alpha^T = -\hat{\omega}_\alpha, \tag{3.25}$$

c'est à dire que les  $\hat{\omega}_\alpha$  sont antisymétriques.

En 2d, les  $\hat{\omega}_\alpha$ , qui sont des matrices  $2 \times 2$ , n'ont que 2 termes hors diagonale non nuls qui doivent être opposés (antisymétrie). Il n'y a donc qu'un seul générateur qui est

$$\hat{\omega} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

L'opérateur de rotation 2d ne dépend ainsi que d'un seul paramètre (comme on l'a déjà dit avant) puisqu'il n'y a qu'un seul générateur.

En 3d, en revanche, les  $\hat{\omega}_\alpha$  sont des matrices  $3 \times 3$ . L'antisymétrie imposant que les termes diagonaux sont nuls, il ne reste que 3 termes d'un côté de la diagonale qui sont opposés aux 3 autres termes de l'autre côté de la diagonale. Les matrices  $\hat{\omega}_\alpha$ , au nombre de 3, doivent constituer une base des matrices antisymétriques  $3 \times 3$ . On peut choisir la base naturelle qui est décrite par le tenseur totalement antisymétrique,  $\epsilon_{\alpha ij}$ , dont tous les éléments sont nuls sauf ceux pour lesquels  $\alpha, i$  et  $j$  sont tous différents :

$\epsilon_{123} = +1$  (et permutations circulaires) et  $\epsilon_{213} = -1$  (et permutations circulaires). Ainsi, en posant  $(\hat{\omega}_\alpha)_{ij} = \epsilon_{\alpha ij}$ , on a

$$\hat{\omega}_1 = \epsilon_{1ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\omega}_2 = \epsilon_{2ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\omega}_3 = \epsilon_{3ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Comme pour les autres symétrie, une rotation engendre dans l'espace de Hilbert une transformation unitaire telle que  $|\Psi'\rangle = U(g) |\Psi\rangle$ . Sous l'effet d'une rotation, une observable vectorielle  $\hat{\mathbf{A}}$  (ça peut être la position  $\mathbf{X}$  ou la quantité de mouvement  $\mathbf{P}$  par exemple) se transforme en  $\hat{\mathbf{A}}' = \mathbf{R}(g) \hat{\mathbf{A}}$ . Donc

$$\text{Sym}[g, \hat{\mathbf{A}}] = \mathbf{R}(g) \hat{\mathbf{A}} = R_{\alpha\beta} \hat{A}_\beta, \quad (3.27)$$

où  $R_{\alpha\beta}$  est un nombre et  $\hat{A}_\beta$  est la composante suivant  $\beta$  d'un opérateur vectoriel qui agit sur l'espace de Hilbert. Il faut donc bien voir que  $\hat{A}_\beta$  est un opérateur et pas un nombre. Pour trouver  $U(g)$ , il faut résoudre

$$U(g)^\dagger \hat{A}_\alpha U(g) = R_{\alpha\beta} \hat{A}_\beta, \quad (3.28)$$

qui doit être vérifiée  $\forall \hat{\mathbf{A}}$ . On va chercher le générateur  $U(g)$  en posant  $\varepsilon = g$  et  $G = -J/\hbar$  (changement de notations) de sorte que,  $\forall g_\eta \in \mathbb{R}$  and  $\forall \hat{A}_\alpha$  hermitien,

$$\hat{A}_\alpha - i g_\gamma [\hat{J}_\gamma, \hat{A}_\alpha] = (\delta_{\alpha\beta} + g_\eta \epsilon_{\eta\alpha\beta}) \hat{A}_\beta,$$

ce qui signifie que

$$[J_\eta, A_\alpha] = i \epsilon_{\eta\alpha\beta} A_\beta, \quad (3.29)$$

formule dans laquelle, on le rappelle,  $\mathbf{A}$  est un vecteur d'opérateurs (qui se transforme comme un vecteur sous une rotation). En particulier, si on pose  $A = J$ , on trouve que les  $J$  doivent vérifier

$$[J_\eta, J_\alpha] = i \epsilon_{\eta\alpha\beta} J_\beta, \quad (3.30)$$

qui est la relation de commutation bien connue pour les opérateurs moments cinétique en mécanique quantique.

Les matrices  $3 \times 3$  qui vérifient cette algèbre sont  $(J_\alpha)_{ij} = i \epsilon_{\alpha ij}$ . La relation (3.30) est constitutive de ce que l'on nomme une algèbre de Lie<sup>2</sup>. Les constantes  $i \epsilon_{\eta\alpha\beta}$  sont les constantes de structure de l'algèbre et représente la signature du groupe de transformation. Ces constantes de structure particulières représentent le groupe de rotation dans l'espace physique de dimension 3 (l'espace au sens usuel). Il est ici représenté (au sens des *représentations* mathématiques) par des matrices  $3 \times 3$  qui agissent dans l'espace usuel de dimension 3

$$\hat{J}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_3 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

### 3.4.2 Spin

#### Émergence à partir de considérations de symétrie

La question que l'on peut se poser maintenant : existe-t'il des représentations de cette algèbre (des rotations dans l'espace de dimension 3 physique) dans des espaces de dimensions différentes, 1, ou 2 (qui ne représenteraient plus l'espace physique) mais qui obéirait à la même algèbre de Lie ? On cherche en fait à déterminer tous les objets mathématiques (toutes les représentations) qui peuvent se transformer sous l'effet du groupe de rotation 3d et engendrer les mêmes lois de composition.

En dimension 1, la réponse est claire : non ! Il s'agirait de nombres complexes, dans le cas le plus général, qui commutent entre eux et qui ne peuvent donc vérifier une relation du type (3.30). Il n'y a donc pas de représentation de dimension 1 du groupe de rotation 3d. En revanche, il existe bien une représentation de dimension 2 du groupe des rotations 3d qui est générée par l'ensemble bien connu des matrices de Pauli

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

En effet, ces 3 matrices (même nombre de générateurs que pour les représentations de dimension 3, c'est un résultat général) vérifient la même algèbre que précédemment

$$[\sigma_\eta, \sigma_\alpha] = i \epsilon_{\eta\alpha\beta} \sigma_\beta. \quad (3.33)$$

---

2. A écrire

Le problème est de donner un sens à cette espace de dimension 2 sur lequel agissent les matrices de Pauli.

Cet espace n'a rien à voir avec l'espace usuel et il n'a aucune manifestation classique. On a besoin d'aucune grandeur physique de dimension 2, qui se transforme comme une rotation de l'espace 3d, pour caractériser l'état d'un système classique. C'est l'expérience classique qui nous le dit !

La situation est radicalement différente en mécanique quantique. Une telle grandeur a fait son apparition au milieu des années 1920, les mesures spectroscopiques devenant de plus en plus précises, là où l'on ne voyait avant qu'une seule raie, on arrivait maintenant à voir 2 raies. Elles étaient tellement proches qu'elles ne semblaient n'en former qu'une avant ces progrès. Pour expliquer ces raies supplémentaires il fallait faire l'hypothèse d'une nouvelle variable d'état que l'on a appelé *spin*.

Le spin ne peut pas être écrit sous la forme  $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$  comme on s'y attendrait pour un moment orbital. C'est une coïncidence incroyable que le spin n'apparaisse dans la nature qu'à l'échelle quantique. Il n'y a pas de raisons conceptuelles pour laquelle il ne pourrait pas se manifester à l'échelle macroscopique mais il semblerait que la nature soit ainsi faite.

La théorie moderne des spineurs a été développée par Elie Cartan en 1910. La notion de spin en théorie quantique a été introduite en 1926 par Samuel Goudsmit et George Uhlenbeck [UG26].

## Émergence à partir de l'équation relativiste de Dirac

Schrödinger lui-même, avant de trouver son équation éponyme qui décrit l'évolution de l'état d'un système quantique pur dans le cadre classique (non-relativiste), a essayé de déterminer une équation relativiste en utilisant le principe de correspondance sur l'équation de conservation de l'énergie d'une particule libre massive

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (3.34)$$

Ce faisant, il arriva, en remplaçant  $E \mapsto i \hbar \partial_t$  et  $\mathbf{p} \mapsto -i \hbar \nabla$ , à l'équation de Klein-Gordon

$$-\hbar^2 \partial_t^2 \Psi = -\hbar^2 c^2 \Delta \Psi + m^2 c^4 \Psi. \quad (3.35)$$

Cette équation pose trois problèmes.

Le premier, et pas des moindres, vient du fait qu'une condition initiale sur  $\Psi$  n'est pas suffisante pour déterminer  $\Psi$  à tous les temps futurs. La dérivée seconde en temps nécessite de donner  $\partial_t \Psi$  à l'instant initial.

Le deuxième problème vient du fait que les solutions sous forme de modes de Fourier ( $\Psi \propto \exp(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et))$ ) font apparaître des solutions d'énergies négatives ce qui pose des problèmes de stabilité (il n'y a pas de niveau fondamental).

Enfin, le troisième problème avec cette équation est d'arriver à donner une interprétation probabiliste à la fonction  $\Psi$  qui en est solution. En effet, on a vu à la page 22 que le fait que  $\Psi\Psi^* = |\Psi|^2$  est conservée est étroitement lié au fait que l'équation de Schrödinger est d'ordre 1 en temps ce qui permet de multiplier à gauche et à droite par  $\Psi^*$  et de faire apparaître  $\partial_t(\Psi\Psi^*)$ . Ceci n'est pas possible avec une équation du deuxième ordre en temps comme celle de Klein-Gordon.

L'idée de Dirac fut de transformer l'eq.(3.35) en une équation du premier ordre en temps ce qui revient, comme on le dit très abusivement parfois, à en prendre la racine carrée. Il chercha donc un opérateur du premier ordre le plus général possible

$$\hat{D} = \alpha \partial_t + \beta_i \partial_i + m c^2 \gamma \quad (3.36)$$

dont le carré correspond à l'opérateur de Klein-Gordon. Or, puisque

$$\begin{aligned} \hat{D}^2 = & \alpha^2 \partial_t^2 + (\alpha \beta_i + \beta_i \alpha) \partial_t \partial_i + m c^2 (\gamma \alpha + \alpha \gamma) \partial_t \\ & + (\beta_i \beta_j + \beta_j \beta_i) \partial_i \partial_j + m c^2 (\gamma \beta_i + \beta_i \gamma) \partial_i + m^2 c^4 \gamma^2, \end{aligned} \quad (3.37)$$

l'égalité avec l'opérateur de Klein-Gordon

$$\hbar^2 \partial_t^2 - \hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 \quad (3.38)$$

requiert les relations suivantes

$$\alpha^2 = \hbar^2, \quad (3.39)$$

$$\alpha \beta_i + \beta_i \alpha = 0, \quad (3.40)$$

$$\gamma \alpha + \alpha \gamma = 0, \quad (3.41)$$

$$\beta_i \beta_j + \beta_j \beta_i = -\hbar^2 c^2 \delta_{ij}, \quad (3.42)$$

$$\gamma \beta_i + \beta_i \gamma = 0, \quad (3.43)$$

$$\gamma^2 = 1. \quad (3.44)$$

Clairement, ces conditions ne peuvent pas être remplies si les  $\alpha$ ,  $\beta_i$  et  $\gamma$  sont des nombres (réelles ou complexes) puisqu'il y a des relations d'anti-commutation entre les  $\alpha$ ,  $\beta_i$  et  $\gamma$ . Ces coefficients doivent donc être des objets qui anti-commutent.

Des matrices peuvent anti-commuter ! Et c'est une deuxième idée de génie de Dirac que de ne pas s'être arrêté là et d'avoir chercher s'il existait des matrices vérifiant les six règles précédentes. Réponse : il en existe ! Quelle est la dimension minimale de ces matrices ? Pour répondre à cette question, remarquons que puisque  $\alpha^2 = \hbar^2$  alors  $\alpha$  a deux valeurs propres opposées  $\pm\hbar$ , de même, puisque  $\gamma^2 = 1$  alors  $\gamma$  a deux valeurs propres opposées  $\pm 1$  et aussi  $\beta_i^2 = -\hbar^2 c^2/2$  et donc les  $\beta_i$  ont deux valeurs propres opposées  $\pm i\hbar c/\sqrt{2}$ . Or, puisque ces matrices anticommulent et qu'elles sont de carré proportionnel à l'identité, elles sont de trace nulle. Ces matrices sont donc forcément de dimension paire.

On peut montrer [laissé en exercice] qu'il ne peut pas s'agir de matrices de dimension 2. On montre que la dimension minimale de ces matrices est 4. On voit donc que l'on se trouve dans l'obligation d'élargir l'espace représentant les états de particules décrites de façon quantique relativiste. Il ne s'agit plus de fonctions à valeurs complexes mais de vecteurs de fonctions complexes à 4 composantes (qui n'ont rien à voir avec les 4 dimension d'espace temps). L'équation de Dirac, dont nous venons de montrer la dérivation, s'écrit donc sous la forme

$$\alpha \partial_t \bar{\Psi} + \beta_i \partial_i \bar{\Psi} + m c^2 \gamma \bar{\Psi} = 0, \quad (3.45)$$

où  $\bar{\Psi}$  est une fonction vectorielle complexe à 4 composantes.

Nous n'irons pas plus loin ici dans l'interprétation de ces 4 composantes (il s'agit en fait de 2 composantes de spin 1/2, on parle d'un bi-spineur) mais nous mentionnerons simplement que les matrices  $\alpha$ ,  $\beta_i$  et  $\gamma$  font apparaître naturellement les matrices de Pauli et c'est pour cette raison que l'on peut dire que la notion de spin 1/2 apparaît *assez naturellement* lorsque l'on essaie de faire une équation d'onde quantique relativiste avec une interprétation probabiliste.

Le spin 1/2 de certaines particules élémentaires (électrons, neutrinos, quarks, etc) vient finalement de la forme particulière de l'énergie d'une particule libre en relativité restreinte puisqu'il vient de la racine carré formelle de cette forme.

Pour finir, mentionnons que l'équation de Dirac (3.45) fait apparaître le spin 1/2 et c'est la raison pour laquelle elle est l'équation d'évolution prototype pour toutes les particules fondamentale de spin 1/2 (électron, mu, tau, et les neutrinos associés ainsi que les quarks).

En revanche, sous cette forme (3.45), l'équation de Dirac détermine l'évolution temporelle d'une fonction vectorielle complexe  $\Psi$ , comme on

vient de la voir, ce qui n'est pas du tout le cadre dans lequel doit se traiter la physique relativiste des particules élémentaires. Le cadre général est celui de la théorie quantique des champs dans lequel  $\bar{\Psi}$  n'est plus une fonction vectorielle mais un opérateur vectoriel qui agit sur un espace de Fock (que l'on va définir au chapitre suivant page 65).

## 3.5 Symétries discrètes

### 3.5.1 Parité-Renversement temporel

Ces notions apparaissent naturellement lorsque l'on étudie les sous groupes du groupe de Poincaré (transformation de Lorentz). Le groupe de Poincaré en entier n'est pas connexe. Il y a 4 morceaux disjoints (un seul contient l'identité) qui correspondent à  $\det(\Lambda) = \pm 1$  et à  $\Lambda^{00} \geq +1$  ou  $\Lambda^{00} \leq -1$ .

Le plus grand sous groupe connexe du groupe de Poincaré et le groupe orthochrone de Lorentz pour lequel  $\det(\Lambda) = +1$  et  $\Lambda^{00} \geq +1$  (il contient l'identité). Pour passer de l'un à l'autre on le fait à l'aide des transformations discrètes de parité  $\hat{P} : \boldsymbol{x} \mapsto -\boldsymbol{x}$  (pour passer de  $\det(\Lambda) = +1$  à  $\det(\Lambda) = -1$ ) et de renversement temporel  $\hat{T} : t \mapsto -t$  (pour passer de  $\Lambda^{00} \geq +1$  à  $\Lambda^{00} \leq -1$ ). Cela est vrai en dimension d'espace 3.

En dimension d'espace 2, la parité n'existe pas car faire la transformation  $\boldsymbol{x} \mapsto -\boldsymbol{x}$  revient en dimension 2 à faire une rotation de 180 degré. En dimension 3 il n'y a aucune composition de rotations équivalente à  $\boldsymbol{x} \mapsto -\boldsymbol{x}$ . Il faut donc la rajouter dans les transformations (discrètes) possibles.

To be continued.

## 3.6 Symétrie d'indiscernabilité

### 3.6.1 Bosons et fermions

A rajouter l'an prochain.



### 3.6.2 Système à deux niveaux peuplé par deux fermions de même projection de spin

Appelons  $p_1$  et  $p_2$  les deux fermions indiscernables (même état de spin). Les états les plus généraux de  $p_1$  et  $p_2$  sont donnés par

$$|\Psi_{p_1}(p_1)\rangle = a_{p_1} |E_1\rangle(p_1) + b_{p_1} |E_2\rangle(p_1), \quad (3.46)$$

$$|\Psi_{p_2}(p_2)\rangle = a_{p_2} |E_1\rangle(p_2) + b_{p_2} |E_2\rangle(p_2). \quad (3.47)$$

Pour expliciter l'état de l'ensemble des deux fermions, on construit l'état antisymétrique

$$|\Psi_{p_1 p_2}\rangle = |\Psi_{p_1}(p_1)\rangle \otimes |\Psi_{p_2}(p_2)\rangle - |\Psi_{p_1}(p_2)\rangle \otimes |\Psi_{p_2}(p_1)\rangle, \quad (3.48)$$

$$= (a_{p_1} b_{p_2} - a_{p_2} b_{p_1}) (|E_1\rangle(p_1) \otimes |E_2\rangle(p_2) - |E_1\rangle(p_2) \otimes |E_2\rangle(p_1)). \quad (3.49)$$

L'anisymétrisation ne laisse qu'un état possible pour le système (à un facteur de phase près)

$$|\Psi_{p_1 p_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|E_1\rangle(p_1) \otimes |E_2\rangle(p_2) - |E_1\rangle(p_2) \otimes |E_2\rangle(p_1)). \quad (3.50)$$

Le système ne peut donc pas évoluer dans le temps même s'il y a interaction. L'état est intriqué. Si la particule  $p_1$  est dans l'état  $|E_1\rangle$ , alors  $p_2$  est dans l'état  $|E_2\rangle$  et si la particule  $p_1$  est dans l'état  $|E_2\rangle$ , alors  $p_2$  est dans l'état  $|E_1\rangle$ . On résume cela par le fait que deux fermions ne peuvent se retrouver dans le même état ce qui impose l'état d'un système à deux niveaux constitué de deux fermions quoiqu'il se passe autour. Il n'en serait pas de même si l'on autorisait un niveau supplémentaire (3 niveaux) pour la même population (2 fermions). On a un degré de liberté qui peut être exploité.

### 3.6.3 Système à trois niveaux peuplé par deux fermions de même projection de spin

De la même manière, on comprend que l'état pur le plus général à 3 niveaux de deux fermions identiques est

$$\begin{aligned} |\Psi_{p_1 p_2}\rangle = & a(t) (|E_1\rangle(p_1) \otimes |E_2\rangle(p_2) - |E_1\rangle(p_2) \otimes |E_2\rangle(p_1)) \\ & + b(t) (|E_2\rangle(p_1) \otimes |E_3\rangle(p_2) - |E_2\rangle(p_2) \otimes |E_3\rangle(p_1)) \\ & + c(t) (|E_1\rangle(p_1) \otimes |E_3\rangle(p_2) - |E_1\rangle(p_2) \otimes |E_3\rangle(p_1)). \end{aligned} \quad (3.51)$$

On suppose qu'à  $t = 0$ ,  $a = 1$ ,  $b = 0$  et  $c = 0$ . Les deux fermions sont sur les niveaux les plus bas. On se demande ce qu'il se passe si on excite le système avec une onde EM de fréquence  $h\nu = E_2 - E_1$ . Le fermion dans le niveau  $|E_1\rangle$  peut transiter à  $|E_2\rangle$  mais il y a déjà le deuxième fermion. Celui-ci va-t'il se retrouver en  $|E_3\rangle$  ?

L'état initial du système à une énergie totale  $E_1 + E_2$ . Les deux autres états stationnaires possibles ont une énergie totale  $E_2 + E_3$  (pour les fermions dans 2 et 3) ou  $E_1 + E_3$  (pour les fermions dans 1 et 3). Seul des photons d'énergie  $h\nu = E_3 - E_1$  (qui peut faire passer le fermion de 1 à 3) ou  $h\nu = E_3 - E_2$  (qui peut faire passer le fermion de 2 à 3) sont résonants et amènent à un état stationnaire.

C'est là que l'on voit que la chronologie des photons est importante. Supposons que l'on parte de la situation (1,2) pour les fermions. Imaginons que le rayonnement est d'abord fait de photons  $h\nu = E_2 - E_1$  et ensuite de photons  $h\nu = E_3 - E_2$  (modification du spectre au cours du temps). les premiers photons ne font rien puisque l'état 2 est saturé. Les deuxièmes photons en revanche permettent la transition de l'état 2 vers 3. Pour cette variation du spectre, on se retrouve donc avec un état (1,3).

Dans le cas inverse, où le rayonnement est d'abord fait de photons  $h\nu = E_3 - E_2$  et ensuite de photons  $h\nu = E_2 - E_1$ , on constate que les premiers permettent la transition de l'état 2 vers 3 (libération de l'état 2) et les deuxièmes permettent la transition de l'état 1 vers 2. Pour cette nouvelle variation du spectre, on se retrouve donc avec un état (2,3).

Les mêmes photons amenés dans un ordre différents produisent des effets différents.

To be continued