Jaqueline Bloch, jacqueline.bloch@c2n.upsaclay.fr ; Mark Goerbig, goerbig@lps.u-psud.fr

1 Opérateurs unitaires en mécanique quantique et symétries

Jusqu'à présent, nous avons vu que les opérateurs hermitiens jouent un rôle très important en mécanique quantique car ils décrivent, en tant qu'observables, des quantités physiques mesurables. Une deuxième classe d'opérateurs est constituée d'opérateurs unitaires. Même s'ils n'ont pas des valeurs propres réelles et ne représentent ainsi pas des résultats possibles d'une expérience, ils sont essentiels en mécanique quantique comme ils représentent des *symétries.* On peut en effet associer à une opération de symétrie une transformation unitaire.

1. Un ket se transforme selon la loi $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$. Si $\hat{U}$ représente une symétrie (par exemple une rotation d'un espace isotrope), le produit scalaire doit être conservé, i.e. $\langle\psi'|\phi'\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$. Qu'est-ce que cela implique pour $\hat{U}^\dagger\hat{U}$ et $\hat{U}\hat{U}^\dagger$? <u>N.B. :</u> L'ensemble des opérateurs unitaires forme un groupe.

   <u>Solution:</u> Comme $\langle\psi'|\phi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\phi\rangle$ doit être égal à $\langle\psi|\phi\rangle$, on remarque tout de suite que $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$, i.e. $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ est un opérateur unitaire. De même, on trouve $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$. Les opérateurs unitaires forment en effet un groupe, car si l'on considère deux opérateurs unitaires $\hat{U}$ et $\hat{V}$,
   (i) le produit $\hat{V}\hat{U}$ est bien unitaire, car $\hat{U}^\dagger\hat{V}^\dagger\hat{V}\hat{U} = \hat{U}^\dagger\hat{1}\hat{U} = \hat{1}$;
   (ii) il existe un élément neutre $\hat{E} = \hat{1}$;
   (iii) il existe un élément inverse $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger = \hat{1}$.

2. Plus généralement, on demande d'une transformation unitaire $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ qu'elle préserve l'élément de matrice d'un opérateur $\hat{A}$, $\langle\psi'|\hat{A}'|\phi'\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle$. Comment l'opérateur $\hat{A}$ se transforme-t-il ?

   <u>Solution:</u> On demande que $\langle\psi'|\hat{A}'|\phi'\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle$. Or, $\langle\psi'|\hat{A}'|\phi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{A}'\hat{U}|\phi\rangle$, d'où on trouve immédiatement

   $$\hat{A} = \hat{U}^\dagger\hat{A}'\hat{U}, \qquad \Leftrightarrow \qquad \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger,$$

   comme pour une transformation de base.

3. Montrer que les valeurs propres d'un opérateur unitaire sont de norme 1.

   <u>Solution:</u> Nous considérons l'équation aux valeurs propres $\hat{U}|u_n\rangle = u_n|u_n\rangle$, et on a d'un côté

   $$\langle u_n|\hat{U}^\dagger\hat{U}|u_n\rangle = \langle u_n|\hat{1}|u_n\rangle = \langle u_n|u_n\rangle = 1,$$

   en raison de la normalisation, et d'un autre côté

   $$\langle u_n|\hat{U}^\dagger\hat{U}|u_n\rangle = u_n^* u_n\langle u_n|u_n\rangle = |u_n|^2.$$

   Les valeurs propres d'un opérateur unitaire sont alors de module un.

4. Si $\hat{A}$ est une observable, montrer que $\hat{U} = \exp(i\hat{A})$ est un opérateur unitaire. Pour cela appliquer l'opérateur $\hat{U}$ à un état $|\psi\rangle$ quelconque, que l'on décomposera sur une base convenable.

   <u>Solution:</u> Il suffit de vérifier la propriété sur un vecteur de la base, qu'on choisit être engendré par l'opérateur $\hat{A}$, i.e. $\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$, où nous savons déjà que les valeurs propres a_n sont réelles. On a alors $\hat{U}|a_n\rangle = \exp(i\hat{A})|a_n\rangle = \exp(ia_n)|a_n\rangle$ et en plus $\hat{U}^\dagger|a_n\rangle = \exp(-i\hat{A}^\dagger)|a_n\rangle = \exp(-i\hat{A})|a_n\rangle = \exp(-ia_n)|a_n\rangle$. On trouve ainsi $\hat{U}^\dagger\hat{U}|a_n\rangle = |a_n\rangle$ et, de manière générale $\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = |\psi\rangle$, si l'on décompose $|\psi\rangle = \sum_n C_n|a_n\rangle$. Il en résulte l'identité entre opérateurs $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$.

5. On considère la transformation « infinitésimale » $\hat{U} = \exp(i\epsilon\hat{A})$. (L'observable $\hat{A}$ est aussi appelée *générateur* de la transformation.) Quelle est la condition que $\hat{A}$ doit satisfaire afin que le hamiltonien soit invariant sous cette transformation ? Que peut-on dire de l'évolution temporelle de $\hat{A}$?

   NB : On a vu ici une manifestation du *théorème de Noether* qui relie à une symétrie une quantité conservée.

   Solution: *On développe $\hat{U} \simeq 1 + i\epsilon\hat{A}$, car $\epsilon \ll 1$. À l'ordre linéaire en ϵ, on trouve alors*

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger \simeq \left(1 + i\epsilon\hat{A}\right)\hat{H}\left(1 - i\epsilon\hat{A}\right) \simeq \hat{H} + i\epsilon[\hat{A}, \hat{H}].$$

   L'invariance $\hat{H}' = \hat{H}$ sous la transformation nécessite alors l'annulation du commutateur $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, i.e. que le générateur de la transformation commute avec le hamiltonien. La valeur moyenne de l'observable $\hat{A}$ est alors conservée, car

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle = 0.$$

6. Montrer que, si $\hat{U}$ est une symétrie, $\hat{A}$ et $\hat{H}$ partagent une base commune, *i.e.* les états propres de $\hat{A}$ sont également états propres de $\hat{H}$. Pour cela, montrer que $\hat{A}|\mu\rangle$ est état propre de $\hat{H}$ avec la même valeur propre E_μ que l'état propre $|\mu\rangle$, $\hat{H}|\mu\rangle = E_\mu|\mu\rangle$. (Pour simplifier, on considérera que E_μ n'est pas dégénéré.)

   Solution: *Avec $[\hat{A}, \hat{H}] = 0 \Leftrightarrow \hat{A}\hat{H} = \hat{H}\hat{A}$, nous avons $\hat{H}\hat{A}|\mu\rangle = \hat{A}\hat{H}|\mu\rangle = E_\mu\hat{A}|\mu\rangle$. On retrouve donc l'équation aux valeurs propres pour l'état $\hat{A}|\mu\rangle$. Comme nous avons fait l'hypothèse que le niveau E_μ est non dégénéré, l'état $\hat{A}|\mu\rangle$ ne peut être linéairement indépendant de $|\mu\rangle$, c'est-à-dire $\hat{A}|\mu\rangle = \lambda|\mu\rangle$, où λ est un nombre complexe. Ce n'est donc rien d'autre qu'une équation aux valeurs propres pour l'opérateur $\hat{A}$, ce qui prouve que $|\mu\rangle$ est aussi état propre de $\hat{A}$.*

   Notons que cet argument se généralise facilement pour des niveaux dégénérés. Dans ce cas, l'action de $\hat{A}$ sur un état propre $|\mu, i\rangle$ peut générer un autre état propre $|\mu, j\rangle$, mais à la même énergie. La base de notre système quantique est alors donnée par les états $|\mu, i\rangle$, où $i = 1, ..., g_\mu$, où g_μ est la dégénérescence du niveau. Tous ces états, avec un μ fixé, engendrent donc un sous-espace $\mathcal{E}_\mu$ (de dimension g_μ) stable sous l'action de $\hat{A}$. La base commune s'obtient alors par diagonalisation de $\hat{A}$ dans chacun de ces sous-espaces, ce qui est possible comme la matrice $\langle\mu, i|\hat{A}|\mu, j\rangle$ est hermitienne.

7. Comme exemple concret, nous considérons une translation (infinitésimale) unidimensionnelle de a_0, $\mathcal{T}_{a_0}$. Elle agit sur une fonction d'onde comme

$$\mathcal{T}_{a_0}\psi(x) = \psi(x - a_0).$$

   Montrer que, par un développement limité, cet opérateur de translation peut s'écrire comme $\mathcal{T}_{a_0} = 1 - ia_0\hat{p}/\hbar$, où $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ est l'opérateur impulsion. En comparaison avec l'équation plus haut, on peut alors voir l'impulsion comme le *générateur des translations.* Quelle condition le hamiltonien doit-il satisfaire pour respecter la symétrie de translation dans la direction x ? Faire le lien avec le théorème de Noether.

   Solution: *Nous avons $\psi(x - a_0) \simeq \psi(x) - (d\psi/dx)a_0$ à l'ordre linéaire. Ceci peut se récrire*

$$\psi(x - a_0) = \left(1 - a_0\frac{d}{dx}\right)\psi(x),$$

   et nous reconnaissons ici l'opérateur impulsion $\hat{p} = -i\hbar d/dx$, en termes de dérivée par rapport à x. Nous pouvons alors également écrire

$$\mathcal{T}_{a_0}\psi(x) = \left(1 - i\frac{a_0}{\hbar}\hat{p}\right)\psi(x),$$

ce qui nous permet, à un facteur $\hbar$ près, d'identifier l'opérateur $\hat{p}$ avec le générateur (infinitésimal) des translations. <u>*N.B. :*</u> *Avec l'identité $(1+x/N)^N = e^x$, dans la limite $N \gg 1$, cela nous permet également de décrire des translations qui ne sont pas infinitésimales, et nous trouvons alors pour l'opérateur de translation $\mathcal{T}_a = \exp(-ia\hat{p}/\hbar)$. Cela se généralise aisément à plusieurs dimensions en prenant $a \to \mathbf{a}$ et $\hat{p} \to \hat{\mathbf{p}}$ comme des quantités vectorielles.*

Un hamiltonien respectant la symétrie de translation doit respecter la commutation $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$, comme nous l'avons vu plus haut. Cela veut dire que $\hat{H}$ ne peut être fonction de l'opérateur position $\hat{x}$, par exemple via un potentiel dépendant de l'espace. C'est en accord avec nos attentes car un potentiel $V(x)$, qui n'est pas constant, brise forcément la symétrie de translation dans la direction x. En raison de la commutation, l'impulsion $\langle p \rangle$ est conservée au cours du temps, comme le stipule le théorème de Noether.