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

1 Opérateurs unitaires en mécanique quantique et symétries (éventuellement pour la maison)

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 $\hat{U}\hat{U}^\dagger$? N.B. : L'ensemble des opérateurs unitaires forme un groupe.
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 ?
3. Montrer que les valeurs propres d'un opérateur unitaire sont de norme 1.
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.
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.
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.)
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.