LOIS DE SYMETRIE EN MECANIQUE QUANTIQUE

* Les translations d'espace.
  Transformation des fonction d'ondes.
  Transformation des états.
  Transformation des observables.
  Observables invariantes.
* Déplacements dans le temps. Constantes du mouvement.
* Généralisation.
  Propriétés des symétries continues.
* Règles de sélection.
* L'exemple des rotations.

MOMENTS CINETIQUES ET ROTATION

* Quelques propriétés des rotations.
* Rotations en mécanique quantique.
* Rappels des propriétés des moments cinétiques.
* Transformation des observables, conservation du moment cinétique.
* Observables scalaires, observables vectorielles.
* Opérateurs tensoriels, théorème de Wigner-Eckart.
* Le spin.
* L'expérience de Stern et Gerlach.
* L'exemple du spin 1/2.
* Addition des moments cinétiques.
* Théorème fondamental.
  Coefficients de Clebsch-Gordan.
* Exemple : Addition de deux spins 1/2.
* Interaction L.S
* Interaction $S_1.S_2$.
* Tables de coefficients de Clebsch-Gordan (1/2 x 1/2) et (1x 1/2).
* Correspondances avec les symboles 3j de Wigner et les coefficients de Racah.

LOIS DE SYMETRIE EN MECANIQUE QUANTIQUE

1. Les translations d'espace

1.1. Transformation des fonctions d'ondes

La transformation $\psi_a(x) \xrightarrow{T_a} \psi(x-a)$ représente la translation de a dans l'espace des fonctions d'ondes (La même transformation représente un déplacement de -*a* de l'origine des coordonnées. Les deux définitions d'une transformation : active, déplacement de l'objet et passive, déplacement du système d'axes sont toujours possibles. Sauf mention explicite nous utiliserons toujours la première). Ecrivons le développement de Taylor de ψ_a

$$\psi_a(x) = \psi(x-a) = \psi(x) - a\frac{d}{dx}\psi(x) + \cdots + (-1)^n \frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x) + \cdots$$

ou encore en introduisant l'opérateur impulsion $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$

$$\psi_a(x) = \psi(x) - \frac{ia}{\hbar}\hat{p}_x\psi(x) + \cdots + \left(\frac{ia}{\hbar}\right)^n \frac{\hat{p}_x^n}{n!}\psi(x) + \cdots = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x}\psi(x)$$

On voit que la translation de *a* le long de l'axe *Ox* est représentée par l'opérateur $\hat{T}_a = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x}$. La généralisation à trois dimensions est immédiate :

$$\boxed{\hat{T}_{\vec{a}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}.\hat{\vec{p}}}}$$

1.2. Transformation des états

Inversement justifions l'expression de l'opérateur impulsion à partir de propriétés de symétrie.

Soit un système physique dont les états sont représentés par les vecteurs $|\psi\rangle$ d'un espace de Hilbert. L'opérateur $\hat{T}_a$ qui représente une translation de a du système suivant Ox doit conserver la norme des vecteurs en raison de son interprétation probabiliste.

$$\left\|\hat{T}_a|\psi\rangle\right\| = \left\||\psi\rangle\right\| \quad \Rightarrow \quad \langle\psi|\hat{T}_a^+\hat{T}_a|\psi\rangle \quad \forall|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{T}_a^+\hat{T}_a = \hat{I}$$

C'est donc un opérateur unitaire. Les opérateurs $\hat{T}_a$ doivent posséder les propriétés des translations (en termes mathématiques ils forment une représentation du groupe des translations) :

$$\begin{cases} \hat{T}_0 = \hat{I} \\ \hat{T}_a\hat{T}_b = \hat{T}_{a+b} \\ \hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a} \end{cases}$$

Une translation infinitésimale de da est représentée par un opérateur infiniment voisin de l'identité que l'on peut écrire :

$$\hat{T}_{da} = \hat{I} - \frac{i}{\hbar}da\hat{Q}$$

La propriété d'unitarité $\hat{T}_a^+\hat{T}_a = \hat{I}$ entraîne que $\hat{Q} = \hat{Q}^+$. L'opérateur $\hat{Q}$ est donc une observable que l'on appelle *générateur infinitésimal* de la transformation unitaire.

Une translation finie peut être décomposée en produit de translations infinitésimales :

$$\hat{T}_a = \lim_{N\to\infty}\left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}\frac{a}{N}\hat{Q}\right)^N = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{Q}}$$

qui a la même forme que l'opérateur de translation agissant sur les fonctions d'ondes. On peut ainsi, pour le système le plus général, même sans analogue classique, définir un opérateur impulsion dont les composantes sont les générateurs infinitésimaux des translations le long des trois axes.

Dans le cas particulier d'un système de *n* points matériels : $\hat{Q} = \sum_{k=1}^{n} \hat{p}_{x_k}$

1.3. Transformation des observables, observables invariantes

L'état $|\psi\rangle$ représente un objet physique ; l'opérateur de translation agissant sur l'état représente un déplacement de cet objet. Une observable $\hat{O}$ représente (au moins schématiquement) un appareil de mesure. On peut définir la transformation de l'observable qui représente le déplacement de l'appareil de mesure. Si l'objet physique et les appareils subissent le même déplacement, les résultats des mesures, valeurs propres et valeurs moyennes, ne doivent pas être changées. Si $\hat{O}_a$ est l'observable translatée de *a* on postule donc que :

$$\langle\psi_a|\hat{O}_a|\psi_a\rangle = \langle\psi|\hat{T}_a^{+}\hat{O}\hat{T}_a|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle \quad \forall|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{O} = \hat{T}_a^{+}\hat{O}\hat{T} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{O}_a = \hat{T}_a\hat{O}\hat{T}_a^{+}$$

Si les résultats des mesures ne sont pas modifiés lorsqu'on déplace l'objet sans déplacer l'appareil de mesure ou, si l'on déplace l'appareil sans déplacer l'objet, l'observable $\hat{O}$ est dite invariante. On a alors :

$$\hat{O}_a = \hat{O} \quad \Leftrightarrow \quad \left[\hat{O},\hat{T}_a\right] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left[\hat{O},\hat{Q}\right] = 0$$

Une observable est invariante par translation si elle commute avec les composantes de l'impulsion totale.

2. Déplacements dans le temps - Constantes du mouvement

Soit $\left|\psi(t)\right\rangle$, ket de norme 1, l'état d'un système isolé à l'instant *t* ; son état à l'instant *t'* est le ket $\left|\psi(t')\right\rangle$ de même norme que l'on écrit :

$$\left|\psi(t')\right\rangle = \hat{U}(t',t)\left|\psi(t)\right\rangle$$

L'opérateur unitaire $\hat{U}$ est l'opérateur de déplacement dans le temps ou opérateur d'évolution.
On postule que, pour un système isolé, il est possible de choisir arbitrairement l'origine des temps, ce qui entraîne :

$$\hat{U}(t',t) = \hat{U}(t',-t)$$

Une évolution d'un temps infinitésimal dt est représentée, pour tout *t*, par l'opérateur $\hat{U}(dt)$ que l'on peut écrire de façon analogue à celle utilisée précédemment :

$$\hat{U}(dt) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}dt$$

d'où l'on déduit, en décomposant le déplacement fini en déplacements infinitésimaux

$$\hat{U}(t'-t) = \lim_{N\to\infty}\left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}\frac{t'-t}{N}\hat{H}\right)^{N} = e^{-\frac{i}{\hbar}(t'-t)\hat{H}}$$

On reconnaît dans l'évolution infinitésimale d'un vecteur d'état

$$\left|\psi(t+dt)\right\rangle = \hat{U}(dt)\left|\psi(t)\right\rangle = \left|\psi(t)\right\rangle - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle$$

l'équation de Schrödinger. $\hat{H}$ peut être identifié au Hamiltonien dont on sait qu'il est constant pour un système isolé.

Puisque $\hat{H}$ commute avec une fonction de lui-même

$$\left\langle\psi(t)\right|\hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle = \left\langle\psi(0)\right|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}}\left|\psi(0)\right\rangle = \left\langle\psi(0)\right|\hat{H}\left|\psi(0)\right\rangle$$

La valeur moyenne de l'énergie est une constante du mouvement.

Plus généralement, l'évolution de la valeur moyenne d'une observable $\hat{O}$ s'écrit :

$$\left\langle\psi(t)\right|\hat{O}\left|\psi(t)\right\rangle = \left\langle\psi(0)\right|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}}\hat{O}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}}\left|\psi(0)\right\rangle$$

et pour une évolution infinitésimale dt, d'après l'expression précédente de $\hat{U}(dt)$:

$$\frac{d}{dt}\left\langle\psi(t)\right|\hat{O}\left|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\psi(t)\right|\left[\hat{O},\hat{H}\right]\left|\psi(t)\right\rangle$$

qui est le théorème d'Ehrenfest.

Si une observable $\hat{O}$ commute avec le Hamiltonien $\hat{H}$, c'est une constante du mouvement, c'est-à-dire que sa valeur moyenne est indépendante du temps. De plus, si

l'état du système est, à l'instant 0 un état propre de $\hat{O}$, $\hat{O}\left|\psi(0)\right\rangle = o\left|\psi(0)\right\rangle$, l'état de ce système restera état propre de $\hat{O}$ avec la même valeur propre o au cours de son évolution. En effet, puisque $\hat{O}$ commute avec $\hat{H}$, il commute aussi avec une exponentielle de $\hat{H}$ d'où

$$\hat{O}\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{O}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}}\left|\psi(0)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}}\hat{O}\left|\psi(0)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}}o\left|\psi(0)\right\rangle = o\left|\psi(t)\right\rangle$$

La mesure de $\hat{O}$ donne le même résultat *o* quel que soit l'instant où elle est effectuée.

La condition de conservation de la projection P_x de l'impulsion s'écrit donc : $\left[\hat{P}_x, \hat{H}\right] = 0$. Cette condition est aussi la condition d'invariance par translation du Hamiltonien. La conservation de l'impulsion est équivalente à l'invariance par translation du Hamiltonien. Nous venons de voir que la conservation de l'énergie était équivalente à l'invariance du Hamiltonien par translation dans le temps $\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{H} = 0\right)$. Ce sont deux cas particuliers du théorème de Noether en mécanique quantique.

3. Généralisation - propriétés des symétries continues

Les propriétés rencontrées dans le cas des translations se généralisent autres opérations de symétrie. A une opération de symétrie S dépendant d'un paramètre continu α on associe un opérateur unitaire $\hat{S}(\alpha)$ $\left(\hat{S}\hat{S}^{\dagger} = \hat{S}^{\dagger}\hat{S} = \hat{I}\right)$ pour lequel on postule les

propriétés de groupe de la symétrie, $\hat{S}(\alpha_1+\alpha_2)=\hat{S}(\alpha_1)\hat{S}(\alpha_2)$ **etc…Une opération de symétrie infiniment proche de l'identité est représentée par l'opérateur**

$$\hat{S}(d\alpha)=\hat{I}-\frac{i}{\hbar}d\alpha\hat{G}$$

où $\hat{G}$ **est un opérateur hermitique (observable) que l'on appelle le générateur infinitésimal de la symétrie. Suivant le même raisonnement que précédemment l'expression générale de l'opérateur de symétrie est :** $\hat{S}(\alpha)=e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{G}}$ **. Cet opérateur agissant sur l'état** $|\psi\rangle$ **qui décrit un objet physique, donne l'état** $|\psi\rangle_\alpha$ **qui représente le même objet ayant subi la transformation** $\hat{S}(\alpha)$**.**

$$|\psi\rangle \overset{\hat{S}(\alpha)}{\rightarrow} |\psi\rangle_\alpha=\hat{S}(\alpha)|\psi\rangle$$

La transformation des observables qui représente l'application de la même transformation aux instruments de mesure est

$$\hat{O} \overset{\hat{S}(\alpha)}{\rightarrow} \hat{O}_\alpha=\hat{S}(\alpha)\hat{O}\hat{S}^\dagger(\alpha)$$

Ce qui signifie que l'on postule que les observations ne sont pas modifiées si l'on fait subir la même transformation aux objets étudiés et aux appareils de mesure. Lorsque $\hat{O}_\alpha=\hat{O}$ **on dit que l'observable** $\hat{O}$ **est un invariant.**

Si le Hamiltonien $\hat{H}$ est invariant dans la symétrie S, on a

$$\hat{S}(\alpha)\hat{H}\hat{S}^{+}(\alpha)=\hat{H} \quad \Leftrightarrow \quad \left[\hat{G},\hat{H}\right]=0$$

On voit donc que $\hat{G}$ est une constante du mouvement, c'est-à-dire que les valeurs moyennes sont constantes :

$$\left\langle\psi(t)\middle|\hat{G}\middle|\psi(t)\right\rangle=\left\langle\psi(0t)\middle|\hat{G}\middle|\psi(0)\right\rangle \quad \forall t$$

L'invariance du Hamiltonien dans une symétrie continue est équivalente à la conservation d'une observable, le générateur infinitésimal de la symétrie.
C'est le théorème de Noether mentionné plus haut.
On trouve ici l'origine quantique des lois de conservation macroscopiques connues en mécanique classique. A l'échelle microscopique on utilise plus fréquemment le résultat suivant qui exprime aussi la conservation de $\hat{G}$:
Un état propre de $\hat{G}$ de valeur propre g reste état propre de $\hat{G}$ avec la même valeur propre au cours de son évolution. En effet

$$\hat{G}\left[\hat{U}(t',t)|\,g\rangle\right]=\hat{U}(t',t)\hat{G}|\,g\rangle=g\left[\hat{U}(t',t)|\,g\rangle\right]$$

puisque $\left[\hat{G},\hat{H}\right]=0 \Rightarrow \left[\hat{G},\hat{U}\right]=0$

Règles de sélection

Ce dernier résultat introduit une notion qui n'a pas d'équivalent en mécanique classique, la notion de règle de sélection : Si un système est préparé dans un état propre, de valeur propre g, d'un opérateur $\hat{G}$ qui commute avec le Hamiltonien, son évolution ne

peut le conduire dans un état de valeur propre $g' \neq g$ du même opérateur. Cette notion est utilisée plus fréquemment, sous une forme un peu différente, dans le cadre de la méthode des perturbations. La probabilité de transition d'un système d'un état $|i\rangle$ à un état $|k\rangle$ sous l'effet d'une perturbation représentée par un Hamiltonien $\hat{h}$ est proportionnelle au carré de l'élément de matrice $\langle k|\hat{h}|i\rangle$. Si $|i\rangle$ et $|k\rangle$ sont des états propres de $\hat{G}$

$$\langle k|\left[\hat{G},\hat{h}\right]|i\rangle = (g_k - g_i)\langle k|\hat{h}|i\rangle$$

La commutation de $\hat{h}$ et $\hat{G}$, $\left[\hat{G},\hat{h}\right]=0$ implique

- **Soit $g_i = g_k$: les valeurs propre sont égales**
- **Soit $\langle k|\hat{h}|i\rangle = 0$: la probabilité de transition est nulle**

Exemples

- **Rotations : Les rotations constituent un exemple particulièrement important de symétries continues. Dans le cas simple d'une particule sans spin représentée par une fonction d'onde, l'opérateur $\hat{L}_z$ s'écrit $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$ où ϕ est l'angle azimutal. La fonction d'onde de la particule qui a subi une rotation de α est**

$$\psi(\phi-\alpha) = \sum_n \frac{(-\alpha)^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial\psi^n}\psi(\phi) = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{i\alpha}{\hbar}\hat{L}_z\right)^n \psi(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{L}_z}\psi(\phi)$$

On calcule de la même façon les opérateurs de rotation autour des autres axes ; l'expression générale de l'opérateur de rotation d'un angle α autour d'un vecteur unitaire $\vec{n}$ est :

$$\boxed{e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\,\vec{n}.\hat{\vec{L}}}}$$

Le vecteur d'état d'un système de *n* particules est $|\psi\rangle = \bigotimes_{i=1}^{n} |\psi_i\rangle$. L'effet d'une rotation du système sur ce vecteur d'état est représenté par l'opérateur

$$\bigotimes_{i=1}^{n} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\,\hat{L}_{z_i}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\sum_{i=1}^{n}\hat{L}_{z_i}}$$

Si $\hat{H}$ est invariant par rotation autour de Oz, il commute avec l'opérateur $\hat{L}_z = \sum_{i=1}^{n}\hat{L}_{z_i}$.

L'invariance par rotation autour de Oz est équivalente à la conservation de la projection du moment cinétique total (moment cinétique orbital ici puisqu'il s'agit de particules sans spin).

Considérons un système préparé dans un état propre de tous les $\hat{L}_{z_i} : \bigotimes_{i=1}^{n} |m_i\rangle$ ($m_i\hbar$ est la valeur propre de $\hat{L}_{z_i}$). Une mesure ultérieure le trouve dans l'état $\bigotimes_{i=1}^{n} |m_i^{'}\rangle$. On doit avoir, si le Hamiltonien est invariant par rotation autour de Oz ,

$$\sum_{i=1}^{n} m_i = \sum_{i=1}^{n} m'_i$$

Une grandeur comme m qui prend des valeurs discrètes et dont la valeur, pour un système, est égale à la somme de ses valeurs pour les parties de ce système porte le nom de nombre quantique additif. En considérant des transformations qui ne font pas intervenir la situation du système dans l'espace (appelées symétries internes en physique des particules), on peut montrer que la charge électrique, le nombre baryonique, le nombre leptonique, le nombre muonique, etc… sont des nombres quantiques additifs.