

Chapitre 6

Symétries et lois de conservation

D'un point de vue très pratique, l'intérêt de l'étude des symétries d'un problème physique est de faciliter la résolution du problème (introduire les bonnes variables). Plus profondément, cela signifie que l'existence de symétries est associée à des *lois de conservation*. Trouver des constantes du mouvement est une première étape pour résoudre un problème physique. Par exemple, si nous pensons au problème de champ de force centrale en mécanique newtonienne, on doit résoudre trois équations différentielles non linéaires du second ordre couplées. C'est l'existence de constantes du mouvement (l'énergie et le moment cinétique) qui permet de se ramener à une unique équation différentielle du second ordre nettement plus facile à traiter.

Bien que la question des lois de conservation et des constantes du mouvement est celle qui va principalement nous intéresser, il faut mentionner le rôle constructif des symétries dans la physique moderne : les symétries (par exemple l'invariance sous le groupe de Lorentz) imposent des contraintes assez strictes qui sont exploitées pour la construction des théories.

6.1 Transformations de symétrie

Symétries du système.— Une transformation de symétrie est une transformation qui laisse un système invariant. Par exemple, si on considère un carré, nous trouvons 8 opérations qui le laissent invariant : les trois rotations $R_1 \equiv \mathcal{R}_{-\pi/4}$, $R_2 \equiv \mathcal{R}_{\pi/2}$ et $R_3 \equiv \mathcal{R}_{+\pi/4}$, les quatre réflexions S_1 , S_2 , Π_1 et Π_2 par rapport aux axes représentés sur la figure, et bien sûr l'identité I .

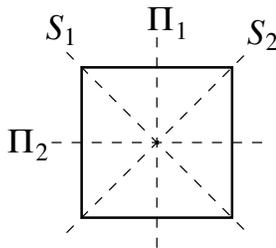


FIGURE 6.1 – Les réflexions par rapport aux quatre axes laissent le carré invariant.

L'ensemble des opérations de symétrie d'un système forme un *groupe*¹. Par exemple, nous donnons dans le tableau qui suit la table de multiplication des opérations de symétrie du carré (appelé le groupe C_{4v} [28] § 93).

¹Un groupe $G = \{g\}$ est un ensemble muni d'une loi de composition interne, *i.e.* si g_1 et $g_2 \in G$ alors $g_1 g_2 \in G$. La loi doit être associative : $(g_1 g_2) g_3 = g_1 (g_2 g_3)$. G doit contenir un élément neutre e vis à vis de la loi de composition ($ge = eg = g \forall g$) et tout élément de G doit posséder un inverse ($\forall g \in G, \exists g^{-1}$ t.q. $gg^{-1} = g^{-1}g = e$).

$g_1 \backslash g_2$	I	R_1	R_2	R_3	S_1	S_2	Π_1	Π_2
I	I							
R_1	R_1	R_2			Π_1	Π_2	S_2	S_1
R_2	R_2	R_3	I					
R_3	R_3	I	R_1	R_2	Π_2	Π_1	S_1	S_2
S_1	S_1	Π_2	S_2	Π_1	I			
S_2	S_2	Π_1	S_1	Π_2	R_2	I		
Π_1	Π_1	S_1	Π_2	S_2	R_1	R_3	I	
Π_2	Π_2	S_2	Π_1	S_1	R_3	R_1	R_2	I

TABLE 6.1 – Table de multiplication du groupe C_{4v} , groupe de symétrie du carré (tableau des $g_1 g_2$ avec g_1 en ordonnée et g_2 en abscisse). $g_2 g_1$ n'est indiqué que lorsque les deux transformations ne commutent pas.

✎ **Exercice 6.1 (**)** : Retrouver la table de multiplication du groupe de symétrie du carré. Établir la liste des sous-groupes.

Symétries des lois physiques. – Bien souvent nous sommes davantage intéressés par les symétries des lois physiques. Dans ce cas nous étudions les transformations qui laissent les propriétés physiques du système inchangées plutôt que le système lui-même. Par exemple, considérons la molécule de benzène (C_6H_6) dont les 6 atomes de carbone sont répartis suivant un hexagone. Les doubles liaisons peuvent se disposer suivant les deux configurations représentées sur la figure. On passe d'une configuration à l'autre grâce à l'action d'une réflexion par rapport à l'axe horizontal (réflexion par rapport à la ligne horizontale en pointillés, notée Π). Ces deux états ne sont donc pas invariants sous la réflexion, cependant les lois de la physique étant invariantes sous la réflexion (du moins l'interaction électromagnétique), les propriétés physiques sont rigoureusement les mêmes dans les deux configurations (en particulier les niveaux d'énergie de la molécule) :

- réflexion S : symétrie de la molécule (i.e. de l'état quantique)
- réflexion Π : symétrie des propriétés physiques de la molécule (i.e. de l'hamiltonien).

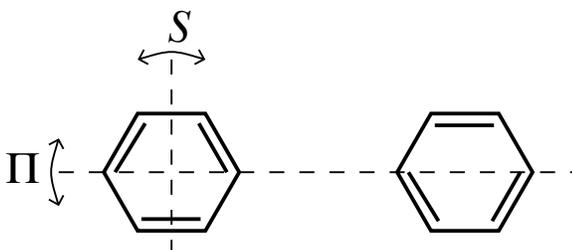


FIGURE 6.2 – Structure de la molécule de benzène C_6H_6 . On rappelle que le carbone forme 4 liaisons covalentes avec les atomes voisins. Les doubles barres indiquent les doubles liaisons entre atomes de carbone (les liaisons avec les atomes d'hydrogène ne sont pas représentées).

Symétries discrètes. – Si le nombre d'éléments du groupe est fini, ou un infini dénombrable², on parle de symétrie discrète. Les deux exemples que nous avons évoqués entrent dans ce cas de figure.

Symétries continues. – Si en revanche on considère le groupe de symétrie d'une sphère, celui-ci est constitué de l'ensemble des rotations pour des angles arbitraires (et des réflexions). C'est

²Comme le groupe de symétrie d'un cristal.

une situation où les transformations sont indicées par un (des) paramètre(s) réel(s) variant continûment dans un certain domaine³.

6.2 Symétries en mécanique quantique

Opérateurs associés aux transformations.— Une transformation associe à chaque état quantique $|\psi\rangle$ un nouveau vecteur d'état $|\psi'\rangle$, ce qui est réalisé à l'aide d'un opérateur⁴ \hat{U} :

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle \quad (6.1)$$

Une transformation correspond à un changement de point de vue (un changement de base) : par exemple une translation ou une rotation. Les propriétés physiques observables sont donc inchangées⁵, en particulier les probabilités $|\langle\varphi'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2$. Cela impose donc que $\hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$ (à une phase près qui pourrait être absorbée dans \hat{U}). Une **transformation est représentée par un opérateur unitaire** agissant dans l'espace de Hilbert⁶ (c'est le théorème de Wigner).

État symétrique.— Si le système se trouve dans un état $|\psi\rangle$ tel que la physique soit invariante sous une certaine transformation \hat{U} , alors $\hat{U}|\psi\rangle \propto |\psi\rangle$. Les états propres de l'opérateur sont donc les états symétriques

$$\boxed{\text{état } |\psi\rangle \text{ symétrique} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{U}|\psi\rangle = e^{i\alpha_\psi}|\psi\rangle} \quad (6.2)$$

L'amplitude de probabilité (la fonction d'onde) est uniquement affectée par une phase, mais la probabilité (la densité de probabilité) est invariante.

Dans le cas particulier où la phase est nulle, $\alpha_\psi = 0$, l'état est invariant sous la transformation.

Transformation des opérateurs (observables).— Les opérateurs sont également affectés par la transformation. Un opérateur \hat{A} est transformé selon

$$\hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger \quad (6.3)$$

ce qu'on vérifie en écrivant l'égalité des éléments de matrices : $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle = \langle\psi'|\hat{A}'|\chi'\rangle$.

Grandeur physique invariante.— Si une quantité physique est invariante sous une transformation, $A' = A$, l'opérateur la représentant commute avec l'opérateur de transformation

$$\boxed{A \text{ invariant} \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{A}, \hat{U}] = 0} \quad (6.4)$$

(par exemple la distance est invariante par rotation).

Nous discutons maintenant trois symétries discrètes qui jouent un rôle important en physique.

Parité.— Nous notons $\hat{\Pi}$ l'opérateur de parité défini par son action sur le ket $|\vec{r}\rangle$: $\hat{\Pi}|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle$ (Attention à ne pas confondre $\hat{\Pi}$ avec l'opérateur impulsion ! Pour éviter cette confusion,

³Dans le cas du groupe des rotations dans \mathbb{R}^3 , 3 paramètres réels sont nécessaires : un vecteur unitaire \vec{u} indiquant l'axe de la rotation et un angle $\theta \in [0, \pi]$. Ces paramètres peuvent être regroupés dans un vecteur $\vec{\theta} \stackrel{\text{def}}{=} \theta\vec{u}$ appartenant à la boule de rayon π . Notons toutefois que l'espace des paramètres a une topologie un peu particulière puisque deux points opposés sur la sphère doivent être identifiés.

⁴Pour éviter les confusions entre opérateurs et paramètres des transformations, les opérateurs portent un chapeau dans cette section.

⁵Rq : dans ce raisonnement, \hat{U} ne correspond pas nécessairement à une symétrie du problème.

⁶ Rappelons qu'un opérateur unitaire \hat{U} satisfait $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$. Un opérateur unitaire est diagonalisable à l'aide d'un autre opérateur unitaire ; ses valeurs propres sont de la forme $e^{i\theta_n}$. Autrement dit, \exists un opérateur $\hat{\Theta}$ hermitique t.q. $\hat{U} = e^{i\hat{\Theta}}$.

j'utiliserai parfois la notation Π pour la parité). Ainsi défini, $\hat{\Pi}$ s'interprète géométriquement comme l'inversion $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Il est évident que $\hat{\Pi}^2 = 1$, d'où nous déduisons que $\hat{\Pi}$ possède les valeurs propres ± 1 . L'opérateur est bien unitaire.

Opérateurs pairs et impairs.— Un opérateur \hat{A} est dit pair s'il commute avec la parité ($\hat{\Pi}\hat{A}\hat{\Pi} = \hat{A}$) et impair s'il anticommute ($\hat{\Pi}\hat{A}\hat{\Pi} = -\hat{A}$).

✎ **Exercice 6.2** (*): Montrer que les opérateurs position \hat{r} et impulsion \hat{p} sont impairs. En déduire la parité du moment cinétique orbital $\hat{\ell} = \hat{r} \times \hat{p}$.

Lois de conservation.— Une conséquence importante de la symétrie du problème sous une transformation \hat{U} , i.e. $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$, est la conservation au cours du temps de $\langle \psi(t) | \hat{U} | \psi(t) \rangle$ (on utilise pour cela le théorème d'Ehrenfest que nous avons vu au chapitre précédent).

Par exemple, dans le cas de la parité, $[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0$ traduit la conservation de la parité. Si l'état quantique possède initialement une parité bien définie : $\hat{\Pi}|\psi(0)\rangle = \pm|\psi(0)\rangle$ [i.e. sa fonction d'onde est paire ou impaire $\psi(-x, 0) = \pm\psi(x, 0)$], alors cette propriété est préservée au cours du temps : $\hat{\Pi}|\psi(t)\rangle = \pm|\psi(t)\rangle$ (i.e. $\psi(-x, t) = \pm\psi(x, t) \forall t$).

La violation de la parité.— Jusqu'aux années 50, les physiciens admettaient l'invariance des lois de la physique sous la parité (i.e. la commutation de l'hamiltonien décrivant les interactions fondamentales⁷ avec l'opérateur de parité). Cependant dans les années 50 des expériences de désintégration mettant en jeu l'interaction faible montrèrent des asymétries sous la parité. La violation de la parité par l'interaction faible fut suggérée par Lee & Yang en 1956, puis c'est en 1957 qu'elle fut démontrée expérimentalement par Wu *et al.*⁸ Une des manifestations la plus remarquable est l'existence d'un seul état d'hélicité⁹ des neutrinos ($h_\nu = -1$). Il est intéressant de noter qu'à l'échelle la plus élémentaire, **la nature est capable de distinguer la droite de la gauche.**

Conjugaison de charge.— L'opération de conjugaison de charge, notée C , consiste à transformer une particule en son antiparticule : $\hat{C}|particule\rangle = \pm|antiparticule\rangle$. Après avoir réalisé que la parité pouvait ne pas être conservée par l'interaction faible, les physiciens se sont demandés si la symétrie CP , combinant parité et conjugaison de charge, était conservée¹⁰. Cependant des expériences mettant en jeu des mésons étranges montrent une légère violation de la symétrie CP .

Renversement du sens du temps.— Une dernière symétrie discrète que nous discutons est la symétrie de renversement du temps, que nous notons T . Rappelons que classiquement, si nous considérons une trajectoire $\vec{r}(t)$, le renversement du temps correspond à $\vec{r}(t) \rightarrow \vec{r}(-t)$. Par conséquent l'impulsion est modifiée comme $\vec{p}(t) \rightarrow -\vec{p}(-t)$.

Quantiquement, si nous considérons un état quantique $\psi(\vec{r}, t)$ solution de l'équation de Schrödinger (1.16), quelle est la fonction d'onde renversée sous le sens du temps ? $\psi(\vec{r}, -t)$ n'est pas solution de (1.16), cependant $\psi^*(\vec{r}, -t)$ est bien solution de l'équation de Schrödinger. Nous déduisons donc que $\psi_{\text{renv}}(\vec{r}, t) \equiv (\hat{T}\psi)(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, -t)$. La violation de la symétrie T a été observée par Fitch & Watson en 1965.

✎ **Exercice 6.3** (*): Montrer que $\tilde{\psi}_{\text{renv}}(\vec{p}, t) = \tilde{\psi}^*(-\vec{p}, -t)$. Interpréter ce résultat.

⁷Rappelons qu'il existe quatre interactions fondamentales : l'interaction gravitationnelle, l'interaction électromagnétique, l'interaction forte entre hadrons, responsable de la cohésion des noyaux, et l'interaction faible qui se manifeste dans certaines désintégrations.

⁸Dans une expérience de désintégration d'un noyau de ^{60}Co polarisé. Pour davantage d'informations, on pourra consulter la discussion donnée dans [44].

⁹L'hélicité est définie comme la projection du moment cinétique intrinsèque, le spin (chapitre 8), sur l'impulsion. Dans le cas des photons, les deux états d'hélicité correspondent aux polarisations circulaires droite et gauche.

¹⁰Nous entendons par là que si une expérience, par exemple une désintégration, se produit avec une certaine probabilité, alors l'expérience symétrique sous la transformation se produit avec la même probabilité.

Théorème CPT.— Contrairement aux symétries P et CP , qui sont des symétries de certaines des interactions, la symétrie CPT sous la combinaison des trois symétries discrètes est beaucoup plus fondamentale et trouve son origine dans la théorie quantique (des champs) elle-même. Dans le langage de l'introduction : les symétries P et CP sont des symétries des modèles d'interaction (P pour l'électromagnétique par exemple) alors que CPT est une propriété de la métathéorie. L'observation de la non conservation de la parité au cours des processus d'interaction faible en 1957 a remis en cause la description de ceux-ci et permis d'affiner le modèle¹¹, en revanche une violation de la symétrie CPT remettrait tout le cadre en cause.

Symétries et dégénérescences.— Soit \hat{H} un hamiltonien symétrique sous la transformation représentée par l'opérateur unitaire \hat{U} , *i.e.* $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$. Soit $|\psi\rangle$ un état propre de l'hamiltonien, $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, non symétrique sous cette transformation (*i.e.* qui n'est pas état propre de \hat{U}). Alors $\hat{U}|\psi\rangle$ est un nouvel état propre de H avec la même valeur propre : $\hat{H}\hat{U}|\psi\rangle = \hat{U}\hat{H}|\psi\rangle = E\hat{U}|\psi\rangle$. Ceci montre que l'existence d'une symétrie dans le problème *peut* induire des dégénérescences dans le spectre des énergies (la condition nécessaire et suffisante est l'existence d'un état propre de \hat{H} non symétrique).

Classer les états à l'aide de leurs symétries.— Une conséquence intéressante de cette remarque est la possibilité de classer les états propres selon leurs propriétés de symétries. Enfonçons le clou : l'invariance du système sous une transformation de symétrie représentée par un opérateur unitaire \hat{U} se traduit par $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$. On peut donc construire une base commune d'états propres aux deux opérateurs, *i.e.* il est possible de trouver une base d'états propres de \hat{H} qui ne sont affectés par l'opérateur \hat{U} que par une phase (cette remarque trouvera sa meilleure illustration dans l'étude de l'atome d'hydrogène au chapitre 12).

Application.— Afin de comprendre plus précisément la remarque précédente, considérons le cas concret du puits de potentiel symétrique : $V(x) = 0$ pour $|x| > a/2$ et $V(x) = -V_0 < 0$ pour $|x| < a/2$. L'hamiltonien est invariant sous la réflexion Π .

- *États liés* $E < 0$.— Nous avons vu que le spectre est quantifié. Il existe un nombre N fini de solutions¹² $\varphi_0(x), \dots, \varphi_N(x)$ aux énergies E_0, \dots, E_N . Les états sont *non dégénérés* (propriété générale d'un potentiel confinant défini sur \mathbb{R}), ils sont donc nécessairement également des états propres de Π . En effet, nous avons montré dans l'exercice 2.20 que les fonctions d'onde sont alternativement paires et impaires : la fonction d'onde de l'état fondamental $\varphi_0(x)$ est paire, $\varphi_1(x)$ est impaire, $\varphi_2(x)$ est paire, etc.

- *États de diffusion* $E > 0$.— Dans ce cas les états stationnaires sont *dégénérés*. À E fixée, l'équation de Schrödinger admet deux solutions linéairement indépendantes. Il est naturel d'introduire un état $\varphi_g(x)$, correspondant à une onde incidente venant de la gauche : $\varphi_g(x) = e^{+ikx} + r e^{-ikx}$ pour $x < -a/2$ et $\varphi_g(x) = t e^{+ikx}$ pour $x > a/2$. Un autre état solution de l'équation de Schrödinger est l'état $\varphi_d(x)$, correspondant à une onde incidente venant de la droite¹³ : $\varphi_d(x) = t e^{-ikx}$ pour $x < -a/2$ et $\varphi_d(x) = e^{-ikx} + r e^{+ikx}$ pour $x > a/2$. Pris isolément, chacun des deux états n'est pas invariant sous la réflexion puisque : $\Pi|\varphi_g\rangle = |\varphi_d\rangle$. La commutation de H avec Π nous offre toutefois la possibilité de construire une autre base d'états stationnaires de diffusion, repérés par leurs propriétés sous la réflexion. On introduit deux états propres de H et Π , notés $|\Psi_{\pm}\rangle$, avec $\Pi|\Psi_{\pm}\rangle = \pm|\Psi_{\pm}\rangle$. Bien sûr : $|\Psi_{\pm}\rangle \propto |\varphi_g\rangle \pm |\varphi_d\rangle$.

¹¹Le modèle qui unifie les interactions électromagnétique et faible est la théorie de Glashow-Salam-Weinberg (*cf.* introduction).

¹²le nombre N dépend de la profondeur et de la largeur du puits; on a forcément $N \geq 1$. Quelle que soit la profondeur du puits il existe au moins un état lié.

¹³*A priori* on doit introduire deux nouvelles amplitudes de transmission et de réflexion t' et r' dans $\varphi_d(x)$. Toutefois on peut montrer que (i) $t = t'$ est une conséquence de l'invariance par renversement du temps et (ii) $r = r'$ est une conséquence de l'invariance sous la réflexion $\hat{\Pi}V(\hat{x})\hat{\Pi} = V(-\hat{x}) = V(\hat{x})$. Je laisse cette deuxième propriété à démontrer en exercice.

6.3 Groupes continus de transformations – Générateur infinitésimal

Soit un groupe de transformations $\{\hat{U}(\lambda)\}$ indicées par un paramètre réel λ appartenant à \mathbb{R} ou à un intervalle de \mathbb{R} . La valeur $\lambda = 0$ correspond à l'identité : $\hat{U}(0) = \mathbb{I}$. En utilisant la note de bas de page numéro 6 page 85, nous écrivons :

$$\hat{U}(\lambda) = e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{G}} \quad (6.5)$$

qui définit l'opérateur \hat{G} . Celui-ci est hermitique, $\hat{G} = \hat{G}^\dagger$. Il est appelé le *générateur infinitésimal* du groupe de transformations.

Rq : Il y a autant de générateurs que le groupe possède de paramètres réels indépendants.

6.3.1 Translations d'espace

Nous nous intéressons au groupe des translations, i.e. à l'ensemble des transformations $\{\hat{T}(a)\}$ avec $a \in \mathbb{R}$. Une translation spatiale de paramètre a déplace le système de x en x' :

$$x' = x + a \quad (6.6)$$

Son action sur les vecteurs de l'espace de Hilbert est donc définie par $\hat{T}(a)|x\rangle = |x+a\rangle$. Notons que si nous considérons l'action de la translation sur un état $|\psi'\rangle = \hat{T}(a)|\psi\rangle$, les fonctions d'onde correspondantes sont reliées par $\psi'(x') = \psi(x)$, c'est-à-dire $\psi'(x) = \psi(x-a)$.

▣ **Exercice 6.4** : Montrer que l'opérateur de position \hat{x} se transforme comme¹⁴

$$\hat{x}' = \hat{x} - a \quad (6.7)$$

Indication : considérer $\hat{T}(a)\hat{x}\hat{T}(a)^\dagger$.

▣ **Exercice 6.5** : Nous cherchons quel est le générateur du groupe des translations. Écrivons $\hat{T}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{G}}$. En faisant $a \rightarrow 0$ vérifier que $\hat{x}' = \hat{x} - \frac{i}{\hbar}a[\hat{G}, \hat{x}] + \frac{1}{2!}(-\frac{i}{\hbar}a)^2[\hat{G}, [\hat{G}, \hat{x}]] + O(a^3)$. En comparant à la relation précédente montrer que $\hat{G} = \hat{p}$, i.e. que le générateur infinitésimal des translations spatiales est l'opérateur d'impulsion :

$$\hat{T}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a} \quad (6.8)$$

▣ **Exercice 6.6** (*) : En remarquant que le développement de Taylor peut s'écrire sous la forme compacte :

$$f(x+a) = e^{a\frac{d}{dx}} f(x) \quad (6.9)$$

retrouver l'expression (6.8) de l'opérateur de translation.

Dans l'espace tridimensionnel, le groupe des translations possède trois générateurs infinitésimaux correspondant aux trois composantes de l'impulsion p_x , p_y et p_z . La commutation de ces trois opérateurs assure la commutativité de tous les éléments du groupe : le groupe des translations $\hat{T}(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{p}}$ est un groupe *abélien*. La loi de composition au sein du groupe est simple :

$$\hat{T}(\vec{a})\hat{T}(\vec{a}') = \hat{T}(\vec{a}')\hat{T}(\vec{a}) = \hat{T}(\vec{a} + \vec{a}') \quad (6.10)$$

¹⁴Attention aux signes ! Un système en x est translaté en $x' = x + a$, mais c'est le signe opposé qui apparaît pour la transformation de l'opérateur. Ceci provient de l'égalité $\langle x_1 | \hat{x} | x_2 \rangle = \langle x'_1 | \hat{x}' | x'_2 \rangle$.

6.3.2 Translations temporelles

Nous avons vu que l'opérateur d'évolution, défini par $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$, est donné par

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (6.11)$$

L'opérateur hamiltonien (l'énergie) est donc le générateur infinitésimal des translations temporelles.

6.3.3 Rotations

Dans le chapitre 8 nous verrons que le générateur infinitésimal des rotations est le moment cinétique. Les difficultés techniques qui vont apparaître sont liées la nature non abélienne du groupe des rotations.¹⁵

6.3.4 Transformations de Galilée

¹⁶ Les transformations de Galilée sont les translations d'espace-temps permettant de changer de référentiel inertiel. La transformation de paramètre \vec{v} agit sur les coordonnées d'espace-temps comme :

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{v}t \quad (6.12)$$

$$t' = t \quad (6.13)$$

Nous montrerons dans le problème à la fin de ce chapitre que les transformations de Galilée sont représentées dans l'espace de Hilbert par les opérateurs sont

$$\hat{U}_G(\vec{v}) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{v}\cdot(m\hat{r}-\hat{p}t)} = e^{\frac{i}{\hbar}m\vec{v}\cdot\hat{r}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{v}\cdot\hat{p}t} e^{-\frac{i}{2\hbar}m\vec{v}^2t} \quad (6.14)$$

où la seconde expression est obtenue en utilisant la formule de Glauber.¹⁷ Si $\phi_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ est une onde plane solution de l'équation de Schrödinger, on peut en particulier vérifier que $(\hat{U}_G(\vec{v})\phi_{\vec{p}})(\vec{r}, t) = \phi_{\vec{p}+m\vec{v}}(\vec{r}, t)$.

6.3.5 Loi de conservation – Théorème de Noether

Dans le cas d'une invariance sous un groupe continu de symétrie, la commutation de l'hamiltonien avec tous les éléments $\hat{U}(\lambda) = e^{-i\lambda\hat{G}/\hbar}$ du groupe implique la commutation de l'hamiltonien avec le générateur : $[\hat{H}, \hat{G}] = 0$. La quantité physique G , également appelée charge de Noether, est donc conservée au cours du temps :

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{G}|\psi(t)\rangle = 0 \quad (6.15)$$

Le théorème de Noether, qui associe à tout groupe continu une charge conservée, établit un lien très profond entre symétrie et loi de conservation.

¹⁵ Les rotations dans \mathbb{R}^3 ne commutent pas nécessairement (alors qu'elles commutent dans \mathbb{R}^2). Le groupe des rotations de \mathbb{R}^3 est un groupe *non abélien*. Nous verrons que cette propriété a son origine dans la non commutation des composantes de l'opérateur moment cinétique.

¹⁶ Une version plus détaillée de l'exercice est donnée dans l'annexe 6.4 page 94.

¹⁷ On utilise la **formule de Glauber** $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$ valable si $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$.
Propriété : si $[A, B] = \lambda\mathbb{I}$ où $\lambda \in \mathbb{C}$ on a $[f(A), B] = [A, B]f'(A)$.

Démonstration de la formule de Glauber : On introduit $G(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{tA} e^{tB}$ où t est un paramètre réel. $\frac{d}{dt}G(t) = AG(t) + G(t)B = (A+B+t[A, B])G(t)$ en utilisant la propriété donnée ci-dessus. On en déduit que $G(t) = e^{t(A+B) + \frac{1}{2}t^2[A, B]}$. On fait $t = 1$. QED.

La conservation de l'impulsion se comprend donc comme une conséquence de l'invariance sous le groupe des translations spatiales [si H est indépendant de \vec{r} en l'absence de potentiel $V(\vec{r})$]; nous relierons donc une **propriété géométrique** du système à la **conservation d'une grandeur physique**. La conservation de l'énergie est une conséquence de l'invariance sous le groupe des translations temporelles¹⁸ (lorsque le potentiel est indépendant du temps), etc.

Rq : Ni la notion de groupe de transformations, ou celle de générateur ou encore le théorème de Noether ne sont propres à la mécanique quantique. Les propriétés que l'on vient d'énoncer sont de portée beaucoup plus générale. On pourra se référer à l'ouvrage [13] (dont ces lignes sont inspirées).

Rq 2 : Points de vue actif et passif. – Lorsqu'on étudie les groupes continus de transformation, on peut adopter deux points de vue : un point de vue actif, que nous avons pris ici, où la transformation agit sur le système. Un point de vue passif où c'est le système de coordonnées qui est changé, tout en laissant le système invariant. L'expression de la transformation dans le point de vue passif est donc la même que celle de la transformation inverse du point de vue actif : par exemple $\mathcal{R}_{\theta}^{\text{passif}} = \mathcal{R}_{-\theta}^{\text{actif}}$. Le choix de l'un ou l'autre des points de vue dépend essentiellement du goût de l'auteur. Des signes peuvent donc différer d'un ouvrage à l'autre.

6.4 Le cristal unidimensionnel et le théorème de Bloch

Nous discutons une application des deux sections précédentes et revenons sur l'idée que les états stationnaires peuvent être classés à l'aide de leurs symétries. Nous étudions l'équation de Schrödinger stationnaire pour $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$ où le potentiel est périodique $V(x) = V(x+a)$. Cet hamiltonien gouverne la dynamique d'un **électron** dans un **cristal unidimensionnel**. Ce problème est très important pour la physique du solide puisqu'il nous fait caractériser la dynamique des électrons dans un cristal.

▣ **Exercice 6.7** : Vérifier explicitement que $[\hat{T}(na), \hat{H}] = 0$ pour $n \in \mathbb{Z}$.

Il est donc possible de trouver une base d'états stationnaires $|\psi_K\rangle$ symétriques sous les translations de na :

$$\hat{H}|\psi_K\rangle = E(K)|\psi_K\rangle \quad (6.16)$$

$$\hat{T}(a)|\psi_K\rangle = e^{-iK}|\psi_K\rangle \quad (6.17)$$

(théorème de Bloch). Nous avons indicé les états stationnaires à l'aide de la valeur propre e^{-iK} de l'opérateur de translation, *i.e.* à l'aide de leurs propriétés de symétries sous les translations $\hat{T}(na)$. Le paramètre K est appelé le *paramètre de Bloch*. Par définition il est compris dans l'intervalle $K \in]-\pi, +\pi]$ puisque d'après l'éq. (6.17) $|\psi_K\rangle$ et $|\psi_{K+2n\pi}\rangle$ décrivent le même état physique (en admettant que les valeurs propres de l'opérateur de translation sont non dégénérées). Cet intervalle $K \in]-\pi, +\pi]$ porte le nom de *1ère zone de Brillouin*.

Les conséquences physiques du théorème de Bloch sont importantes :

- D'une part les **états stationnaires sont des états délocalisés dans tout le cristal**, ce qui est explicite en réécrivant la relation (6.17) en représentation $\{|x\rangle\}$: $\langle x|\hat{T}(a)|\psi_K\rangle = \psi_K(x-a) = e^{-iK}\psi_K(x)$, où encore $\boxed{\psi_K(x+na) = e^{inK}\psi_K(x)}$.

¹⁸Voici donc une autre manière de comprendre d'où vient l'équation de Schrödinger : si un principe général nous dit que l'hamiltonien H est le générateur infinitésimal des translations temporelles, *i.e.* l'opérateur d'évolution temporelle a la forme (6.11). L'évolution du vecteur d'état est donc donnée par : $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$ ce qui conduit bien à l'équation de Schrödinger (5.1).