



HAL
open science

Cours de DEA sur les symétries

Franck Laloë

► **To cite this version:**

| Franck Laloë. Cours de DEA sur les symétries. DEA. 2006. cel-00092953

HAL Id: cel-00092953

<https://cel.hal.science/cel-00092953>

Submitted on 12 Sep 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

LES SYMETRIES EN MECANIQUE QUANTIQUE

NOTES DE COURS DE DEA

(DEA de Physique Quantique)

Ces notes de cours ont été rédigées au début des années 80, de façon assez informelle : le but poursuivi n'était pas de fournir un texte élaboré, mais plus modestement d'éviter aux étudiants d'avoir à prendre des notes et recopier des équations pendant les exposés. Il est clair que bien des points de leur rédaction mériteraient d'être repris. Cependant l'expérience a montré que, même bien imparfaites, ces notes pouvaient rendre des services; les étudiants de DEA en redemandant chaque année des tirages, elles ont donc été reproduites ici telles quelles, sans tentative de les corriger ou de les améliorer.

Le sujet des symétries, très large en mécanique quantique, n'est traité ici que de façon très partielle. L'éclairage est plutôt mis sur les groupes continus (groupes de Lie) et, par exemple, la théorie des représentations des groupes finis (théorie des caractères) n'est pas abordée, malgré son importance en physique du solide en particulier. On pourra se reporter aux références données à la fin de ce polycopié pour trouver des cours plus complets.

Le niveau initial de connaissances supposé du lecteur est celui du tome I de l'ouvrage de mécanique quantique écrit avec C. Cohen-Tannoudji et B. Diu, donc un niveau de second cycle. Les tirets dans la marge indiquent des passages qui peuvent être sautés en première lecture.

Une seconde partie contient un certain nombre de compléments, mais commence par un « chapitre zéro » qui reprend un certain nombre d'éléments des chapitres VI et VII sur le groupe des rotations ; à l'expérience en effet, il s'est avéré qu'il valait mieux commencer le cours par cet exemple concret, que de façon trop générale. La lecture de ce chapitre zéro est donc recommandée comme préliminaire à celle des autres chapitres.

F. Laloe

TABLE DES MATIERES

	<u>Pages</u>
<u>CHAP. I - LES TRANSFORMATIONS DE SYMETRIE EN MECANIQUE CLASSIQUE ET QUANTIQUE.....</u>	1
A. Introduction - Exemples de symétries fondamentales.....	2
B. Symétries en mécanique classique.....	5
C. Symétries en mécanique quantique.....	22
<u>CHAP. II - NOTIONS SUR LA THEORIE DES GROUPES.....</u>	27
A. Propriétés générales des groupes.....	28
B. Représentations linéaires d'un groupe.....	38
<u>CHAP. III - INTRODUCTION AUX GROUPES CONTINUS ET GROUPES DE LIE.....</u>	47
A. Propriétés générales.....	48
B. Exemples.....	64
C. Groupes de Galilée et de Poincaré.....	71
<u>CHAP. IV - TRANSFORMATIONS ET REPRESENTATIONS INDUITES DANS L'ESPACE DES ETATS.....</u>	81
A. Conditions imposées aux transformations dans l'espace des états.....	84
B. Théorème de Wigner.....	86
C. Transformation des observables.....	91
D. Représentations linéaires dans l'espace des états.....	92
<u>CHAP. V - LE GROUPE DES DEPLACEMENTS GEOMETRIQUES.....</u>	103
A. Rappels : propriétés classiques des déplacements.....	105
B. Opérateurs associés dans l'espace des états.....	117
C. Construction d'un espace des états particulièrement simple....	128
<u>CHAP. VI - REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU GROUPE DES ROTATIONS SPINEURS.....</u>	141
A. Représentations unitaires irréductibles du groupe des rotations.....	142
B. Particules de spin 1/2 ; spineurs.....	168
C. Composition des moments cinétiques.....	178
<u>CHAP. VII - TRANSFORMATION DES OBSERVABLES PAR ROTATION.....</u>	193
Introduction.....	194
A. Opérateurs vectoriels.....	199
B. Opérateurs tensoriels.....	206
C. Théorème de Wigner-Eckart.....	227
<u>CHAP. VIII - LE RENVERSEMENT DU TEMPS.....</u>	257
A. Renversement du temps en mécanique classique.....	258
B. Renversement du temps en mécanique quantique.....	264
C. Forme explicite de l'opérateur renversement du temps.....	277
D. Applications.....	282
<u>CHAP. IX - GROUPES $SU(2)$ et $SU(3)$.....</u>	298

CHAPITRE I

LES TRANSFORMATIONS DE SYMÉTRIE

EN MÉCANIQUES CLASSIQUE ET QUANTIQUE

A - INTRODUCTION - EXEMPLES DE SYMETRIES FONDAMENTALES.....	p. 2
B - SYMETRIES EN MECANIQUE CLASSIQUE.....	p. 5
1 - Equations de Newton.....	p. 5
2 - Equations de Lagrange.....	p. 7
a) Formalisme général.....	p. 7
b) Constantes du mouvement ; théorème de Noether.....	p. 10
3 - Equations de Hamilton.....	p. 17
a) Formalisme général.....	p. 17
b) Crochets de Poisson.....	p. 18
C - SYMETRIES EN MECANIQUE QUANTIQUE.....	p. 22
1 - Quantification.....	p. 22
2 - Transformations de symétrie.....	p. 23
3 - Conséquences générales.....	p. 25

A - INTRODUCTION - Exemples de symétries fondamentales

Considérons un système physique quelconque qui, à l'instant t_0 , se trouve dans l'état $S(t_0)$. Pour un système classique constitué par exemple de N particules, $S(t_0)$ désignera les $2N$ valeurs à l'instant t_0 des positions et vitesses des particules. Après évolution, le système se trouve à l'instant t dans l'état $S(t)$.

Introduisons maintenant une transformation \mathcal{G} qui, au système dans un état S quelconque, fasse correspondre un autre système dans un état S' (figure I-1). Les types de transformations \mathcal{G} que l'on peut imaginer sont évidemment multiples : dilatation dans un facteur 2 des distances entre particules, rotation des positions et des vitesses d'un angle donné (fixe ou dépendant du temps), changement de signe des charges électriques, etc..

L'application de la transformation à une suite quelconque d'états $S(t)$, décrivant un mouvement possible du système, donne une autre suite d'états $S'(t)$. Par définition, nous dirons que \mathcal{G} est une transformation de symétrie si la suite des états $S'(t)$ décrit aussi un mouvement possible du système, c'est-à-dire un système régi par les mêmes lois d'évolution que le système initial ; cette condition doit être satisfaite quel que soit l'état initial $S(t_0)$ choisi.

En d'autres termes, les transformés par \mathcal{G} de tous les mouvements possibles sont également des mouvements possibles.

Une autre façon de présenter les choses est de dire que, sur la figure I-1, on peut ^{à tout instant t} "refermer le carré" par une transformation \mathcal{G} , et ceci quel que soit le mouvement considéré.

La définition d'une transformation de symétrie \mathcal{G} ne concerne donc pas seulement un état instantané $S(t)$ du système à un instant donné (comme par exemple lorsque l'on dit que telle figure géométrique est symétrique ou pas) mais l'ensemble des états par lesquels le système passe successivement lorsque le temps s'écoule. On peut d'ailleurs considérer des transformations \mathcal{G} qui ne soient pas elles-mêmes instantanées (translations ou dilatations de l'échelle des temps, etc)

Reprenons les quelques exemples de transformations cités plus haut. L'opération de dilatation ^{d'espace} dans un facteur 2 n'est pas en général une transformation de symétrie de la mécanique classique, pas plus que celle associée à une rotation du système d'un angle proportionnel au temps

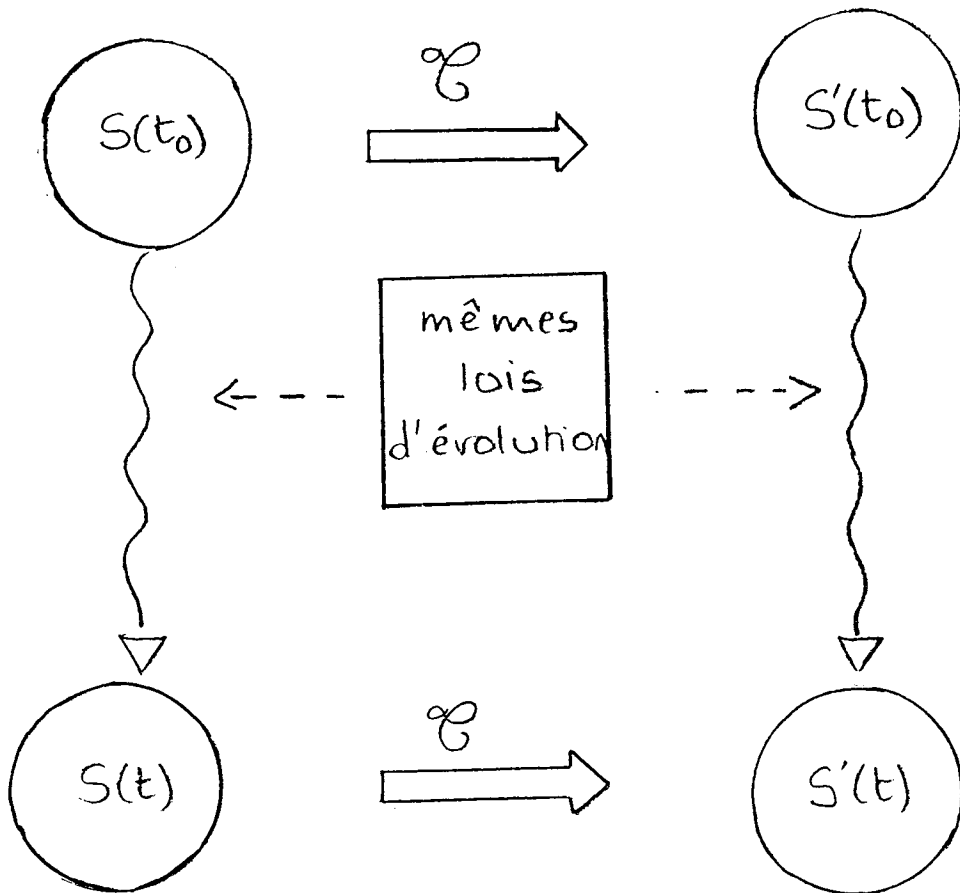


Fig I-1

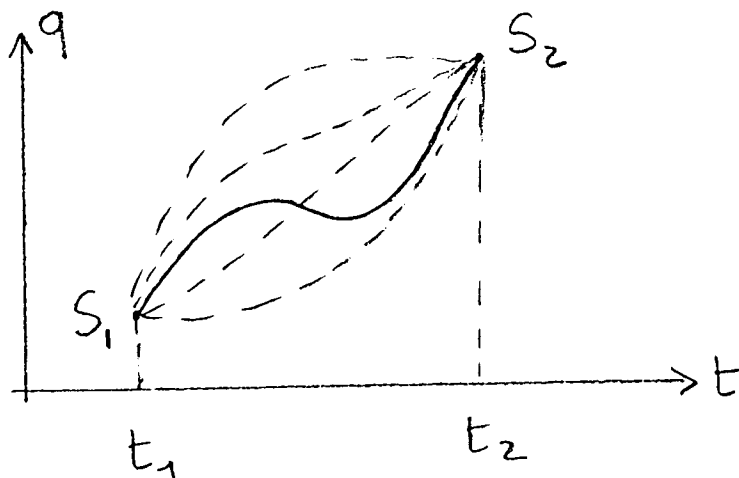


Fig I-2

(passage dans un référentiel non galiléen où les effets d'inertie se manifestent différemment). Par contre, et nous y reviendrons en détail, l'opération de translation ou de rotation d'une quantité fixe d'un système physique isolé est une opération de symétrie (homogénéité et isotropie de l'espace).

Citons un certain nombre de symétries, dites fondamentales :

- les translations dans l'espace
- les rotations dans l'espace
- les translations dans le temps
- les transformations "relativistes" de Lorentz (ou de Galilée)
- P (parité, c'est-à-dire symétrie ^{despace} par rapport à l'origine),

C (conjugaison de charge) et T (renversement du temps)

- l'échange entre particules identiques.

Parmi ces transformations, toutes sont actuellement considérées comme transformations de symétrie pour l'ensemble des lois physiques régissant les systèmes isolés, sauf P, C et T ⁽¹⁾ ⁽²⁾. Ces dernières ne sont transformations de symétrie que si les interactions considérées dans le système sont d'origine électromagnétique (ou forte), mais pas si les interactions faibles jouent un rôle.

(¹) Bien sûr, il faut aussi exclure les transformations de Galilée, puisqu'elles ne sont transformations de symétrie que dans la mesure où elles constituent des approximations des transformations de Lorentz, c'est-à-dire à la limite dite "non relativiste" (toutes les vitesses considérées \ll vitesse de la lumière c , toutes les distances considérées $\Delta x \ll c \times \Delta t$).

(²) Si les translations dans le temps n'étaient pas, au moins de façon approchée, transformations de symétrie par les systèmes isolés, les fondements de la physique ou même de la méthode scientifique elle-même seraient bouleversés : la même expérience faite aujourd'hui ou demain donnerait des résultats complètement différents.

Il existe cependant certaines théories cosmologiques où des constantes physiques "fondamentales" changent (Dirac) au fur et à mesure de la dilatation de l'univers (cf par ex. La Recherche, p. 166, février 77) ce qui change le groupe de transformations laissant invariantes les lois physiques.

On peut remarquer de même que l'invariance par translation de l'évolution d'un système isolé serait une notion difficile à abandonner complètement (elle constitue presque la définition de ce que l'on entend par "système physique isolé").

Dans la mesure où, à l'heure actuelle, ces symétries sont considérées comme devant être satisfaites par toutes les lois physiques quelles qu'elles soient, connues ou à découvrir, on peut dire qu'elles fournissent des "superlois" (Wigner) de caractère particulièrement fondamental. On comprend donc l'importance qui s'attache à leur étude.

Remarques :

(i) Si deux transformations \mathcal{G} et \mathcal{G}' sont de symétrie, leur produit $\mathcal{G}'\mathcal{G}$ a la même propriété : on s'attend à voir apparaître la structure de groupe pour les ensembles de transformations de symétrie.

(ii) Dans le cas de la symétrie T (renversement du temps), il faut en réalité changer sur la figure I-1 $S'(t)$ en $S'(-t)$ et renverser le sens de la flèche ondulée de droite qui symbolise l'évolution du système. Nous y reviendrons au chapitre IX.

(iii) Nous avons dit que l'ensemble des translations et rotations était constitué de transformations de symétrie pour un système physique isolé. Pour un système physique soumis à l'action d'un potentiel extérieur, (donc non isolé), certaines de ces transformations peuvent éventuellement être encore de symétrie. C'est par exemple le cas des rotations autour de l'origine 0 pour un système soumis à l'action d'un potentiel central autour de 0.

B - SYMETRIES EN MECANIQUE CLASSIQUE

En mécanique classique, nous allons voir que les symétries imposent certaines formes aux lois physiques et, de plus, donnent des constantes du mouvement. Commençons par un exemple particulièrement simple, traité dans le cadre des équations de Newton ($\vec{F} = m\vec{\gamma}$).

1 - Equations de Newton

Considérons deux particules de masses m_1 et m_2 , de positions \vec{r}_1 et \vec{r}_2 , interagissant avec un potentiel $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$. Les équations du mouvement sont :

$$\begin{cases} m_1 \ddot{\vec{r}}_1 = \vec{f}_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = -\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} U(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) \\ m_2 \ddot{\vec{r}}_2 = \vec{f}_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = -\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} U(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) \end{cases} \quad (I-1)$$

(où $\ddot{\vec{r}}_1$ désigne la dérivée seconde de \vec{r}_1 et $\vec{\nabla}_{\vec{r}_1}$ le gradient par rapport aux coordonnées \vec{r}_1).

▪ Invariance par translation

.....
 Soit \vec{a} un vecteur constant. Si, dans toute transformation :

$$\begin{cases} \vec{r}_1 \xrightarrow{\mathcal{G}} \vec{r}_1 + \vec{a} \\ \vec{r}_2 \xrightarrow{\mathcal{G}} \vec{r}_2 + \vec{a} \end{cases} \quad \text{quelconque} \quad \text{toute} \quad \text{transformation} \quad (I-2)$$

(qui ne change pas les accélérations), on obtient à partir d'un mouvement possible un autre mouvement possible (avec le même potentiel U), c'est que :

$$\begin{cases} \vec{f}_1(\vec{r}_1 + \vec{a}, \vec{r}_2 + \vec{a}; t) = \vec{f}_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) \\ \vec{f}_2(\vec{r}_1 + \vec{a}, \vec{r}_2 + \vec{a}; t) = \vec{f}_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) \end{cases} \quad (I-3)$$

On voit facilement que U est alors nécessairement une fonction de $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ seulement :

$$U(\vec{r}_1 + \vec{a}, \vec{r}_2 + \vec{a}; t) = U(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) \quad (I-4)$$

Ceci nous impose donc une limitation sur les potentiels possibles (forme des lois physiques) :

$$U \equiv U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2; t) \quad (I-5)$$

De plus, on vérifie immédiatement que $\vec{f}_1 = -\vec{f}_2$ ce qui entraîne :

$$\frac{d}{dt} [m_1 \dot{\vec{r}}_1 + m_2 \dot{\vec{r}}_2] = 0 \quad (I-6)$$

Donc, l'impulsion totale est une constante du mouvement si les translations sont transformations de symétrie.

▪ Invariance par rotation

.....
 Si, de plus, les rotations autour d'un point fixe 0 sont des transformations de symétrie, il apparaît d'autres propriétés. On voit sans difficultés que le champ de forces \vec{f}_1 (ou \vec{f}_2), considéré comme fonction de $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, est invariant dans toute rotation de \vec{r} autour de 0. C'est donc un champ central : \vec{f}_1 est parallèle à $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ et ne dépend que de \vec{r} .
 Par suite :

$$U \equiv U(|\vec{r}|; t) \quad (I-7)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [m_1 \vec{r}_1 \times \dot{\vec{r}}_1 + m_2 \vec{r}_2 \times \dot{\vec{r}}_2] &= \vec{r}_1 \times \vec{f}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{f}_2 \\ &= (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \vec{f}_1 = 0 \end{aligned} \quad (I-8)$$

La conservation dans le temps du moment cinétique total par rapport à un point 0 découle donc de l'invariance de l'ensemble des mouvements possibles par rotation autour de 0.

▪ Translation dans le temps

.....
 La correspondance entre les mouvements est alors donnée par :

$$\begin{cases} \vec{r}_1(t) = \vec{r}_1(t - b) \\ \vec{r}_2(t) = \vec{r}_2(t - b) \end{cases} \quad (I-9)$$

où b est une constante. On aura ainsi une transformation de symétrie si :

$$\begin{cases} \vec{f}_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t - b) = \vec{f}_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) \\ \vec{f}_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t - b) = \vec{f}_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) \end{cases} \quad \forall b \quad (I-10)$$

Par suite :

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t - b) = U(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) + G(t, b) \quad (I-11)$$

Pour éliminer la fonction G, sans signification physique, prenons comme énergie potentielle :

$$W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t = 0) \quad (I-12)$$

Les forces \vec{f}_1 et \vec{f}_2 dérivent du potentiel W aussi bien que de U, puisque \vec{f}_1 et \vec{f}_2 sont indépendantes du temps. Donc, les mouvements possibles peuvent être décrits par un potentiel indépendant du temps :

$$\frac{\partial}{\partial t} [W(\vec{r}_1, \vec{r}_2)] = 0 \quad (I-13)$$

Calculons alors :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [m_1 \dot{\vec{r}}_1^2 + m_2 \dot{\vec{r}}_2^2] &= 2(\dot{\vec{r}}_1 \cdot \vec{f}_1 + \dot{\vec{r}}_2 \cdot \vec{f}_2) \\ &= -2 \frac{d}{dt} W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \end{aligned} \quad (I-14)$$

Compte tenu de (I-13), on a :

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{m_1}{2} \dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{m_2}{2} \dot{\vec{r}}_2^2 + W \right] = 0 \quad (I-15)$$

L'énergie totale (cinétique et potentielle) est donc une constante du mouvement.

Nous n'irons pas plus loin dans l'étude des symétries du point de vue des équations de Newton. En effet, ces dernières ne peuvent pas être utilisées pour quantifier un système physique et il faut utiliser soit le formalisme lagrangien, soit le formalisme hamiltonien.

2 - Equations de Lagrange

a) Formalisme général ⁽³⁾

Le système est décrit par un ensemble de coordonnées généralisées q_i ($i = 1, 2, \dots, N$) ; il dépend éventuellement d'un certain nombre de paramètres λ_α (masses des particules, charges, etc). On suppose qu'il lui est associée une fonction L, dite fonction de Lagrange, ou encore lagrangien :

$$L \equiv L(q_i, \dot{q}_i; t; \lambda_\alpha) \quad (I-16)$$

telle que les équations du mouvement soient données par les équations de Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad [i = 1, 2, \dots, N] \quad (I-17)$$

⁽³⁾ note : voir page suivante.

Dans ces équations, les \dot{q}_i désignent les dérivées par rapport au temps des q_i . Rappelons que la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction $K(q_i, \dot{q}_i; t)$ est par définition :

$$\frac{d}{dt} K(q_i, \dot{q}_i; t) = \frac{\partial K}{\partial t} + \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial K}{\partial q_i} + \sum_i \ddot{q}_i \frac{\partial K}{\partial \dot{q}_i} \quad (I-18)$$

Comme les équations de Newton, les équations de Lagrange sont donc du second ordre par rapport au temps.

On sait qu'elles sont équivalentes à un principe de moindre action qui donne, d'un point de vue global (et non local dans le temps), les mouvements possibles du système physique considéré. Ce principe indique que, parmi tous les mouvements a priori possibles du système qui le conduisent à l'instant t_1 de l'état S_1 (symbolisant l'ensemble des q_i) vers l'état S_2 à l'instant t_2 , le mouvement effectivement réalisé (satisfaisant aux équations du mouvement) est celui qui rend stationnaire l'action :

$$\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} dt \quad L[q_i(t), \dot{q}_i(t); t] \quad (I-19)$$

Sur la figure I-2, où l'ensemble des coordonnées q_i est symbolisé par l'axe des ordonnées, on a représenté plusieurs chemins a priori possibles en tiretés et, en traits pleins, le chemin effectivement suivi par le système qui minimise \mathcal{A} .

Les avantages du point de vue lagrangien tiennent principalement à sa très grande généralité, les équations d'évolution de beaucoup de systèmes physiques pouvant prendre la forme (I-17) avec un choix convenable de la fonction L . De plus, quelles que soient les variables q_i choisies pour décrire l'état du système (par exemple, coordonnées sphériques au lieu de cartésiennes, etc) les équations d'évolution gardent toujours la même forme (I-17), ce qui n'est pas le cas des équations de Newton.

Pour un système de particules interagissant avec un potentiel $V(\vec{r}_n; t)$, on peut prendre le lagrangien :

$$L = T(\vec{r}_n) - V(\vec{r}_n; t) \quad (I-20)$$

← Ici, les 3 composantes des vecteurs position \vec{r}_n des particules (de masse m_n) jouent le rôle des q_i , et T est l'énergie cinétique :

$$T = \frac{1}{2} \sum_n m_n \dot{\vec{r}}_n^2 \quad (I-21)$$

(³) Pour un exposé plus détaillé, voir par l'exemple l'appendice III de la référence 13, ou un livre de mécanique analytique classique.

Dans ce cas, les forces dérivent d'un potentiel mais le formalisme lagrangien s'applique de façon plus générale. On peut par exemple calculer l'évolution d'un système constitué de particules interagissant avec un champ électromagnétique donné, décrit par des potentiels scalaire V et vecteur \vec{A} . On vérifie alors qu'un lagrangien possible est :

$$L = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} m_n \dot{\vec{r}}_n^2 + q_n \vec{A}(\vec{r}_n) \cdot \dot{\vec{r}}_n - q_n V(\vec{r}_n) \right\} \quad (I-22)$$

(q_n désigne ici la charge électrique de la $n^{\text{ième}}$ particule).

Comme il a été rappelé plus haut, bien d'autres équations du mouvement (les équations de Maxwell par exemple) peuvent être obtenues à partir d'équations de Lagrange et d'un principe variationnel.

Remarque :

Il ne faut pas croire qu'un lagrangien unique correspond aux équations du mouvement d'un système physique donné. Il existe en réalité de nombreux lagrangiens "équivalents". Par exemple, si K est une fonction quelconque $K(q_i, t)$, on peut à partir du lagrangien L constituer un autre lagrangien L' :

$$L'(q_i, \dot{q}_i ; t) = L(q_i, \dot{q}_i ; t) + \frac{d}{dt} K(q_i ; t) \quad (I-23)$$

[on notera que K ne doit pas dépendre des \dot{q}_i sinon, dans L' , s'introduiraient des dérivées secondes des q_i , ce qui n'est pas possible pour un lagrangien].

En effet, la variation δL du lagrangien s'écrit :

$$\delta L = L' - L = \frac{\partial K}{\partial t} + \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial K}{\partial q_j} \quad (I-24)$$

et

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \delta L \right) = \frac{d}{dt} \frac{\partial K}{\partial q_i} = \frac{\partial^2 K}{\partial q_i \partial t} + \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial^2 K}{\partial q_i \partial q_j} \\ \frac{\partial}{\partial q_i} \delta L = \frac{\partial^2 K}{\partial q_i \partial t} + \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial^2 K}{\partial q_i \partial q_j} \end{cases} \quad (I-25)$$

de sorte que les contributions de δL aux deux membres de (I-17) sont égales. Une autre façon de vérifier que L et L' sont équivalents est de remarquer que la variation correspondante d'action s'écrit :

$$\delta \mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{dK}{dt} = K[q_i(t_2) ; t_2] - K[q_i(t_1) ; t_1] \quad (I-26)$$

$\delta \mathcal{A}$ ne dépend pas du chemin suivi par le système entre S_1 et S_2 mais uniquement de S_1 , S_2 et t_1 , t_2 . Par suite, \mathcal{A} et $\mathcal{A} + \delta \mathcal{A}$ seront toujours stationnaires pour les mêmes chemins (*).

(*) note : voir page suivante.

b) Constantes du mouvement ; théorème de Noether

α - Quelques cas simples :

Les propriétés d'invariance de L peuvent se traduire par l'existence de constantes du mouvement. Par exemple, si le lagrangien (I-20) est invariant par ^{toute} translation de l'ensemble des particules d'une même quantité \vec{a} $\left[\vec{r}_n \Rightarrow \vec{r}_n + \vec{a} \right]$, alors :

$$\sum_n \vec{\nabla}_{\vec{r}_n} L = 0 \quad (I-27)$$

entraîne d'après (I-17) :

$$\frac{d}{dt} \sum_n \vec{p}_n(t) = 0 \quad (I-28)$$

où les \vec{p}_n sont définis par :

$$\vec{p}_n(t) = \vec{\nabla}_{\dot{\vec{r}}_n} L = m \dot{\vec{r}}_n(t) \quad (I-29)$$

(4) On laisse parfois entendre que, réciproquement, deux lagrangiens équivalents diffèrent nécessairement par une dérivée totale par rapport au temps. Une telle affirmation n'est pas exacte.

Un premier contre-exemple évident est donné par la possibilité de multiplier le lagrangien par une constante quelconque. Mais l'ensemble des lagrangiens équivalents est en général bien plus vaste.

Par exemple, pour une particule libre, on peut aussi bien prendre L ou L' donnés par :

$$L = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2$$

$$L' = \alpha \dot{x}^2 + \beta \dot{y}^2 + \gamma \dot{z}^2$$

où α, β et γ sont des constantes quelconques.

Il serait intéressant de trouver une procédure générale pour générer tous les lagrangiens équivalents à un lagrangien donné.

Ceci permettrait d'obtenir des conditions nécessaires et suffisantes pour qu'une transformation \mathcal{G} donnée soit transformation de symétrie.

De plus, il serait possible d'examiner si les quantifications à partir de ces lagrangiens conduisent aux mêmes résultats physiques. Ce problème ne semble pas actuellement avoir été résolu.

La conservation de l'impulsion totale est donc une conséquence de l'invariance du lagrangien par translation dans l'espace ⁽⁵⁾. De même si L est invariant par translation dans le temps :

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0 \quad (I-30)$$

alors, en définissant la fonction H par :

$$H(t) = \sum_n \dot{\vec{r}}_n(t) \cdot \vec{p}_n(t) - L \left[\vec{r}_n(t), \dot{\vec{r}}_n(t) \right] \quad (I-31)$$

on vérifie facilement d'après (I-17) et (I-29) que, lors de l'évolution du système, H reste constant :

$$\frac{d}{dt} H(t) = \sum_n \left\{ \ddot{\vec{r}}_n \cdot \vec{p}_n + \dot{\vec{r}}_n \cdot \vec{\nabla}_{\dot{\vec{r}}_n} L - \dot{\vec{r}}_n \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_n} L - \ddot{\vec{r}}_n \cdot \vec{p}_n \right\} = 0 \quad (I-32)$$

L'invariance par translation dans le temps entraîne donc que l'énergie est une constante du mouvement.

Mais l'invariance des équations du mouvement dans une transformation \mathcal{C} n'entraîne pas nécessairement que L doit être invariant dans cette transformation. Une autre possibilité (cf note ⁽⁴⁾) est que l'effet de \mathcal{C} soit d'ajouter à L une dérivée totale par rapport au temps. Nous allons voir que, dans ce cas également, l'invariance de la transformation \mathcal{C} se traduit par l'existence d'une constante du mouvement.

β - Démonstration générale :

Considérons donc, de façon générale, une transformation \mathcal{C} définie par son action sur des coordonnées généralisées q_i d'un système quelconque :

$$q_i \xrightarrow{\mathcal{C}} q_i + \delta q_i \quad (I-33)$$

Nous supposons que la transformation \mathcal{C} est infinitésimale et que :

$$\delta q_i = \delta \varepsilon f_i(q_j, \dot{q}_j; t) \quad (I-34a)$$

⁽⁵⁾ La conservation de l'impulsion totale résulte de l'invariance de L si toutes les particules sont translatées d'une même quantité. Cette invariance est alors valable quelles que soient les interactions entre particules.

Une invariance de L par translation d'une des particules entraînerait la conservation de son impulsion particulière (particule sans interaction).

où $\delta\epsilon$ est une quantité infiniment petite. Les variations $\delta\dot{q}_i$ des dérivées temporelles des q_i sont données par :

$$\delta\dot{q}_i = \delta\epsilon g_i(q_j, \dot{q}_j, \ddot{q}_j; t) \quad (I-34b)$$

Par définition de $\delta\dot{q}_i$:

$$\frac{d}{dt}(q_i + \delta q_i) = \dot{q}_i + \delta\dot{q}_i \quad (I-35)$$

de sorte que :

$$g_i = \frac{d}{dt} f_i = \frac{\partial f_i}{\partial t} + \sum_j (\dot{q}_j \frac{\partial f_i}{\partial q_j} + \ddot{q}_j \frac{\partial f_i}{\partial \dot{q}_j}) \quad (I-36)$$

← (On notera la dépendance possible de g_i en \ddot{q}_j , contrairement à f_i). Dans la transformation \mathcal{G} , la variation infinitésimale δL du lagrangien s'écrit :

$$\begin{aligned} \delta L &= \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta\dot{q}_i \right) \\ &= \delta\epsilon \sum_i \left(f_i \frac{\partial L}{\partial q_i} + g_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \end{aligned} \quad (I-37)$$

Si maintenant la transformation \mathcal{G} est choisie de façon que δL soit proportionnel à la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction Λ :

$$\delta L = \delta\epsilon \frac{d}{dt} \Lambda \quad (I-38)$$

Le théorème de Noether dit que la fonction

$$F = \sum_i f_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \Lambda \quad (I-39)$$

est une constante du mouvement [dF/dt est nul le long de toutes les trajectoires possibles du système considéré]. En effet, la dérivée totale par rapport au temps de $\sum_i f_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ est :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\sum_i f_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] &= \sum_i g_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + f_i \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \\ &= \sum_i \left(g_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + f_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \right) \end{aligned} \quad (I-40)$$

← (La seconde égalité, obtenue grâce aux équations du mouvement, étant vérifiée le long des trajectoires possibles du système). Donc, d'après (I-37) :

$$\frac{d}{dt} \left[\sum_i f_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] = \frac{\partial L}{\partial \epsilon} \quad (I-41)$$

et, compte tenu de (I-38), on obtient immédiatement $dF/dt = 0$.

Remarques :

(i) Si on peut directement (sans utiliser les équations du mouvement) mettre l'expression (I-37) de δL sous la forme d'une dérivée totale par rapport au temps d'une fonction $\Lambda (q_i ; t)$, les lagrangiens L et $L + \delta L$ sont équivalents. \mathcal{L} est alors transformation de symétrie au sens défini plus haut. Rappelons (cf note (4)) que, réciproquement, \mathcal{L} peut être transformation de symétrie sans que nécessairement $\delta L = d \Lambda(q_i, t)/dt$

Notons cependant que, si les fonctions f_i choisies dépendent des \dot{q}_j , il n'est jamais possible de mettre directement δL sous la forme $d\Lambda (q_i ; t)/dt$. En effet, on voit sur (I-36) que δL dépendait des \ddot{q}_j , ce qui ne peut être le cas de $d\Lambda (q_i ; t)/dt$.

(ii) Il peut aussi arriver que l'on ait à utiliser les équations de Lagrange pour passer de (I-37) à (I-38). Par exemple, on peut s'en servir pour exprimer les \ddot{q}_j qui apparaissent en général dans (I-37), en fonction des q_i et \dot{q}_i ; on peut alors chercher une fonction $\Lambda (q_i, t)$ indépendante des \dot{q}_i (dont la dérivée totale par rapport au temps ne contient pas les \ddot{q}_i).

Rien n'empêche non plus de considérer des fonctions Λ qui dépendent des \dot{q}_i (voir en particulier le premier exemple donné ci-dessous). On notera cependant que, dans ce cas, la fonction $L + \epsilon \partial \Lambda / \partial t$ ne peut plus être considérée comme un lagrangien.

(iii) Le théorème de Noether n'a bien sûr d'intérêt que si la constante du mouvement F n'est pas triviale, identiquement nulle par exemple !

Si on se place dans le cas envisagé dans la remarque (i) ci-dessus où on a réussi à écrire δL sous la forme (I-38) avec $\Lambda \equiv \Lambda (q_i ; t)$ (indépendant des \dot{q}_i), la constante du mouvement F est en général intéressante car elle dépend des \dot{q}_i par l'intermédiaire des $\partial L / \partial \dot{q}_i$ et éventuellement des f_i .

Par contre, si on accepte les fonctions $\Lambda (q_i, \dot{q}_i, t)$, le risque est plus grand de n'obtenir aucune information. Un cas évident est celui où on prend des fonctions f_i absolument quelconques, et on écrit δL sous la forme (I-38) en choisissant la fonction $\Lambda = \sum_i f_i \partial L / \partial \dot{q}_i$ (c'est toujours possible puisque (I-41) exprime simplement que le long des trajectoires, δL est toujours proportionnel à la dérivée totale de cette fonction Λ). Le résultat obtenu est alors $F \equiv 0$.

γ - Exemples

Donnons quelques exemples simples d'application du théorème de Noether. Considérons tout d'abord un système quelconque dont le lagrangien L ne dépend pas explicitement du temps. Comme loi de transformation, choisissons :

$$q_i(t) \xrightarrow{\mathcal{G}} q_i(t + \delta t) \quad (I-42)$$

où δt est une constante (qui joue le rôle des ϵ introduits plus haut). L'opération \mathcal{G} décale dans le temps l'évolution du système (le décalage étant $-\delta t$) ; c'est donc une translation dans le temps. Comme δt est infinitésimal, on peut écrire :

$$\delta q_i(t) = \dot{q}_i \delta t$$

de sorte que :

$$\begin{cases} f_i &= \dot{q}_i \\ g_i &= \ddot{q}_i \end{cases} \quad (I-43)$$

Par ailleurs :

$$\delta L = \delta t \left[\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i} + \ddot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i} \right] = \delta t \frac{dL}{dt} \quad (I-44)$$

(puisque $\partial L / \partial t = 0$ par hypothèse). Donc, ici la fonction Λ n'est autre que le lagrangien lui-même. D'après (I-39), la constante du mouvement est ici :

$$F = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L \quad (I-45)$$

qui est simplement la définition de l'hamiltonien H (énergie).

Reprenons également l'exemple déjà abordé au § 2-b précédent et examinons quelles constantes du mouvement découlent de l'invariance par translation dans l'espace ou par changement de repère galiléen. Le lagrangien considéré est :

$$L = \sum_n \frac{m_n}{2} \dot{\vec{r}}_n^2 - V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \dots) \quad (I-46)$$

← Tout d'abord, l'invariance de L dans la transformation $\vec{r}_n \Rightarrow \vec{r}_n + \delta \vec{a}$ redonne immédiatement la conservation de l'impulsion totale. Les 3 composantes du vecteur infinitésimal $\delta \vec{a}$ jouent ici le rôle de 3 infiniment petits $\delta \epsilon$; les égalités $f_i = 1$, $g_i = 0$, $\delta L = 0$ donnent pour constantes du mouvement les 3 composantes du vecteur :

$$\vec{p} = \sum_n \vec{p}_n \quad L = \sum_n \vec{p}_n \quad (I-47)$$

Introduisons maintenant un changement de repère galiléen pur par :

$$\vec{r}_n \Rightarrow \vec{r}_n + t \delta \vec{v} \quad (I-48)$$

Les 3 composantes du vecteur $\delta\vec{v}$ jouent ici le rôle de $\delta\epsilon$ et :

$$\delta\vec{r}_n = t\delta\vec{v} \quad (I-49)$$

Dans ce cas, δL s'écrit :

$$\delta L = \delta\vec{v} \cdot \left[\sum_n (m_n \dot{\vec{r}}_n - t \vec{v}_{\vec{r}_n} V) \right] \quad (I-50)$$

Si V est invariant par translation comme en (I-27), alors :

$$\delta L = \delta\vec{v} \cdot \frac{d}{dt} \vec{G} \quad (I-51)$$

où :

$$\vec{G}(t) = \sum_n m \vec{r}_n(t) \quad (I-52)$$

\vec{G} est la position du centre de masse de l'ensemble des particules.

Remplaçons Λ par \vec{G} dans (I-39), on trouve la constante vectorielle du mouvement :

$$\vec{G}_0 = t \sum_n m_n \dot{\vec{r}}_n - \sum_n m_n \vec{r}_n = \vec{P}t - \vec{G}(t) \quad (I-53)$$

donc :

$$\vec{G}(t) = \vec{P}t + \vec{G}_0 \quad (I-54)$$

et nous retrouvons le déplacement uniforme du centre de masse des particules.

Supposons enfin que V ne soit pas nécessairement invariant par translation mais que la somme des forces (extérieures) s'exerçant sur les particules soit un vecteur constant \vec{F} . Alors, on vérifie facilement que l'on peut écrire :

$$\delta L = - \delta\vec{v} \cdot \frac{d}{dt} \vec{\Lambda} \quad (I-55)$$

où

$$\vec{\Lambda}(t) = \vec{G}(t) - \frac{1}{2} t^2 \vec{F} \quad (I-56)$$

La constante du mouvement est donc dans ce cas :

$$\vec{G}_0 = \vec{P}t - \vec{G}(t) - \frac{1}{2} \vec{F} t^2$$

et on retrouve de cette façon que le centre de masse a un mouvement uniformément accéléré.

Exercice :

On considère une particule de masse m , de position \vec{r} , d'impulsion \vec{p} et de moment angulaire $\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \times \vec{p}$. Cette particule est soumise à l'action d'un potentiel central $V = -\alpha/r^n$ (n est un entier positif). Introduire

la transformation

$$\delta \vec{r} = \delta \vec{\epsilon} \times \vec{r} \quad (I-57)$$

et montrer que :

$$\delta L = -m \frac{n\alpha}{r^{n+2}} \left[\vec{r}^2 (\delta \vec{\epsilon} \cdot \dot{\vec{r}}) - (\delta \vec{\epsilon} \cdot \vec{r}) (\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}}) \right] \quad (I-58)$$

Dans le cas d'un potentiel coulombien ($n = 1$), montrer que :

$$\delta L = \frac{d}{dt} \left[-m\alpha \delta \vec{\epsilon} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right] \quad (I-59)$$

En déduire que le vecteur \vec{M} (vecteur de Runge-Lenz) :

$$\vec{M} = \frac{1}{m} \vec{p} \times (\vec{r} \times \vec{p}) - \alpha \frac{\vec{r}}{r} \quad (I-60)$$

est, dans ce cas, une constante. Interprétation physique : les points de la trajectoire (plane) de la particule où la vitesse est perpendiculaire à \vec{r} sont fixes (la trajectoire, au lieu d'être une "rosette", est une courbe fermée ; en fait, c'est une ellipse dont le grand axe est parallèle à \vec{M} et l'excentricité vaut $|\vec{M}|$).

Remarque :

En (I-34), nous avons supposé que la transformation ne concernait que les q_i (et les \dot{q}_i), mais pas le temps. On peut s'affranchir de cette restriction en supposant qu'en plus des variations δq_i et $\delta \dot{q}_i$ écrites en (I-34), il existe une variation du temps :

$$\delta t = \delta \epsilon h(q_j, \dot{q}_j ; t) \quad (I-61)$$

la relation (I-36) n'est plus valable dans ce cas. En écrivant que :

$$(\dot{q}_i + \delta \dot{q}_i) d(t + \delta t) = d[q_i + \delta q_i] \quad (I-62)$$

on obtient immédiatement, au premier ordre en ϵ :

$$g_i dt + \dot{q}_i dh = df_i \quad (I-63)$$

c'est-à-dire :

$$g_i = \frac{df_i}{dt} - \dot{q}_i \frac{dh}{dt} \quad (I-64)$$

On a de plus :

$$\delta L = \delta \epsilon \left\{ \sum_i \left(f_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + g_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) + h \frac{\partial L}{\partial t} \right\} \quad (I-65)$$

Si δL s'écrit :

$$\delta L = \delta \epsilon \left[\frac{d}{dt} \Lambda + L \frac{dh}{dt} \right] \quad (I-66-a)$$

alors on montre que la fonction

$$A = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} [f_i - h \dot{q}_i] - \Lambda + hL \quad (I-66-b)$$

est une constante du mouvement. En effet : (I-67)

$$\frac{dA}{dt} = \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \left[f_i - h \dot{q}_i \right] + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \left[\frac{df_i}{dt} - \dot{q}_i \frac{dh}{dt} - h \ddot{q}_i \right] + L \frac{dh}{dt} + h \left[\frac{\partial L}{\partial t} + \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial q_i} + \ddot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] - \frac{\delta L}{\delta \epsilon} - L \frac{dh}{dt}$$

qui donne zéro d'après (I-64) et (I-65).

Exercice : En posant $f_i = g_i = 0$, $h = 1$, retrouver comme en (I-45) que H est une constante du mouvement si $\partial L / \partial t = 0$.

Avant de quitter la mécanique classique, nous allons donner quelques rappels concernant le formalisme hamiltonien, qui est très souvent celui utilisé pour "quantifier" un système physique. Il existe en fait une procédure de quantification à partir du formalisme lagrangien ⁽⁶⁾ [postulats de Feynman], mais elle est moins généralement utilisée.

3 - Equations de Hamilton

a) Formalisme général

A toute coordonnée généralisée q_i du système, associons l'impulsion conjuguée :

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{I-68}$$

Nous allons supposer qu'on peut exprimer tous les \dot{q}_i en fonction des p_i et q_i de sorte que l'état dynamique du système est donné aussi bien par l'ensemble des q_i et \dot{q}_i que par l'ensemble des q_i et p_i . Dans le point de vue de Hamilton, ce sont les q_i et p_i qui sont considérés comme variables indépendantes. On introduit l'hamiltonien :

$$H(p_i, q_i) = \sum_i p_i \dot{q}_i(q_i, p_i) - L[q_i, \dot{q}_i(q_i, p_i)] \tag{I-69}$$

et les équations du mouvement découlent immédiatement de (I-17) et (I-68) :

$$\begin{cases} \dot{p}_i &= - \frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \end{cases} \tag{I-70}$$

Au lieu de N équations différentielles du second ordre par rapport au temps entre N variables (point de vue lagrangien), on a $2N$ équations entre

⁽⁶⁾ Voir R.P. FEYNMAN et HIBBS, "Quantum Mechanics and Path Integrals", Mac Graw Hill - New-York - (1965).

2N variables, mais du premier ordre seulement.

b) Crochets de Poisson

Soient A (q_i, p_i) et B (p_i, q_i) deux grandeurs physiques définies dans le point de vue de Hamilton. On appelle crochet de Poisson l'expression :

$$\{A, B\} = \sum_i \left[\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right] \quad (I-71)$$

On vérifie immédiatement que :

$$\begin{aligned} \{q_i, p_j\} &= \delta_{ij} \\ \{q_i, q_j\} &= \{p_i, p_j\} = 0 \end{aligned} \quad (I-72)$$

et les relations :

$$\{A, A\} = 0 \quad (I-73a)$$

$$\{A, B\} = - \{B, A\} \quad (I-73b)$$

$$\{A, BC\} = \{A, B\} C + B \{A, C\} \quad (I-73c)$$

(mêmes règles que pour les commutateurs).

D'après (I-70), l'évolution dans le temps d'une grandeur physique quelconque $F(q_i, p_i; t)$ est donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\dot{q}_i \frac{\partial F}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial F}{\partial p_i} \right) \\ &= \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \end{aligned} \quad (I-74)$$

Les crochets de Poisson nous donnent donc directement l'évolution dans le temps d'une fonction quelconque F. Ils peuvent également, dans certains cas, fournir de nouvelles constantes du mouvement : en utilisant (I-73c) et (I-74), on montre en effet que si F et G sont deux constantes du mouvement, le crochet de Poisson est également une constante du mouvement (théorème de Poisson) (7).

Exercice : Montrer que l'expression $\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\}$ est identiquement nulle (identité de Jacobi). En déduire le théorème de Poisson.

Les crochets de Poisson peuvent également donner les transformés par une opération infinitésimale \mathcal{Q} d'un mouvement du système. Vérifions-le sur un exemple concret, celui d'une particule de masse m dont le mouvement est donné en fonction d'un paramètre u :

(7) Bien sûr, il peut se faire que ce crochet de Poisson soit simplement nul ou égal à une constante indépendante des q et des p, ou encore par exemple proportionnel à F ou G ; dans un tel cas, le théorème de Poisson n'apporte aucune information nouvelle.

$$x = f_1(u) \quad y = f_2(u) \quad z = f_3(u) \quad t = f_4(u) \quad (I-75)$$

■ Translation dans l'espace d'un vecteur infinitésimal $\delta\vec{a}$. La définition de la translation est :

$$x' = x + \delta a_x \quad y' = y + \delta a_y \quad z' = z + \delta a_z \quad t' = t \quad (I-76)$$

où $\delta\vec{a}$ est un vecteur infinitésimal constant. Or :

$$\{p_x, x\} = -1 \quad \{p_y, x\} = \{p_z, x\} = 0 \quad (I-77)$$

et par suite :

$$\{\delta\vec{a} \cdot \vec{p}, x\} = -\delta a_x \quad (I-78)$$

On vérifie donc que :

$$\begin{cases} \vec{r}' = \vec{r} - \{\delta\vec{a} \cdot \vec{p}, \vec{r}\} \\ \vec{p}' = \vec{p} - \{\delta\vec{a} \cdot \vec{p}, \vec{r}\} \end{cases} \quad (I-79)$$

ce qui nous montre que les crochets de Poisson de $\delta\vec{a} \cdot \vec{p}$ avec les variables dynamiques donnent les translations infinitésimales.

■ Rotations dans l'espace autour d'un vecteur infinitésimal $\delta\vec{a}$ (indépendant du temps).

$$\delta\vec{a} = \vec{e}\delta\phi \quad (I-80)$$

où \vec{e} est le vecteur unitaire de l'axe de rotation et $\delta\phi$ l'angle de rotation.

On a :

$$\begin{cases} \delta\vec{r} = \vec{r}' - \vec{r} = \delta\vec{a} \times \vec{r} \\ \delta\vec{p} = \vec{p}' - \vec{p} = \delta\vec{a} \times \vec{p} \end{cases} \quad (I-81)$$

Par ailleurs, introduisons le vecteur (moment angulaire) :

$$\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (I-82)$$

On obtient :

$$\begin{aligned} \{x, \delta\vec{a} \cdot \vec{\ell}\} &= \delta a_y z - \delta a_z y \\ \{p_x, \delta\vec{a} \cdot \vec{\ell}\} &= \delta a_y p_z - \delta a_z p_y \end{aligned} \quad (I-83)$$

et, par suite :

$$\begin{cases} \vec{r}' = \vec{r} - \{\delta\vec{a} \cdot \vec{\ell}, \vec{r}\} \\ \vec{p}' = \vec{p} - \{\delta\vec{a} \cdot \vec{\ell}, \vec{p}\} \end{cases} \quad (I-84)$$

Le moment angulaire $\vec{\ell}$ joue donc, vis à vis des rotations, le rôle de \vec{p} vis à vis des translations.

■ Translation dans le temps.

Cette translation est définie par :

$$\vec{r}' = \vec{r} \qquad t' = t + \delta b \qquad (I-85)$$

où δb est une constante. Si on trace les deux mouvements horaires $\vec{r}(t)$ et $\vec{r}'(t')$ en fonction d'un même temps θ (figure I-3), on aura :

$$\begin{aligned} \vec{r}'(\theta) &= \vec{r}(\theta - \delta b) \\ &= \vec{r}(\theta) - \delta b \dot{\vec{r}}(\theta) \end{aligned} \qquad (I-86)$$

et :

$$\vec{p}'(\theta) = \vec{p}(\theta) - \delta b \dot{\vec{p}}(\theta) \qquad (I-87)$$

Par suite : d'après (I-74) :

$$\begin{cases} \vec{r}' &= \vec{r} + \{\delta b H, \vec{r}\} \\ \vec{p}' &= \vec{p} + \{\delta b H, \vec{p}\} \end{cases} \qquad (I-88)$$

H est donc associé aux translations dans le temps.

■ Transformation de Galilée pure.

Considérons deux repères galiléens S et S', d'axes parallèles, tels que le vecteur \vec{OO}' qui joint leurs origines soit égal à $-t\delta\vec{v}$ [$\delta\vec{v}$ est un vecteur infinitésimal constant].

Si, dans S, la particule considérée est repérée par un vecteur $\vec{r}(t) = \vec{OM}(t)$, elle est repérée dans S' par un vecteur $\vec{r}'(t) = \vec{O'M}(t)$ donné par :

$$\vec{r}' = \vec{r} + t\delta\vec{v} \qquad (I-89)$$

De même :

$$\vec{p}' = \vec{p} + m\delta\vec{v} \qquad (I-90)$$

Introduisons le vecteur :

$$\vec{G}_0(t) = -m\vec{r} + t\vec{p} \qquad (I-91)$$

Il vient :

$$\begin{cases} \{x, \vec{G}_0 \cdot \delta\vec{v}\} &= t\delta v_x \\ \{p_x, \vec{G}_0 \cdot \delta\vec{v}\} &= m\delta v_x \end{cases} \qquad (I-92)$$

et donc :

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= \vec{r} + \{\delta\vec{v} \cdot \vec{G}_0, \vec{r}\} \\ \vec{p}' &= \vec{p} + \{\delta\vec{v} \cdot \vec{G}_0, \vec{p}\} \end{aligned} \qquad (I-93)$$

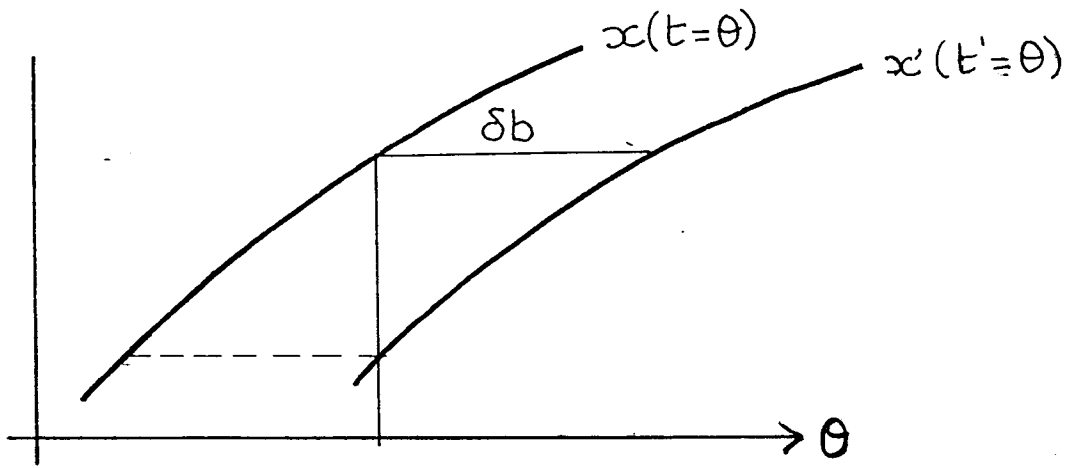


Fig I-3

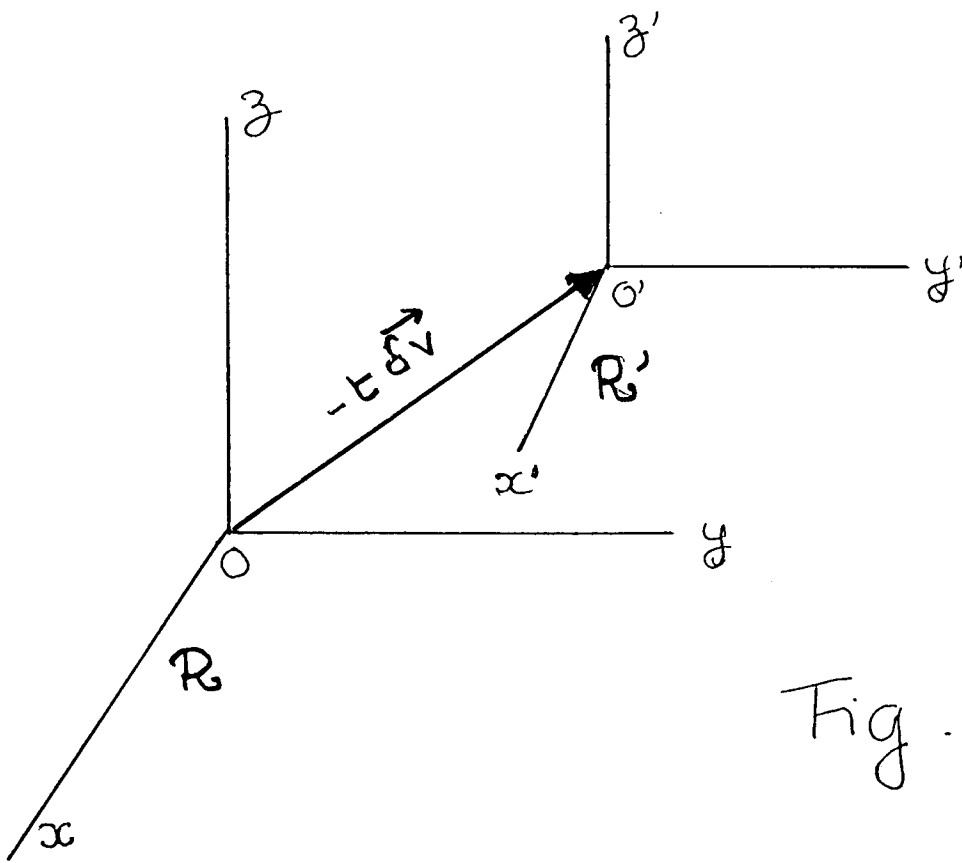


Fig. I-4

Le vecteur \vec{G}_0 engendre donc par crochets de Poisson des transformations de Galilée infinitésimales. Pour un ensemble de plusieurs particules (exemple déjà vu plus haut), G correspondrait du centre de masse du système à la position.

C - SYMETRIES EN MECANIQUE QUANTIQUE

Comme nous allons le voir dans la suite, en mécanique quantique, le rôle joué par les transformations de symétrie est au moins aussi important qu'en mécanique classique.

1 - Quantification

L'ensemble des q_i et des p_i sont remplacés, en mécanique quantique, par un vecteur ("ket") $|\psi\rangle$ appartenant à l'espace des états & du système. Pour une particule sans spin, deux "bases" possibles sont, soit la base $\{|\vec{r}\rangle\}$ des vecteurs propres de l'opérateur position \vec{R} , soit la base $\{|\vec{p}\rangle\}$ des vecteurs propres de l'impulsion \vec{P} . A ces deux bases correspondent les fonctions :

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \tag{I-94a}$$

$$\psi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle \tag{I-94b}$$

dites fonctions d'onde en représentation \vec{r} et \vec{p} respectivement.

Les grandeurs classiques $\mathcal{A}(q_i, p_i)$ deviennent maintenant des opérateurs linéaires agissant dans &

$$\mathcal{A}(q_i, p_i) \implies A \tag{I-95}$$

En général, tout ket $|\psi\rangle$ peut être décomposé sur des vecteurs propres de A ; A est ^{alors} appelé une "observable". Aux crochets de Poisson classiques correspondent des commutateurs entre observables. Les relations (I-72) deviennent :

$$\left[R_{x_i}, P_{x_j} \right] = i\hbar \delta_{ij} \tag{I-96}$$

(où x_i et x_j désignent x, y ou z).

L'équation d'évolution de $|\psi\rangle$ est l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \tag{I-97}$$

dans laquelle l'hamiltonien H(t) désigne l'observable quantique associée à la fonction de Hamilton classique.

Cette équation est équivalente à :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (I-98)$$

Dans cette dernière relation, $|\psi(t)\rangle$ désigne le vecteur d'état à l'instant t , $|\psi(t_0)\rangle$ sa valeur à l'instant initial t_0 , et $U(t, t_0)$ est l'opérateur unitaire satisfaisant :

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (I-99a)$$

avec :

$$U(t_0, t_0) = 1 \quad (I-99b)$$

Lorsque H est indépendant du temps, on a simplement :

$$U(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H (t - t_0) \right\} \quad (I-100)$$

2 - Transformations de symétrie

Considérons une transformation \mathcal{G} du système physique. Avant transformation, ce dernier sera décrit par un ket $|\psi(t)\rangle$ à l'instant t , après transformation par un ket $|\psi'(t)\rangle$. On définit un opérateur T (agissant dans l'espace des états \mathcal{E}) qui fait passer de $|\psi\rangle$ à $|\psi'\rangle$:

$$|\psi'(t)\rangle = T(t) |\psi(t)\rangle \quad (I-101)$$

(dans de nombreux cas, $T(t)$ sera un opérateur linéaire et unitaire). Le schéma de la figure I-1 devient alors celui de la figure I-5. La transformation considérée sera de symétrie si :

$$|\psi'(t)\rangle = U(t, t_0) \left[T(t_0) |\psi(t_0)\rangle \right] \quad (I-102)$$

c'est-à-dire ($|\psi(t_0)\rangle$ étant quelconque) :

$$\boxed{U(t, t_0) T(t_0) = T(t) U(t, t_0)} \quad (I-103)$$

Si cette condition est réalisée, alors :

$$U^\dagger(t, t_0) T(t) U(t, t_0) = T(t_0) \quad (I-104)$$

Cette égalité exprime que, dans le point de vue de Heisenberg, l'opérateur $T(t)$ correspond à un opérateur T_H indépendant du temps. T est donc une constante du mouvement.

Si T est indépendant du temps, (I-103) devient :

$$\boxed{[T, U(t, t_0)] = 0} \quad (I-105)$$

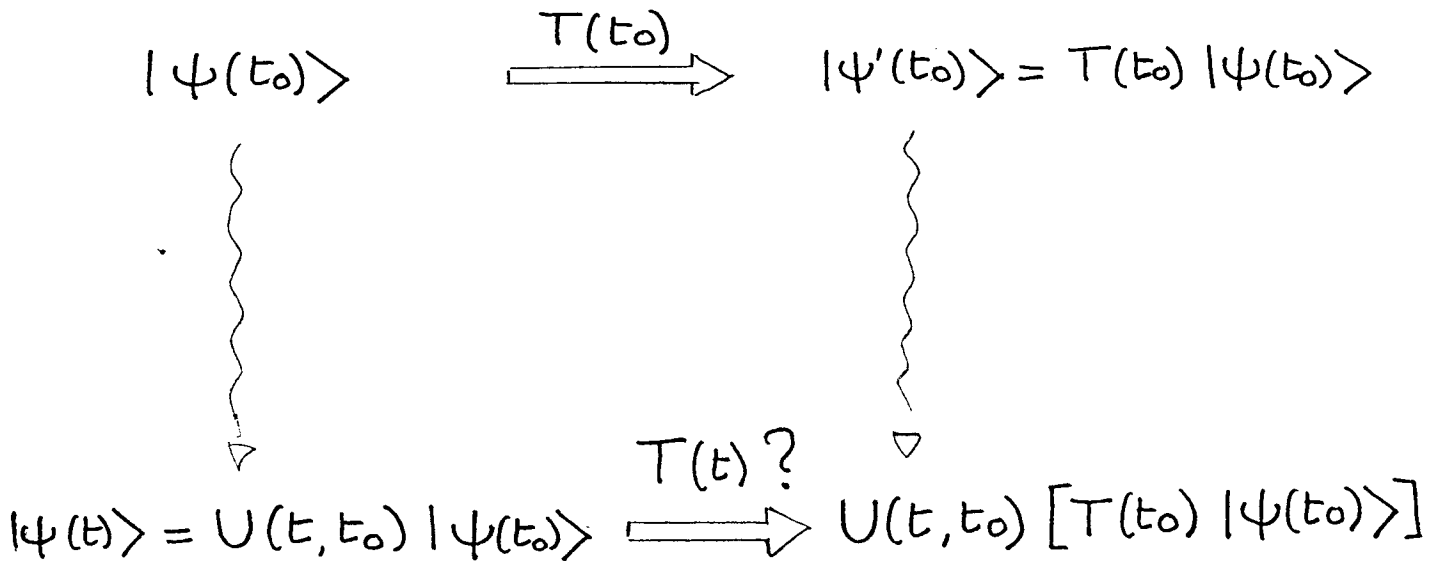


Fig. I-5

et implique donc la commutation de T avec l'opérateur d'évolution U à tout instant. Si, de plus, H est également indépendant du temps (systèmes conservatifs), cas où U est donné par (I-100), alors (I-105) peut s'écrire :

$$[T, H] = 0 \tag{I-106}$$

On retrouve que T est une constante du mouvement.

Remarque :

On sait que deux kets différant entre eux par un facteur de phase global correspondent à des états physiques identiques. On peut donc remplacer (I-103) par l'égalité plus générale :

$$U(t, t_0) T(t_0) |\psi(t_0)\rangle = e^{i\alpha(t)} T(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad \forall |\psi(t_0)\rangle \tag{I-107-a}$$

où $\alpha(t)$ est une fonction du temps qui, à priori, peut également dépendre de $|\psi(t_0)\rangle$; c'est la raison pour laquelle nous avons fait figurer ce ket dans (I-107). En fait, cette dépendance ne peut exister car, en posant

$T(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = |\chi\rangle$, (I-107-a) peut s'écrire (l'opération T est inversible) :

$$U(t, t_0) T(t_0) U(t_0, t) T^{-1}(t) |\chi\rangle = e^{i\alpha(t)} |\chi\rangle \tag{I-107-b}$$

où α est éventuellement fonction de $|\chi\rangle$; mais $e^{i\alpha(t)}$ apparaît alors comme un opérateur linéaire dont tout ket $|\chi\rangle$ est vecteur propre, ce qui signifie que toutes ses valeurs propres sont égales (matrice diagonale) et donc que α est indépendant du ket.

En conséquence, nous avons :

$$U(t, t_0) T(t_0) = e^{i\alpha(t, t_0)} T(t) U(t, t_0) \quad (\text{I-107-c})$$

où $\alpha(t)$ est une fonction réelle du temps, nulle pour $t = t_0$. Mais alors en posant :

$$T'(t) = e^{i\alpha(t, t_0)} T(t) \quad (\text{I-108})$$

on retombe pour T' sur une égalité du type (I-103). Nous supposons donc ici que T' est défini de façon que $\alpha(t) = 0$ ⁽⁸⁾.

3 - Conséquences générales

Les relations (I-103), (I-105) ou (I-106) impliquent que, si \mathcal{G} est transformation de symétrie, les opérateurs U et H ne peuvent pas avoir n'importe quelle forme.

Par exemple, nous verrons qu'un hamiltonien en \vec{L}, \vec{R} est interdit si l'opération géométrique de parité est transformation de symétrie (on définit $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$). De même, une symétrie par renversement du temps interdit un hamiltonien en \vec{R}, \vec{P} , etc.

Nous avons déjà remarqué que (I-104) ou (I-106) impliquent l'existence de constantes du mouvement. Par exemple, (I-106) entraîne que T, T^2, T^3 , etc. sont constants en valeur moyenne. Tous les opérateurs T que l'on peut trouver, leurs produits, ... donnent des constantes du mouvement.

Pour les systèmes conservatifs, l'existence de telles constantes simplifie la recherche des états stationnaires (kets propres de H) : on cherche une base de kets propres communs à H et T .

(⁸) Nous considérons ici le cas d'une seule transformation \mathcal{G} . Le cas où l'on veut éliminer les facteurs de phase pour tout un groupe de transformation est plus délicat, et nous aurons l'occasion d'y revenir.

On sait que la commutation de H et T entraîne :

$$\langle t_1 | H | t_2 \rangle = 0 \quad \text{si } t_1 \neq t_2 \quad (\text{I-109})$$

[$|t_1\rangle$ et $|t_2\rangle$ sont des vecteurs propres de T, de valeurs propres t_1 et t_2].
Ce type de ^{relation} donne des "règles de sélection" pour H ; ces règles sont en fait valables pour toutes les observables invariantes par T.

Des informations concernant la dégénérescence peuvent également être obtenues. Soit, en effet, $|E_0\rangle$ un ket propre de H, de valeur propre E_0 . L'égalité (I-106) entraîne que, si :

$$|E'_0\rangle = T |E_0\rangle \quad (\text{I-110})$$

alors $|E'_0\rangle$ est un ket propre de H de même valeur propre E_0 . En effet :

$$\begin{aligned} H |E'_0\rangle &= H T |E_0\rangle \\ &= T H |E_0\rangle \\ &= E_0 T |E_0\rangle = E_0 |E'_0\rangle \end{aligned} \quad (\text{I-111})$$

Si $|E_0\rangle$ et $|E'_0\rangle$ ne sont pas proportionnels, la valeur propre E_0 est au moins deux fois dégénérée.

Remarquons enfin que, si T_1 et T_2 satisfont (I-104), leur produit a la même propriété. Les opérateurs T associés aux transformations de symétrie forment donc un groupe. Les T ne commutent pas nécessairement entre eux (groupe non commutatif) et nous verrons l'importance des relations de commutation entre ces opérateurs.

Nous avons déjà entrevu au chapitre précédent l'importance de la notion de groupe dans les problèmes de symétrie. Dans ce chapitre, nous allons exposer quelques notions de théorie des groupes.

Il n'est pas question ici de donner un cours général de cette théorie. Nous chercherons plutôt à donner un premier contact avec les notions importantes, et à introduire le vocabulaire utile à la lecture des ouvrages consacrés à l'étude des symétries en physique. Le lecteur désirant en savoir plus pourra se reporter à la bibliographie donnée à la fin de l'introduction.

A - PROPRIETES GENERALES DES GROUPES

1 - Définitions ; exemples

Un groupe G est un ensemble d'éléments, notés $g_1, g_2, g_3, \dots, g_i, g_j, \dots$ entre lesquels on a défini une loi de composition interne (multiplication) :

$$g_i, g_j \implies \text{produit, noté } g_i g_j \quad (\text{II-1})$$

telle que :

- la loi est associative :

$$g_i (g_j g_k) = (g_i g_j) g_k \quad \forall i, j, k \quad (\text{II-2})$$

- il existe un élément neutre, noté e , tel que :

$$eg = ge = g \quad \forall g \quad (\text{II-3})$$

- tout élément g possède un inverse, noté g^{-1} , le même "à droite" et "à gauche" :

$$gg^{-1} = g^{-1}g = e \quad (\text{II-4})$$

La loi de multiplication n'est pas nécessairement commutative, et on peut avoir :

$$g_i g_j \neq g_j g_i \quad (\text{II-5})$$

Si elle l'est, $[g_i g_j = g_j g_i, \forall i, j]$, le groupe est dit commutatif ou abélien.

Un groupe fini contient un nombre fini N d'éléments ; N est appelé ordre du groupe. Un groupe infini en contient un nombre infini (qui peut être dénombrable ou avoir la puissance du continu).

L'inverse de $g_1 g_2$ est $g_2^{-1} g_1^{-1}$:

$$(g_1 g_2)^{-1} = g_2^{-1} g_1^{-1} \tag{II-6}$$

(démonstration immédiate).

On appelle "commutateur" de g_i et g_j l'élément du groupe ⁽¹⁾ :

$$g_i g_j g_i^{-1} g_j^{-1} \tag{II-7}$$

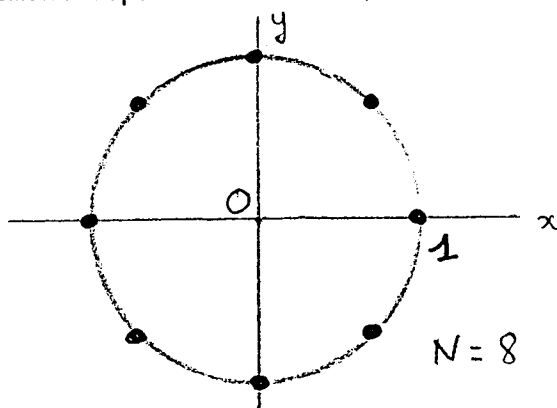
Ce commutateur est évidemment e si g_i et g_j commutent ($g_i g_j = g_j g_i$), et réciproquement.

Un groupe fini ^{satisfait} le "lemme de réarrangement", souvent utile : si on choisit un élément quelconque g_0 de G, en multipliant ^{par g_0} à gauche (ou à droite) l'ensemble des éléments de G, on obtient à nouveau une fois et une seule tous les éléments de G, mais dans un ordre différent (si $g_0 \neq e$).

Exemples de groupes

▪ L'ensemble des 2 nombres + 1 et - 1 muni de la loi de multiplication habituelle, forme un groupe particulièrement simple (commutatif d'ordre 2).

▪ De même, l'ensemble des nombres complexes $e^{2i\pi p/N}$ (N fixé, $p = 0, 1, \dots, N - 1$) forme un groupe abélien, d'ordre N, représenté par des points régulièrement espacés sur un cercle dans le plan complexe.



Ce groupe est appelé groupe cyclique Z_N (ou quelquefois C_N).

(1) Ne pas confondre cette définition du commutateur entre éléments d'un groupe (où une loi d'addition - soustraction n'a pas été nécessairement définie) avec celle, complètement différente, du commutateur entre opérateurs.

■ Le groupe des entiers positifs ou négatifs, additif (muni de la loi de composition de l'addition habituelle), est noté Z_{∞} .

Donnons quelques exemples de groupes non abéliens.

■ Le groupe S_N des permutations ⁽²⁾ de N objets, d'ordre $N!$ Ce groupe est non abélien si $N \geq 3$.

Prenons S_3 par exemple, et notons P_{231} la permutation qui transforme l'objet noté 1 en l'objet 2, l'objet 2 en l'objet 3, et l'objet 3 en l'objet 1.

On vérifie aisément que l'action successive de P_{231} puis de P_{213} sur les objets 123, dans cet ordre, donne 132. Par contre, si l'on applique les mêmes permutations à 123 mais en commençant par P_{213} , on obtient 321. Par suite :

$$P_{213} P_{231} \neq P_{231} P_{213}$$

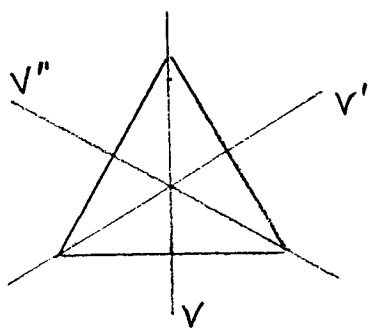
et S_3 n'est pas commutatif.

■ Le groupe des opérations géométriques laissant invariante une figure donnée. Le produit de 2 éléments du groupe étant défini par l'application successive des deux opérations, on vérifie très facilement que l'on a bien un groupe.

Exemple : ensemble des transformations planes qui conservent les distances et un triangle équilatéral. Ce groupe comprend :

- les rotations autour du centre O du triangle, d'angles 0 , $\frac{2\pi}{3}$ et $\frac{4\pi}{3}$; ces opérations sont notées I , C_3 , C_3^2 .

- les symétries par rapport à trois droites passant par O et les sommets du triangle, notées V , V' , et V'' .



On peut vérifier que $VC_3 = V'$ et que $C_3V = V''$: le groupe n'est pas commutatif.

⁽²⁾ Suivant l'usage en physique, nous appelons ici permutation de N objets a_1, a_2, \dots, a_N une opération où l'on remplace chacun des a_1, a_2, \dots par un de ces mêmes N objets. En mathématiques, on désigne parfois une telle application biunivoque d'un ensemble sur lui-même par "substitution", réservant le mot de permutation au rangement des objets dans un ordre donné.

L'opération que nous appelons permutation porte donc sur des des objets (elle transforme a_1 en a'_1 , a_2 en a'_2 ...) et ne concerne par leur ordre.

▪ Le groupe des translations $T(n)$ dans un espace à n dimensions, ou des rotations $R(n)$ autour d'un point donné dans cet espace. On peut aussi introduire le groupe des déplacements, dont les éléments sont le produit d'un élément de $R(n)$ par un autre de $T(n)$.

Nous avons ici des exemples de groupes infinis continus, sur lesquels nous reviendrons au chapitre suivant.

▪ Groupes de matrices, munis de la loi habituelle de multiplication des matrices. Ces groupes sont importants en physique mais leur nomenclature varie un peu d'un ouvrage à l'autre ; donnons cependant la terminologie la plus usuelle :

- $GL(n, C)$ groupe (linéaire) des matrices $n \times n$ régulières (déterminant non nul, donc inversibles), complexes
- $GL(n, R)$ comme précédemment, mais en se limitant aux matrices réelles
- $SL(n, C)$ et $SL(n, R)$ désignent les groupes ayant les propriétés précédentes mais où de plus on impose aux matrices d'être unimodulaires [déterminant égal à 1]. S signifie dans ce cas "spécial", par opposition au G de "général"
- $U(n)$ matrices $n \times n$ unitaires (conservent la norme et le produit scalaire) ⁽³⁾
- $SU(n)$ matrices $n \times n$ unitaires unimodulaires. Ces groupes jouent un rôle important en physique des particules élémentaires
- $O(n)$ matrices $n \times n$ orthogonales (unitaires et réelles)
- $SO(n)$ matrices $n \times n$ orthogonales unimodulaires. Par exemple, $SO(3)$ désigne l'ensemble des matrices de rotation autour d'un point dans l'espace habituel à 3 dimensions (l'unimodularité éliminant les symétries par rapport à un point ou un plan). $SO(3)$ et $R(3)$ (groupes de rotations dans l'espace habituel à 3 dimensions) sont donc pratiquement deux désignations différentes d'un même groupe.

⁽³⁾ Les matrices hermitiques ne forment pas un groupe puisque, si M_1 et M_2 sont hermitiques, le produit M_1M_2 ne l'est pas nécessairement (sauf si $M_1M_2 = M_2M_1$).

2 - Table de multiplication - Groupes isomorphes

Pour définir la loi de multiplication dans un groupe G, on peut donner un tableau à double entrée (table de multiplication) où, à l'intersection de la i^{ème} ligne et de la j^{ème} colonne, figure le produit $g_i g_j$:

	g_1	g_2	g_j	g_N
g_1	g_1^2	$g_1 g_2$	$g_1 g_j$	$g_1 g_N$
g_2	$g_2 g_1$	g_2^2	$g_2 g_j$	$g_2 g_N$
.
.
.
g_j	$g_j g_1$	$g_j g_2$	$g_j g_j$	$g_j g_N$
.
.
.
g_N	$g_N g_1$	$g_N g_2$	$g_N g_j$	g_N^2

Ce tableau spécifie la structure du groupe. Il n'est pas quelconque : par exemple, chaque élément g apparaît une fois et une seule dans chaque ligne et dans chaque colonne.

Si G est commutatif, le tableau est symétrique (par rapport à la diagonale principale).

Exercice : Ecrire la table de multiplication du groupe C_{3V} .

Il se peut qu'il existe un sous ensemble d'éléments $g_\alpha, g_\beta \dots g_\gamma$ de G, tel que tous les éléments $g \in G$ puissent être obtenus par produit des éléments de ce sous-ensemble. Les $g_\alpha, g_\beta \dots g_\gamma$ sont alors appelés "générateurs" du groupe.

Exemples :

- (i) Z_N : un seul générateur, $e^{2i\pi/N}$
- (ii) S_N : le sous-ensemble des transpositions
- (iii) C_{3V} : C_3 et V

On peut se définir le groupe G par un certain nombre de relations entre les générateurs, sans se donner toute la table de multiplication :

Exemple :

$$C_{3V} : (C_3)^3 = I ; C_3 V C_3 = V ; C_3 \text{ et } V \text{ différents de } I$$

Homomorphisme : $G \implies G'$

On dit qu'il existe un homomorphisme du groupe G dans le groupe G' si, à tout élément $g \in G$, on fait correspondre un élément

$$g' = f(g) \in G'$$

de façon que la loi de composition interne des groupes soit respectée :

$$g'_1 g'_2 = f(g_1) f(g_2) = f(g_1 g_2) \quad (\text{II-8})$$

[le produit des transformés g'_1 et g'_2 est égal au transformé du produit $g_1 g_2$].

Isomorphisme : $G \iff G'$

Lorsque la correspondance ci-dessus est biunivoque (application bijective), c'est-à-dire lorsque :

$$g_1 \neq g_2 \implies g'_1 \neq g'_2$$

et que tout élément g' de G' correspond à un élément g de G , on dit qu'on a isomorphisme.

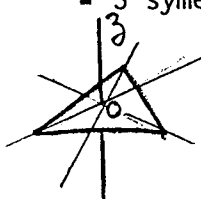
Les deux groupes G et G' ont ^{alors} même table de multiplication. Ils ne diffèrent en fait que par la dénomination des éléments. On a donc tendance à identifier deux groupes isomorphes et à les considérer comme deux réalisations de ce que l'on appelle un groupe abstrait.

Exemples :

(i) $S_0(3)$ et $R(3)$

(ii) le groupe des transformations dans l'espace à 3 dimensions constitué de :

- 3 rotations, d'angles $0, 2\pi/3, 4\pi/3$ autour d'un axe Oz .
- 3 symétries par rapport à des plans à 120 degrés contenant Oz .



Ce groupe est isomorphe

à C_{3v}

(iii) les 2 groupes précédents sont isomorphes à S_3 [permutations des sommets d'un triangle équilatéral].

Une façon de vérifier l'isomorphisme entre deux groupes est de s'assurer qu'ils ont des nombres égaux de générateurs avec les mêmes relations de définition de la table de multiplication.

3 - Sous-groupes - Centre

Soit H un sous-ensemble de G . Si H constitue lui-même un groupe (avec la même loi de multiplication que G), on dit que H est un sous-groupe de G .

Un sous-ensemble K quelconque de G ne constitue pas un sous-groupe : il faut que ce sous-ensemble soit fermé pour la loi de multiplication (c'est-à-dire que le produit de deux éléments de K appartienne à K) et que K contienne l'inverse de chacun de ses éléments.

Exemples :

(i) I, C_3 , C_3^2 forment un sous-groupe de C_{3V} (isomorphe à Z_3), mais pas I et C_3 seulement.

(ii) $R(3)$ est un sous-groupe de l'ensemble des déplacements dans l'espace à 3 dimensions.

(iii) $R(2)$ est un sous-groupe de $R(3)$.

Théorème de Cayley :

Tout groupe fini d'ordre N est isomorphe à un sous-groupe de S_N (groupe des permutations de N objets).

Cette propriété peut être comprise en regardant la table de multiplication du groupe : à tout élément du groupe est associée une ligne sur laquelle figure une permutation des N éléments du groupe ^(lemme de réarrangement). Il n'est pas difficile de vérifier qu'on a effectivement isomorphisme en appliquant les lois de multiplication dans le groupe initial et celui des permutations.

Sous-groupe invariant :

Un sous-groupe H de G est dit invariant si :

$$g H g^{-1} \subset H \quad \forall g \in G \quad \text{(II-9a)}$$

c'est-à-dire si, quels que soient g appartenant à G et h à H, l'élément :

$$h' = g h g^{-1} \quad \text{(II-9b)}$$

appartient aussi à H ⁽³⁾.

Il revient au même de dire que, quels que soient $g \in G$ et $h \in H$ il existe $h' \in H$ tel que :

$$g h = h' g \quad \text{(II-10)}$$

[ou l'inverse, en changeant les rôles de h et h'].

⁽³⁾ Si G est un groupe fini, l'égalité (II-9a) est équivalente à $g H g^{-1} = H$ (la démonstration est élémentaire et utilise le fait que, si $h_1 \neq h_2$ $g h_1 g^{-1} \neq g h_2 g^{-1}$)

L'ensemble des éléments c de G qui commutent avec tous les éléments de G constitue évidemment un sous-groupe invariant abélien, appelé centre C du groupe G .

Il se peut que $C = G$ (si G est abélien) ou, à l'opposé, que C soit limité à l'élément identité (exemple : $C_{3\sqrt{}}$).

4 - Classes de conjugaison

Considérons deux éléments g et g' de G . On dit que g est conjugué de g' (par l'élément $f \in G$) si :

$$g = f^{-1} g' f \quad (\text{II-11})$$

On voit que :

- g est conjugué de lui-même ($f = e$)
- g' est conjugué de g (par f^{-1}). On peut donc dire que g et g' sont conjugués l'un de l'autre.
- si g_1 est conjugué de g_2 et g_2 de g_3 , g_1 est conjugué de g_3 .

En effet :

$$g_1 = f^{-1} g_2 f = (f^{-1} t^{-1}) g_3 (tf) \quad (\text{II-12})$$

La conjugaison est une relation d'équivalence entre éléments de G .

La classe de l'élément g est l'ensemble des éléments qui lui sont conjugués. Tous les éléments d'une classe sont donc conjugués deux à deux.

On vérifie facilement que deux classes sont, soit disjointes (pas d'élément commun), soit confondues. En d'autres termes, les classes forment une partition de G , qui apparait comme la réunion de classes disjointes.

Remarques :

(i) l'élément neutre est toujours seul dans sa classe. Cette classe est la seule qui soit un sous-groupe de G .

(ii) dans un groupe commutatif, les classes sont les éléments eux-mêmes (elles ne contiennent qu'un élément unique).

(iii) l'égalité (II-10) exprime que h' et h sont conjugués.

Donc, un sous-groupe invariant peut être défini comme un sous-groupe qui contient ses éléments en classes complètes.

Exercices :

(i) Montrer que les inverses des éléments d'une classe forment une classe, non nécessairement confondue avec la première.

(ii) Soit g un élément d'une classe d'un groupe G fini d'ordre N , et soit p le nombre d'éléments de G qui commutent avec g . Montrer que g est conjugué de chaque élément de sa classe (en particulier de lui-même) exactement p fois (c'est-à-dire par p éléments différents de G). En déduire que $N = pn$, où n est le nombre d'éléments de la classe de g : l'ordre d'une classe divise celui du groupe.

(iii) Si C et C' sont deux classes de G , on appelle produit des deux classes l'ensemble des éléments de G qui peuvent s'écrire gg' avec $g \in C$, $g' \in C'$. Montrer que ce produit est la réunion d'un certain nombre de classes de G .

Cas de transformations géométriques

Supposons que les éléments de G soient des transformations géométriques inversibles A, B, \dots agissant sur des vecteurs \vec{x}, \vec{y}, \dots . Par exemple, $G = C_{3V}$ ou $G = R(3)$. Alors, la notion de classe s'interprète géométriquement de façon simple. En effet, si \vec{y} est le transformé de \vec{x} dans l'opération A :

$$\vec{y} = A\vec{x} \tag{II-13}$$

et si on pose :

$$\begin{cases} \vec{x} = C\vec{x}' \\ \vec{y} = C\vec{y}' \end{cases} \tag{II-14}$$

alors l'opération qui permet de passer de \vec{x}' à \vec{y}' est la conjuguée de A par l'élément C :

$$\vec{y}' = \tilde{A} \vec{x}' \tag{II-15}$$

où :

$$\tilde{A} = C^{-1} A C \tag{II-16}$$

Or, on peut considérer que les formules (II-14) sont celles d'un changement d'axes : les composantes de \vec{x} et \vec{x}' (ou de \vec{y} et \vec{y}') sont celles d'un même vecteur, relatives à des systèmes d'axes différents [dans les colonnes de la matrice C on a alors les composantes des nouveaux vecteurs de base sur les anciens]. Dans ce point de vue, A et son conjugué désignent la même opération géométrique, mais dans des axes différents.

Par exemple, si $G = C_{3V}$, on a :

$$C_3^{-1} V C_3 = V'' \tag{II-17}$$

Le transposé de V par C_3 est la symétrie par rapport à un axe dont la direction a subi la rotation C_3^{-1} par rapport à sa direction initiale. De façon analogue :

$$[C_3^2]^{-1} V [C_3]^2 = V' \quad (\text{II-18})$$

De même, si $G = R_{(3)}$, l'ensemble des éléments d'une classe comprend les rotations d'un même angle, autour d'un axe quelconque.

5 - Groupe produit tensoriel (ou produit direct)

On considère deux groupes différents G et G' , d'éléments g_i et g'_k . Par définition, les éléments du produit tensoriel $G \otimes G'$ sont les paires (g_i, g'_k) . La loi de composition :

$$(g_i, g'_k) (g_j, g'_e) = (g_i g_j, g'_k g'_e) \quad (\text{II-19})$$

donne, on le vérifie aisément, une structure de groupe au produit $G \otimes G'$.

Remarque :

Si H est un sous-groupe invariant de G , on peut définir la notion de groupe quotient G/H qui est, dans certains cas, la notion inverse du produit [voir complément II-A].

Exemples :

(i) Si G et G' sont respectivement des groupes de matrices $N \times N$ et $N' \times N'$, d'éléments M_i et M'_k , l'ensemble des matrices produit tensoriel

$$\mathcal{M}_{ik} = M_i \otimes M'_k$$

dont, par définition, les éléments sont :

$$\langle n, p | \mathcal{M}_{ik} | n', p' \rangle = \langle n | M_i | n' \rangle \times \langle p | M'_k | p' \rangle \quad (\text{II-20})$$

peut être considéré comme le produit direct de G par G' .

■ Si $G = T_{(3)}$ et $G' = R_{(3)}$, on peut obtenir par produit direct l'ensemble des déplacements [groupe euclidien $\mathcal{E}_{(3)}$].

Considérons en effet un solide, avec un point origine de référence A , et des axes $AXYZ$. Après déplacement, ce trièdre devient $A'X'Y'Z'$. Un tel déplacement peut être associé à un couple comprenant une rotation autour de A (celle qui amène les axes $AXYZ$, parallèles à leur direction finale $A'X'Y'Z'$) et d'une translation (définie par le vecteur \vec{AA}'). Le déplacement peut d'ailleurs être obtenu en appliquant successivement ces deux opérations au trièdre $AXYZ$. Pour le produit de deux déplacements, il peut être défini conformément à la loi (II-19), c'est-à-dire en considérant une rotation (et une translation) produit des rotations

(translations) individuelles [avec cette définition, la seconde rotation se fait par rapport à un axe passant par A', obtenu à partir de A après la première translation : le point autour duquel se fait la rotation est mobile avec le solide].

B - REPRESENTATIONS LINEAIRES D'UN GROUPE

1 - Définition

On considère un groupe G, d'éléments notés g. Par ailleurs, on suppose qu'on connaît un ensemble de matrices carrées $P \times P$, régulières M ($\det M \neq 0$; M^{-1} existe), ensemble qui sera noté ${}^{(P)}R$:

$$M \in {}^{(P)}R \quad (II-21)$$

Une représentation linéaire de G dans ${}^{(P)}R$ est définie si on se donne une correspondance entre chaque élément g et une matrice M, qui sera notée M(g), de façon que :

$$M(gg') = M(g) \times M(g') \quad (II-22)$$

[la matrice associée au produit est le produit des matrices]. En d'autres termes, la loi de composition interne étant respectée, on peut définir une représentation linéaire comme un homomorphisme de G dans ${}^{(P)}R$.

P est appelé "dimension" de la représentation (ou quelquefois "degré").

Remarques :

(i) Se donner une matrice carrée régulière $P \times P$ revient à se donner un opérateur linéaire \mathcal{M} , inversible, agissant dans un espace vectoriel \mathcal{E}_P à P dimensions. On peut donc ainsi définir une représentation comme un homomorphisme entre G et un ensemble d'opérateurs linéaires inversibles agissant dans \mathcal{E}_P .

(ii) Les matrices M sont supposées inversibles, ce qui exclut des correspondances comme celle qui associe à tout élément g la même matrice :

$$N(g) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (II-23)$$

bien que cette correspondance respecte la loi de composition interne [on vérifie facilement que N est un projecteur (non orthogonal), c'est-à-dire que $N = N^2 = N^3 = \dots$ (matrice idempotente)].

(iii) Si G lui-même est défini comme un groupe de matrices inversibles [$SO(n)$ par exemple], on a immédiatement une représentation de G qui est donnée par ces matrices elles-mêmes. Il ne faut cependant pas

croire que ce soit la seule représentation possible. Par exemple, on peut associer à tout élément du groupe la (même) matrice unité $P \times P$, ce qui donne une représentation dite triviale.

(iv) Nous désignerons en fait soit la correspondance $G \implies {}^{(P)}R$, soit l'ensemble ${}^{(P)}R$ des matrices par le même mot "représentation".

Propriétés simples :

Si e désigne l'élément neutre de G , et g^{-1} l'inverse de g , on a :

$$M(ge) = M(g) = M(g) M(e) \quad (\text{II-24})$$

d'après (II-22) et donc :

$$M(e) = M^{-1}(g) M(g) = (\mathbb{1}) \quad (\text{II-25})$$

(matrice unité)

puisque les M sont inversibles. De même :

$$M(gg^{-1}) = M(e) = M(g) M(g^{-1}) \quad (\text{II-26})$$

et donc, d'après (II-25) :

$$M(g^{-1}) = M^{-1}(g)$$

La matrice associée à e est donc toujours la matrice unité $P \times P$; deux matrices inverses sont associées à deux éléments inverses.

Représentation fidèle :

Si, lorsque g_1 et g_2 sont différents, $M(g_1)$ et $M(g_2)$ sont également toujours différents, la représentation est dite "fidèle" :

$$g_1 \neq g_2 \implies M(g_1) \neq M(g_2) \quad (\text{II-27})$$

la correspondance $G \implies {}^{(P)}R$ est dans ce cas biunivoque (isomorphisme).

Représentations projectives :

Du fait qu'en mécanique quantique, la multiplication du vecteur d'état $|\psi\rangle$ par un facteur de phase globale ne modifie pas l'état physique, on introduit souvent en physique la notion de "représentation projective" où (II-22) est remplacé par :

$$M(gg') = e^{i\phi(g, g')} M(g) M(g') \quad (\text{II-28})$$

[$\phi(g, g')$ est une fonction réelle de g et g']. Cette dernière égalité est moins contraignante que (II-22) et les représentations projectives ne sont pas des représentations au sens strict.

Exemples :

(i) On peut dire que $R(3)$ est représenté par $SO(3)$. Nous verrons plus loin qu'il existe bien d'autres représentations de $R(3)$ [cf chapitre VI]

(ii) Groupe des translations $T_{(3)}$ dans l'espace à 3 dimensions. Ces translations dépendent de 3 paramètres, qui sont les composantes a_x, a_y, a_z du vecteur de translation \vec{a} . Les transformations correspondantes des coordonnées s'écrivent :

$$x' = x + a_x \quad y' = y + a_y \quad z' = z + a_z \quad (\text{II-29})$$

Contrairement au cas de l'exemple précédent, on n'a pas ici une transformation linéaire. On peut cependant écrire :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{pmatrix} = M(\vec{a}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-30})$$

avec :

$$M(\vec{a}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & a_x \\ 0 & 1 & 0 & a_y \\ 0 & 0 & 1 & a_z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-31})$$

On vérifie aisément que :

$$M(\vec{a} + \vec{b}) = M(\vec{a}) M(\vec{b}) \quad (\text{II-32})$$

de sorte que les M fournissent une représentation de dimension 4 de $T_{(3)}$.

(iii) Le groupe S_N peut par exemple être représenté de la façon simple suivante :

$$\begin{aligned} \text{permutation paire} &\implies \text{matrice } (1) \\ \text{permutation impaire} &\implies \text{matrice } (-1) \end{aligned} \quad (\text{II-33})$$

C'est une représentation de dimension 1, la plus simple après la représentation triviale. Elle joue un rôle fondamental en mécanique quantique pour le système de N fermions identiques (postulat d'antisymétrisation), alors que c'est la représentation triviale pour les systèmes de bosons identiques (postulat de symétrisation). Il existe cependant des représentations de S_N de dimension plus élevée, non commutatives [$M(g) M(g') \neq M(g') M(g)$].

Considérons N objets a_1, a_2, \dots, a_N , rangés dans un ordre de référence, qui deviennent a'_1, a'_2, \dots, a'_N sous l'effet d'une permutation P_α . A P_α nous pouvons associer la matrice $M(P_\alpha)$, carrée $N \times N$, définie par :

$$(a'_1 \ a'_2 \ \dots \ a'_N) = (a_1 \ \dots \ a_N) \left(M(P_\alpha) \right) \quad (\text{II-34})$$

$[M(P_\alpha)$ est une matrice qui, dans chacune de ses lignes ou de ses colonnes,

n'a qu'un seul élément non-nul, qui vaut 1 (⁴). Par exemple, dans S_3 :

$$M(P_{231}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-35})$$

On peut alors vérifier que le produit de deux matrices M est bien la matrice associée au produit. On a donc ainsi une représentation de S_N .

Plutôt que de se limiter pour le postulat de symétrisation aux représentations de S_N de dimension 1, il a été envisagé de postuler que, pour certains types de particules identiques, il faut en mécanique quantique introduire des représentations de dimension plus élevée (para-statistiques). Cependant, l'existence de particules élémentaires nécessitant effectivement cette généralisation des postulats n'a pas été prouvée.

(iv) Il est clair que, si l'on a une représentation d'un groupe quelconque, on a également une représentation de tout sous-groupe. Or, nous avons vu plus haut que tout groupe fini d'ordre N est isomorphe à un sous-groupe de S_N . Par suite, en utilisant la représentation (II-34), on peut obtenir une représentation de tout groupe fini, appelée "représentation régulière". A chaque élément g du groupe (dans lequel on a défini un ordre de référence g_1, g_2, \dots, g_N), on associe la matrice carrée $N \times N$ $M(g)$ telle que :

$$(gg_1, gg_2, gg_3, \dots, gg_N) = (g_1, g_2, \dots, g_N) \begin{pmatrix} M(g) \end{pmatrix} \quad (\text{II-36})$$

Exercice : Construire la représentation régulière de C_{3V} .

2 - Représentations équivalentes ; caractères

Soient $M_1(g)$ et $M_2(g)$ deux représentations de même dimension P du groupe G . S'il existe une matrice S inversible telle que :

$$M_2(g) = S^{-1} M_1(g) S \quad \forall g \quad (\text{II-37})$$

les deux représentations sont dites équivalentes.

Remarques :

(i) On peut considérer que $M_1(g)$ et $M_2(g)$ sont les matrices associées, dans deux bases différentes d'un espace \mathcal{E}_P à P dimensions, à un même opérateur $\mathcal{A}(g)$; S est alors la matrice de changement de base.

(⁴) Si l'objet a_i devient a_k sous l'effet de la permutation P_{α} , le $i^{\text{ème}}$ élément de la $k^{\text{ème}}$ ligne de $M(P_{\alpha})$ vaut 1, les autres 0.

En termes d'opérateurs, deux représentations équivalentes sont en fait la même représentation.

(ii) On montre [cf. livre de Wigner cité dans l'introduction, p. 74] que toute représentation matricielle d'un groupe fini est équivalente à une représentation formée de matrices unitaires.

On appelle caractères d'une représentation l'ensemble des nombres :

$$\chi(g) = \text{Tr} \{M(g)\} \quad (\text{II-38})$$

Remarques :

(i) Pour une représentation donnée, les caractères de tous les éléments d'une même classe sont égaux :

$$\text{Tr} \{N^{-1}M N\} = \text{Tr} \{N N^{-1}M\} = \text{Tr} \{M\} \quad (\text{II-39})$$

(ii) De même, on voit immédiatement que deux représentations équivalentes ont mêmes caractères $\chi(g)$ pour tous les éléments $g \in G$.

(iii) Il existe un théorème important qui dit que toute représentation est déterminée de façon unique (bien sûr à une équivalence près) par l'ensemble de ses caractères (c'est-à-dire ceux des différentes classes de G). On trouvera par exemple la démonstration dans le livre de J.P. SERRE (référence (14) de l'introduction), chapitre I. Les caractères sont particulièrement importants dans l'étude des représentations irréductibles, que nous allons introduire plus bas.

3 - Somme et produit de deux représentations

▪ La somme (directe) de deux représentations $M_1(g)$ et $M_2(g)$ d'un même groupe G , de dimensions respectives p_1 et p_2 , est donnée par les matrices $P \times P$ (avec $P = p_1 + p_2$) :

$$M(g) = \left(\begin{array}{c|c} M_1(g) & 0 \\ \hline 0 & M_2(g) \end{array} \right) \quad (\text{II-40})$$

On vérifie facilement que les $M(g)$ donnent une autre représentation de G . Si $M_1(g)$ et $M_2(g)$ sont des matrices associées à des opérateurs $\mathcal{A}_1(g)$ et $\mathcal{A}_2(g)$ agissant respectivement dans des espaces vectoriels \mathfrak{E}_{p_1} et \mathfrak{E}_{p_2} , $M(g)$ peut être associée à un opérateur agissant dans l'espace somme directe :

$$\mathfrak{E}_P = \mathfrak{E}_{p_1} \oplus \mathfrak{E}_{p_2} \quad (\text{II-41})$$

L'opération somme permet donc, à partir de deux représentations (ou d'une seule si $M_1 \equiv M_2$), d'en construire une autre, de dimension plus grande, dont les caractères sont les sommes :

$$\chi(g) = \chi_1(g) + \chi_2(g) \tag{II-42}$$

■ Le produit (tensoriel) des représentations M_1 et M_2 [d'éléments de matrice $\langle n_1 | M_1 | n'_1 \rangle$ et $\langle n_2 | M_2 | n'_2 \rangle$] est défini par les produits tensoriels :

$$M(g) = M_1(g) \otimes M_2(g) \tag{II-43}$$

c'est-à-dire :

$$\langle n_1, n_2 | M(g) | n'_1, n'_2 \rangle = \langle n_1 | M_1(g) | n'_1 \rangle \langle n_2 | M_2(g) | n'_2 \rangle \tag{II-44}$$

Les matrices $M(g)$ peuvent maintenant être associées à des opérateurs agissant dans un espace produit tensoriel $\mathbb{E}_{p_1} \otimes \mathbb{E}_{p_2}$; leur dimension est $P = p_1 \times p_2$, et les caractères valent :

$$\chi(g) = \chi_1(g) \times \chi_2(g)$$

Remarque :

Le produit de deux représentations peut être effectué pour deux groupes différents G_1 et G_2 . On obtient alors une représentation du produit (tensoriel) $G_1 \otimes G_2$.

4 - Représentations réductibles ou irréductibles

Une représentation est dite "réductible" si elle est équivalente à une représentation qui est une somme directe de représentations du même groupe. Il faut donc que l'on puisse trouver une matrice S telle que :

$$M'(g) = S^{-1}M(g)S = \left(\begin{array}{c|c} M_1(g) & 0 \\ \hline 0 & M_2(g) \end{array} \right) \tag{II-45}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{p_1} \qquad \underbrace{\hspace{10em}}_{p_2}$

où la dimension p_1 et p_2 des deux blocs est la même quel que soit g [avec bien sûr $p_1 + p_2 = P$].

Lorsqu'on a trouvé une matrice S qui réalise l'égalité (II-45), on dit qu'on a décomposé la représentation initiale en deux représentations de dimensions plus faibles p_1 et p_2 . Le problème est de trouver une même matrice S qui convienne pour toutes les matrices $M(g)$ [Il ne suffirait

pas, par exemple, de diagonaliser chaque matrice $M(g)$, chacune dans sa base propre, pour décomposer complètement la représentation, sauf s'il se trouvait que toutes les bases propres soient les mêmes].

Si la représentation est telle qu'aucune matrice S inversible ne permette d'obtenir l'égalité (II-45) pour tous les $M(g)$, elle est appelée "irréductible".

Remarques :

(i) La notion de réductibilité se définit de même pour tout ensemble de matrices, sans référence à la représentation d'un groupe G .

(ii) Dire que la représentation est réductible est équivalent à dire qu'il existe dans l'espace \mathfrak{E}_p où agissent les opérateurs $\mathcal{A}(g)$ deux sous-espaces \mathfrak{E}_{p_1} et \mathfrak{E}_{p_2} , dont \mathfrak{E}_p est la somme directe, chacun d'entre eux étant (globalement) invariant sous l'action de tous les $\mathcal{A}(g)$.

(iii) On définit parfois la réductibilité d'un ensemble de matrices de façon moins contraignante, en imposant seulement l'invariance globale d'un sous-espace \mathfrak{E}_{p_1} sous l'action des $\mathcal{A}(g)$. Il faut alors remplacer (II-45) par :

$$M'(g) = S^{-1}M(g)S = \left(\begin{array}{c|c} M_1(g) & M_3(g) \\ \hline 0 & M_2(g) \end{array} \right) \quad (\text{II-46})$$

qui est évidemment une condition plus faible. Dans ce point de vue, on dit que, si (II-45) est réalisée, la représentation est "complètement réductible". Cette distinction n'a d'ailleurs d'intérêt que pour les ensembles infinis de matrices car on démontre que, si un ensemble fini de matrices est réductible, il est complètement réductible.

Nous prendrons ici toujours le mot "réductible" dans son sens fort (II-45) ; si on le désire, on peut considérer que le mot "complètement" est sous-entendu partout.

Un problème important est la décomposition d'une représentation donnée d'un groupe en représentations irréductibles, c'est-à-dire la mise de la représentation sous la forme d'une somme de blocs irréductibles grâce à une matrice S' convenable :

$$M''(g) = S'^{-1} M(g) S' = \left(\begin{array}{c|c|c|c} M'_1(g) & & & \\ & M'_2(g) & & 0 \\ & & M'_3(g) & \\ 0 & & & M'_4(g) \end{array} \right) \quad (\text{II-47})$$

Donnons sans démonstration un certain nombre de résultats :

- Les représentations irréductibles obtenues par décomposition d'une représentation donnée ne dépendent pas (à une équivalence près) de la façon dont est effectuée la décomposition (théorème d'unicité).

- Les représentations irréductibles d'un groupe abélien sont toutes de dimension 1. Par contre, tout groupe non commutatif possède au moins une représentation irréductible de dimension supérieure ou égale à deux.

- Le nombre de représentations irréductibles non équivalentes d'un groupe fini est égal au nombre de ses classes.

La théorie des caractères est utile pour la recherche des représentations irréductibles d'un groupe fini. En particulier, elle fournit un critère d'irréductibilité d'une représentation.

De nombreuses applications physiques existent de la théorie des groupes finis et utilisent la théorie des caractères : citons par exemple les groupes ponctuels cristallographiques, les groupes de vibration des molécules. Malgré leur utilité, nous ne les étudierons pas ici. En effet, les groupes infinis sont également d'une très grande importance et ce sont eux que nous allons maintenant aborder.

Ce chapitre est consacré à l'exposé de quelques notions sur les groupes infinis (groupes contenant un nombre infini d'éléments) et tout particulièrement les groupes ayant la puissance du continu (ensembles non dénombrables ⁽¹⁾).

Exemples :

(i) Le groupe des translations le long d'un axe donné Ox (vecteur unitaire \vec{e}_x) d'une quantité $p\vec{e}_x$, où p est un entier positif ou négatif. Ce groupe est infini, mais dénombrable (p varie de façon discrète).

(ii) Le groupe $T(1)$ des translations d'une quantité $a\vec{e}_x$, où a est un nombre réel quelconque. Ce groupe infini n'est pas dénombrable.

Nous commencerons (§ A) par donner un certain nombre de notions générales concernant les groupes continus et quelques éléments de topologie. Puis nous étudierons quelques exemples simples (§ B). Enfin, nous considèrerons deux cas particuliers importants : groupe de Galilée et groupe de Poincaré (§ C).

A - PROPRIETES GENERALES

1 - Les groupes continus

a) Définitions

Nous allons considérer un groupe G dont les éléments sont repérés par un nombre fini n de paramètres réels a_1, a_2, \dots, a_n . Ces derniers peuvent être notés de façon plus condensée par un vecteur $\vec{a} \in R^n$, de composantes a_1, a_2, \dots, a_n :

$$g = g(a_1, a_2, \dots, a_n) = g(\vec{a})$$

$\vec{a} \in R^n$ (III-1)

Les paramètres seront supposés essentiels : le groupe ne peut pas être décrit par un nombre moindre de paramètres.

^{infini}
(¹) Un ensemble est dénombrable si on peut établir une correspondance biunivoque entre ses éléments et les entiers naturels 1, 2, 3, ... Sinon, on dit que l'ensemble a la puissance du continu.
Exemple : l'ensemble des rationnels (fractions) est dénombrable, mais celui des nombres réels (rationnels et irrationnels) de l'intervalle [0,1] a la puissance du continu.

Exemple :

Pour le groupe $T_{(1)}$ des translations dans un espace à 1 dimension, le paramètre unique a est essentiel. Mais si on avait introduit deux paramètres a_1 et a_2 pour définir une translation d'un vecteur $(a_1 + a_2)\vec{e}_x$, on n'aurait évidemment pas des paramètres essentiels.

Pour décrire tout le groupe, \vec{a} doit varier dans un certain domaine D de R^n , fini ou infini. Nous supposons que D est tel qu'il existe une correspondance biunivoque entre les éléments de G et ceux de D [dans D , il n'y a pas deux points \vec{a}_1 et \vec{a}_2 qui correspondent au même élément g de G].

Se donner un vecteur \vec{a} de composantes a_1, a_2, \dots, a_n ou un élément $g \in G$ revient alors au même. Cependant, il sera souvent ^{commode} de raisonner sur les vecteurs \vec{a} au lieu des g . L'entier n est appelé dimension du groupe.

Produit :

Si $g(\vec{a})$ et $g(\vec{b})$ sont deux éléments de G , le produit $g(\vec{a}) g(\vec{b})$ appartient également à G , et peut par suite être décrit par une valeur \vec{c} du paramètre dans D :

$$g(\vec{c}) = g(\vec{a}) g(\vec{b}) \quad (\text{III-2})$$

La valeur de \vec{c} est une fonction de \vec{a} et de \vec{b} :

$$\vec{c} = \phi_2(\vec{a}, \vec{b}) \quad (\text{III-3})$$

La fonction ϕ_2 donne donc, dans D , le reflet de la loi de composition interne dans G . Elle n'est d'ailleurs pas quelconque. De l'associativité de la loi de multiplication dans G découle que :

$$\phi_2(\vec{a}, \phi_2(\vec{b}, \vec{c})) = \phi_2(\phi_2(\vec{a}, \vec{b}), \vec{c}) \quad (\text{III-4})$$

Inverse :

L'élément $g^{-1}(\vec{a})$ est décrit par une valeur \vec{a}' du paramètre de D :

$$g^{-1}(\vec{a}) = g(\vec{a}') \quad (\text{III-5})$$

avec :

$$\vec{a}' = \phi_1(\vec{a}) \quad (\text{III-6})$$

Exemple :

Pour le groupe $T_{(1)}$, ou plus généralement pour un groupe de translations repérées par leur vecteur \vec{a} :

$$\begin{cases} \phi_2(\vec{a}, \vec{b}) &= \vec{a} + \vec{b} \\ \phi_1(\vec{a}) &= -\vec{a} \end{cases} \quad (\text{III-7})$$

b) Notions intuitives de topologie

Dans R^n on définit facilement une topologie, par exemple à partir de la distance δ entre deux points \vec{a} et \vec{b} :

$$\delta(\vec{a}, \vec{b}) = \left\{ \sum_{i=1}^n (a_i - b_i)^2 \right\}^{1/2} \quad (\text{III-8})$$

On peut par suite introduire la notion de voisinage d'un point \vec{a} (ensemble ouvert), ensemble de tous les points \vec{b} tel que :

$$\delta(\vec{a}, \vec{b}) < \epsilon \quad (\text{III-9})$$

parler de points \vec{a}' tendant vers un point \vec{a} , de limite, de continuité, etc.

Dans le groupe G lui-même, nous allons supposer qu'une topologie a également été introduite, ce qui est ^{en particulier} le cas dès qu'on a défini une "distance" entre deux de ses éléments $g(\vec{a})$ et $g(\vec{b})$.

Exemples :

(i) Dans le groupe $T(3)$ des translations, on peut définir la distance entre deux translations par le module de la différence de leur vecteur \vec{x} . C'est simplement la distance [au sens habituel dans l'espace ordinaire R^3] entre les images d'un même point par les deux opérations.

(ii) Dans le groupe $R(3)$, on peut définir la distance entre deux rotations \mathcal{R}' et \mathcal{R}'' comme la valeur supérieure, lorsque la direction d'un vecteur unitaire \vec{e} varie, du module du vecteur $\vec{e}'' - \vec{e}' = \mathcal{R}''\vec{e} - \mathcal{R}'\vec{e}$

Pour deux rotations de même axe [dans $SO(2)$ par exemple], la distance est alors le module du sinus de la différence des angles.

On peut alors définir, comme en (III-9), le voisinage de chaque élément g . Le groupe G est alors un "groupe topologique" ⁽²⁾.

(²) Ayant défini une topologie dans le domaine D où varie le paramètre \vec{a} , on peut essayer d'induire par la correspondance $\vec{a} \implies g(\vec{a})$ une topologie dans G . Si $g(\vec{a})$ et $g(\vec{b})$ sont deux éléments du groupe, on peut leur associer le module $|\vec{c}|$ du vecteur \vec{c} de l'opération $g(\vec{a})g^{-1}(\vec{b})$:

$$|\vec{c}| = \left\{ \sum_{i=1}^n c_i^2 \right\}^{1/2} = |\phi_2(\vec{a}, \phi_1(\vec{b}))|$$

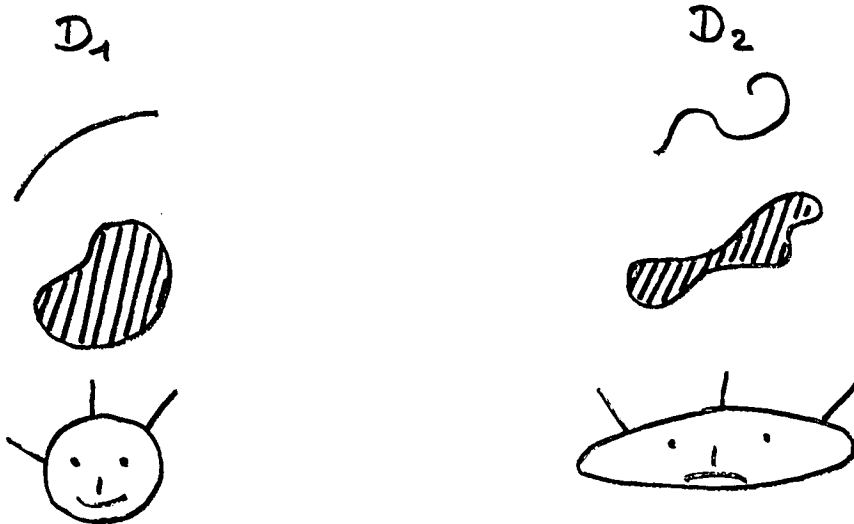
[ce nombre peut éventuellement être symétrisé pour que \vec{a} et \vec{b} y jouent le même rôle]. Des expressions de ce type peuvent servir à introduire une distance et donc une topologie dans G .

Nous appellerons "groupe continu" un tel groupe où le produit gg' ainsi que l'inverse g^{-1} , sont des fonctions continues de g et g' . De plus, nous supposerons que \vec{x} varie "de façon continue" dans D et que les fonctions $\vec{\phi}_1$ et $\vec{\phi}_2$ sont des fonctions continues de leurs variables (sauf éventuellement sur la frontière du domaine D).

En topologie, une notion importante est celle d'homéomorphie : c'est une correspondance biunivoque et bicontinue entre deux ensembles topologiques D_1 et D_2 . Lorsqu'une telle correspondance existe, D_1 et D_2 sont dits homéomorphes.

Exemples :

(i) ensembles homéomorphes :



(ii) non homéomorphes :

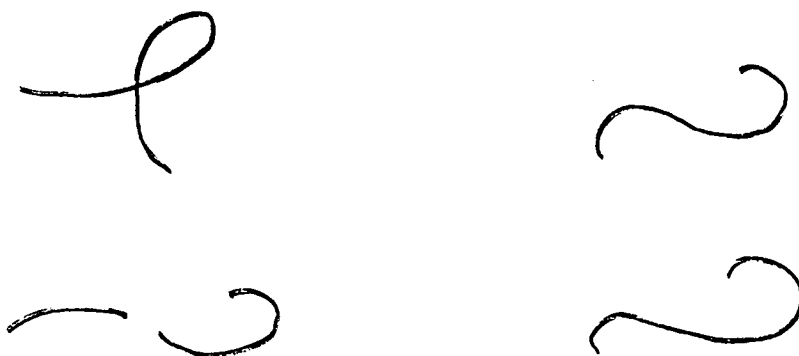


Fig III-2

Si le volume de D est fini, nous dirons que le groupe est "compact" ⁽³⁾.

Si ce volume est fait "d'un seul morceau", D et par suite le groupe G seront dits "connexes" ⁽⁴⁾.

Exemple :

Domaine non-connexe (en deux morceaux) :

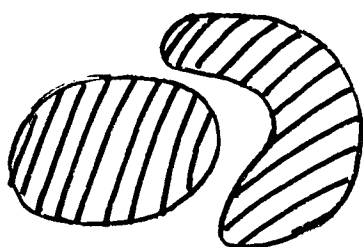


Fig III-3

Une notion utile est celle de "chemins homotopes" (ou, plus simplement "équivalents"). Un chemin dans D sera défini comme une trajectoire d'un point M de D dont la position dépend de façon continue d'un paramètre (qui peut par exemple être interprété comme le temps) variant dans un intervalle fini. De façon plus précise, un chemin est l'image dans D par une correspondance continue f d'un intervalle fermé $[t_0, t_1]$ de la droite réelle (axe des temps par exemple) ; les points M du chemin sont donc donnés par $M = f(t)$ avec $t_0 \leq t \leq t_1$ (si $t_0 < t_1$). On peut convenir de prendre une fois pour toutes $t_0 = 0$ et $t_1 = 1$.

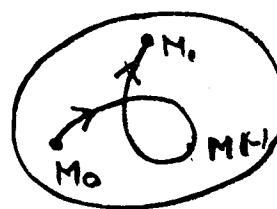
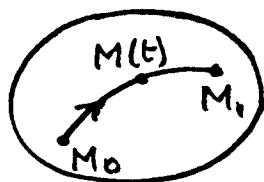


Fig III-4

(³) De façon générale, on dit en mathématiques qu'un ensemble ^(espace métrique) est compact si, de toute suite infinie de ses éléments, on peut extraire une suite convergente. Si on se limite à l'étude des groupes de Lie, on peut se contenter de cette définition plus simple.

(⁴) La véritable définition d'un ensemble topologique connexe est qu'il n'est pas la réunion de deux ouverts non vides sans points communs.

Les points $M_0 = f(t_0)$ et $M_1 = f(t_1)$ sont les extrémités du chemin [cf figure III-4]. Si M_0 et M_1 sont confondus [le chemin se referme sur lui-même], on dit que le chemin est un "lacet" ou encore un "chemin fermé".

Supposons que, dans un ensemble, deux points quelconques ^{soient} toujours les extrémités d'un ou plusieurs chemins (on peut passer continûment d'un point à l'autre.); l'ensemble est alors connexe.

Deux chemins de mêmes extrémités M_0 et M_1 sont dits "homotopes" si l'on peut déformer le premier de façon continue pour obtenir le second (ou inversement). Partant du premier chemin $M(t)$ allant de M_0 à M_1 , on doit donc pouvoir définir à chaque instant une transformation continue des points $M(t)$ qui les amène sur les points correspondants au second chemin [cf. Figure III-5] :

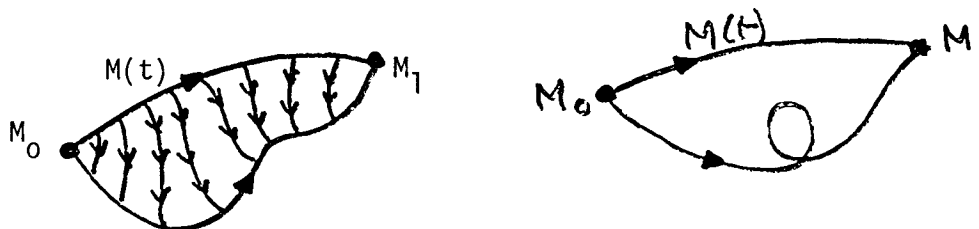


Figure III-5

Cette notion de chemins homotopes s'applique en particulier aux chemins fermés. Si un chemin fermé peut être de façon continue déformé en un "chemin nul", où les points $M(t)$ sont confondus avec M_0 pour tout t [le point M reste immobile], on dit que ce chemin est "homotope à zéro".

Exemples :

(i) L'ensemble des points intérieurs à un cercle du plan est un ensemble où tous les chemins ^{fermés} sont homotopes à zéro [cf figure III-6] :

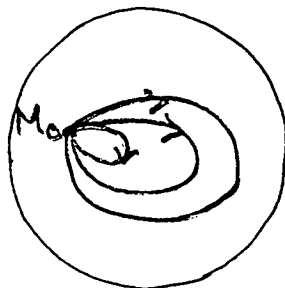


Figure III-6

Il en est de même de l'ensemble des points de la surface d'une sphère (dans l'espace à 3 dimensions).

(ii) Par contre, si on exclut de l'ensemble précédent les points intérieurs à un petit cercle concentrique au premier (ou simplement le

centre du cercle lui-même), on ne peut pas passer continûment d'un chemin fermé qui fait q tours de l'origine à un autre qui en fait q' (si $q' \neq q$). Il existe donc dans un tel ensemble des chemins non homotopes et des lacets non homotopes à zéro.

(iii) Considérons l'ensemble des points intérieurs à une sphère traversée par un fil électrique, suivant un de ses diamètres, ce fil étant parcouru par un courant i . Le théorème d'Ampère indique que les circulations du champ magnétique \vec{B} le long des chemins homotopes sont égales, nulles pour les chemins homotopes à zéro.

(iv) Dans le plan complexe, l'intégrale d'une fonction complexe le long d'un chemin fermé est nulle si ce chemin est tracé dans le domaine Δ où la fonction est dérivable (conditions de Cauchy), et s'il est homotope à zéro dans Δ .

Si tous les chemins/fermés de l'ensemble topologique sont homotopes à zéro, l'ensemble est dit "simplement connexe" ^{fermés} (5); dans le cas contraire, "non-simplement connexe".

Exemple :

Un ensemble qui comporte des "trous", même s'il est "en un seul morceau" (connexe), n'est pas simplement connexe. C'est le cas de l'exemple (ii) précédent ou d'un ensemble comme celui schématisé sur la figure III-7 :

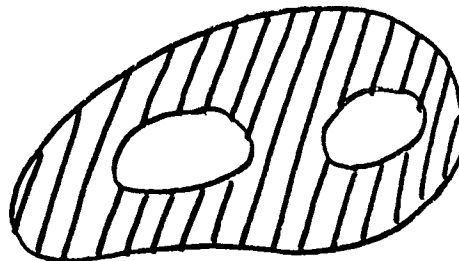


Fig III-7

Considérons enfin l'ensemble des chemins fermés d'origine M_0 donnée. Cet ensemble peut être divisé en un certain nombre de classes d'équivalence, comprenant tous les chemins fermés homotopes entre eux. Nous appellerons $\Pi_1(M_0)$ l'ensemble de ces classes. D'autre part, on peut

(5) Nous appellerons p -connexe un ensemble où il existe un nombre maximum de p chemins fermés non homotopes. Pour un ensemble comportant des "trous" comme celui de la figure III-7, p est infini. Dans le cas du groupe des rotations $R(3)$, nous verrons au chapitre V que $p = 2$.

définir le produit de deux chemins fermés d'origine M_0 [de façon intuitive, si le point mobile $M(t)$ décrit le premier chemin de M_0 à M_0 , puis le second, on obtient un autre chemin fermé qu'on appelle produit]. On vérifie que le produit permet de définir une loi de composition dans $\Pi_1(M_0)$, que chaque classe a un inverse (chemins parcourus en sens opposés), que l'élément neutre existe (chemin homotope à zéro). L'ensemble $\Pi_1(M_0)$ est donc un groupe, que l'on appelle "groupe d'homotopie". Pour un groupe connexe, on démontre que la structure du groupe Π_1 est la même quel que soit le point M_0 .

Exemples :

- (i) Pour un groupe simplement connexe, Π_1 est le groupe Z_1 à un élément. Si le groupe est p-connexe, Π_1 a p éléments distincts.
- (ii) Dans les cas envisagés plus haut où l'ensemble est l'intérieur d'un cercle moins son centre, ou d'une sphère moins son diamètre, Π_1 est isomorphe au groupe commutatif Z_∞ .
- (iii) Un tore, dans l'espace à 3 dimensions, a pour groupe Π_1 un groupe isomorphe à $Z_\infty \otimes Z_\infty$.
- (iv) Pour un ensemble comportant r "trous", le groupe Π_1 est engendré par r éléments (associés respectivement à un chemin entourant chacun des trous), et a un nombre infini d'éléments. Π_1 n'est pas commutatif dans ce cas (si $r > 1$) : il ne revient pas au même de faire q fois le tour d'un trou et q' fois le tour d'un autre, ou d'inverser ces opérations.

2 - Groupes de Lie

a) Définitions

Aux conditions énoncées plus haut pour que le groupe G soit continu, nous ajouterons celle que $\vec{\phi}_1$ et $\vec{\phi}_2$ sont analytiques (développables en série entière). Le groupe est alors un groupe de Lie.

Dans la pratique, la plupart des groupes de Lie que l'on considère en physique sont des groupes de matrices $M(\vec{a})$, régulières, $N \times N$ (⁶). Nous allons donc nous limiter à ce cas. De plus, par commodité, nous supposerons que la matrice unité $N \times N$ est décrite par le paramètre $\vec{a} = \vec{0}$

$$M(\vec{0}) = \mathbf{1} \tag{III-10}$$

Si ce n'était pas le cas, une simple translation du domaine D dans R^n nous y ramènerait.

Donnons tout de suite quelques exemples simples de tels groupes.

(⁶) Ne pas confondre N avec la dimension n du groupe (voir exemples suivants).

Exemples :

(i) Groupe des homothéties à une dimension, définies par $x' = ax$ ($a > 0$), c'est-à-dire par des matrices 1×1 . C'est un groupe de dimension 1, abélien, non compact puisque le domaine accessible à a est tout un demi-axe positif.

(ii) Groupe $GL(2, c)$ des matrices régulières complexes 2×2 :

$$M(\vec{a}) = \begin{pmatrix} 1 + a_1 & a_3 \\ a_4 & 1 + a_2 \end{pmatrix} \text{ avec } a_1 + a_2 + (a_1 a_2 - a_3 a_4) \neq -1 \quad \text{(III-11)}$$

On a :

$$M(\vec{a}) M(\vec{b}) = \begin{pmatrix} (1 + a_1)(1 + b_1) + a_3 b_4 & (1 + a_1)b_3 + a_3(1 + b_2) \\ a_4(1 + b_1) + (1 + a_2)b_4 & a_4 b_3 + (1 + a_2)(1 + b_2) \end{pmatrix} \quad \text{(III-12)}$$

qui donne la fonction Φ_2 . Ce groupe est non abélien, de dimension $n = 8$ (puisque la donnée d'un nombre complexe équivaut à celle de deux réels), alors que $N = 2$.

(iii) Groupe $R(2)$, ou $SO(2)$, des matrices ^{de rotation} autour d'un axe fixe.

Nous appellerons ici ϕ le paramètre unique ($n = 1$) :

$$M(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad 0 \leq \phi < 2\pi \quad \text{(III-13)}$$

On a simplement ici:

$$\begin{cases} \Phi_1 (a = \phi) & = -\phi \\ \Phi_2 (a = \phi, b = \phi') & = \phi + \phi' \end{cases} \quad \text{(III-14)}$$

C'est un groupe abélien, dont le domaine D peut être représenté dans le plan par une circonférence [figure III-8] :

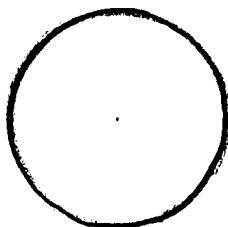


Figure III-8

[Il vaut mieux prendre le domaine D sous la forme d'un cercle que d'un segment de droite de longueur 2π , dont les deux extrémités correspondraient à des rotations infiniment voisines; on respecte ainsi la topologie du groupe]. C'est un groupe compact, connexe, mais non simplement connexe [groupe $\Pi_1 = \mathbb{Z}_\infty$]; il est homéomorphe au groupe des nombres complexes de module 1.

(iv) Groupe $O(2)$ [matrices associées aux rotations dans le plan autour d'un point fixe O , ou à leur produit par une symétrie par rapport à un axe passant par O] :

$$M(\phi) = \begin{pmatrix} \epsilon \cos \phi & -\sin \phi \\ \epsilon \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad 0 \leq \phi < 2\pi ; \epsilon = \pm 1 \quad (\text{III-15a})$$

On a :

$$\det M(\phi) = \epsilon \quad (\text{III-15b})$$

Le domaine D associé à ce groupe comprend ici deux morceaux (deux "nappes") associés respectivement aux matrices de déterminants $+1$ et -1 (on ne peut pas passer continument de $+1$ à -1).

Il se représente donc par deux cercles [figure III-9]. Ce groupe n'est pas connexe, mais il est compact.

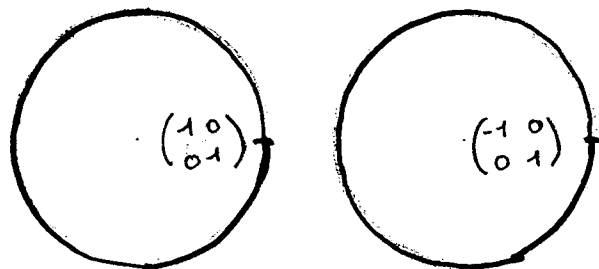


Figure III-9

b) Opérateurs infinitésimaux

Considérons donc un groupe de matrices $M(\vec{a})$, $N \times N$, dépendant du paramètre (vectoriel) \vec{a} . Nous supposons que les $M(\vec{a})$ forment un groupe de Lie et que leurs éléments de matrice sont des fonctions continues et dérivables des composantes de \vec{a} . Rappelons que, par hypothèse :

$$M(\vec{0}) = (\mathbb{I}) \quad (\text{III-16})$$

Nous allons nous intéresser à des transformations, proches de l'identité, pour lesquelles le paramètre \vec{a} prend une valeur infinitésimale. Un développement de Taylor au premier ordre de $M(\delta\vec{a})$ donne :

$$M(\delta\vec{a}) = (\mathbb{I}) + \sum_{i=1}^n \delta a^i X_i + \dots \quad (\text{III-17})$$

où X_i est une matrice $N \times N$:

$$X_i = \left. \frac{\partial}{\partial a^i} M(\vec{a}) \right|_{\vec{a} = \vec{0}} \quad (\text{III-18})$$

Nous utiliserons fréquemment à partir de maintenant un indice en position haute (indice contravariant) pour désigner les composantes δa^i de $\delta\vec{a}$ (ou a^i de \vec{a}).

Il n'y a aucune raison à priori pour que les X_i appartiennent au groupe G et, dans les exemples qui vont suivre, ce ne sera effectivement pas le cas.

Nous supposons que les matrices X_i sont non-nulles et indépendantes (l'une d'entre elles n'est pas combinaison linéaire des autres). La formule (III-17) exprime que, pour toute matrice $M(\delta\vec{a})$ où le paramètre est infinitésimal, la différence avec la matrice unité est une combinaison linéaire des X_i (c'est-à-dire appartient à un espace vectoriel dont les X_i forment une base).

Prenons maintenant deux opérateurs infinitésimaux $M(\delta\vec{a})$ et $M(\delta\vec{b})$ et considérons leur "commutateur". Ce dernier appartient au groupe G et peut s'écrire $M(\delta\vec{c})$ avec :

$$M(\delta\vec{c}) = M(\delta\vec{a}) M(\delta\vec{b}) M^{-1}(\delta\vec{a}) M^{-1}(\delta\vec{b}) \quad (\text{III-19})$$

Nous allons calculer cette matrice jusqu'au deuxième ordre inclus en $\delta\vec{a}$ et $\delta\vec{b}$, c'est-à-dire en incluant ^{les termes} du deuxième ordre, soit "carrés" en $\delta a_i \delta a_j$ ou $\delta b_i \delta b_j$, soit "rectangles" en $\delta a_i \delta b_j$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$). Le calcul est en fait simplifié par le fait que tous les termes carrés sont nuls. En effet, si $\delta\vec{b} = 0$, $M(\delta\vec{b})$ est la matrice unité et l'expression (III-19) montre qu'il en est de même pour $M(\delta\vec{c})$. Cette matrice est donc indépendante de $\delta\vec{a}$ et tous les termes de son développement (sauf celui d'ordre 0) sont nuls. De même, si $\delta\vec{a} = 0$, on a aussi $M(\delta\vec{c}) = (\mathbb{1})$ ce qui entraîne la nullité des termes carrés en $\delta\vec{b}$. Nous savons donc dès le départ que nous pouvons ignorer tous les termes du second ordre qui ne sont pas croisés en $\delta\vec{a} \cdot \delta\vec{b}$, les autres devant de toute façon s'annuler à la fin du calcul. Ceci nous permet par exemple d'utiliser telle quelle la formule (III-17), sans pousser plus loin le développement. De même, nous avons le droit d'écrire :

$$M^{-1}(\delta\vec{a}) = (\mathbb{1}) - \sum_{i=1}^n \delta a^i X_i + \dots \quad (\text{III-20})$$

en ignorant les termes suivants [en multipliant les deuxièmes membres de (III-19) et (III-20) entre eux, on vérifie qu'on obtient bien $(\mathbb{1})$ à des termes du second ordre près].

Dans ces conditions, le calcul donne :

$$M(\delta\vec{a}) M(\delta\vec{b}) = (\mathbb{1}) + \sum_{i=1}^n \delta a^i X_i + \sum_{j=1}^n \delta b^j X_j + \sum_{ij} \delta a^i \delta b^j X_i X_j \quad (\text{III-21})$$

Multiplions à droite cette égalité par $(1 - \sum_i \delta a_i X_i)$. Il vient :

$$\begin{aligned} M(\delta\vec{a}) M(\delta\vec{b}) M^{-1}(\delta\vec{a}) &= (\mathbb{1}) + \sum_{i=1}^n \delta a^i X_i + \sum_{j=1}^n \delta b^j X_j \\ &+ \sum_{i,j} \delta a^i \delta b^j X_i X_j - \sum_{i=1}^n \delta a^i X_i - \sum_{i,j} \delta a^i \delta b^j X_j X_i \end{aligned} \quad (\text{III-22})$$

égalité où les termes en $\delta a_i X_i$ se retranchent et disparaissent. On voit alors apparaître le commutateur :

$$[X_i, X_j] = X_i X_j - X_j X_i \quad (\text{III-23})$$

des deux matrices X_i et X_j . Il ne nous reste plus qu'à multiplier à droite par $(1 - \sum_j \delta b^j X_j)$ ce qui, dans le cadre de notre approximation, conduit simplement à retrancher $\sum_j \delta b^j X_j$ du second membre de (III-22). Donc :

$$M(\delta\vec{a}) M(\delta\vec{b}) M^{-1}(\delta\vec{a}) M^{-1}(\delta\vec{b}) = M(\delta\vec{c}) = (\mathbb{1}) + \sum_{i,j=1}^n \delta a^i \delta b^j [X_i, X_j] + \dots \quad (\text{III-24})$$

(les termes négligés étant du 3ème ordre ou plus).

Examinons maintenant ce que donnent ces opérations en termes de paramètres du groupe. Il faut pour cela utiliser les fonctions $\vec{\Phi}_1$ et $\vec{\Phi}_2$; on a :

$$\begin{aligned} M(\delta\vec{a}) M(\delta\vec{b}) &\iff \delta\vec{c}_1 = \vec{\Phi}_2(\delta\vec{a}, \delta\vec{b}) \\ M(\delta\vec{a}) M(\delta\vec{b}) M^{-1}(\delta\vec{a}) &\iff \delta\vec{c}_2 = \vec{\Phi}_2(\delta\vec{c}_1, \vec{\Phi}_1(\delta\vec{a})) \end{aligned} \quad (\text{III-25})$$

et enfin :

$$M(\delta\vec{c}) \iff \delta\vec{c} = \vec{\Phi}_2(\delta\vec{c}_2, \vec{\Phi}_1(\delta\vec{b})) \quad (\text{III-26})$$

Nous avons déjà vu que, dans notre approximation, $M(\delta\vec{a})$ et $M(-\delta\vec{a})$ peuvent être considérées comme inverses l'une de l'autre. Donc :

$$\vec{\Phi}_1(\delta\vec{a}) = -\delta\vec{a} + \dots \quad (\text{III-27})$$

Pour obtenir $\delta\vec{c}$, nous allons faire un calcul simplement calqué sur celui effectué précédemment. Si $\delta\vec{a}$ est nul, $\delta\vec{c}_1$ vaut $\delta\vec{b}$. De même, si $\delta\vec{b}$ est nul, $\delta\vec{c}_1 = \delta\vec{a}$. Par suite :

$$\delta\vec{c}_1 = \vec{\Phi}_2(\delta\vec{a}, \delta\vec{b}) = \delta\vec{a} + \delta\vec{b} + \sum_{i,j=1}^n \delta a^i \delta b^j \vec{F}_{ij} + \dots \quad (\text{III-28})$$

(comme plus haut, nous ignorons les termes carrés du second ordre) avec :

$$\vec{F}_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial a^i \partial b^j} \vec{\Phi}_2(\vec{a}, \vec{b}) \Big|_{\vec{a} = \vec{b} = 0} \quad (\text{III-29})$$

Evaluons ensuite $\delta\vec{c}_2$:

$$\delta\vec{c}_2 = \vec{\Phi}_2(\delta\vec{c}_1, -\delta\vec{a}) = \delta\vec{a} + \delta\vec{b} + \sum_{ij} \delta a^i \delta b^j F_{ij} - \delta\vec{a} + \sum_{ij} (\delta a^i + \delta b^i)(-\delta a^j) \vec{F}_{ij} + \dots \quad (\text{III-30})$$

où les termes en $\delta\vec{a}$ se compensent, et les termes en $\delta a_i \delta a_j$ peuvent être ignorés. Enfin :

$$\delta\vec{c} = \vec{\Phi}_2(\delta\vec{c}_2, -\delta\vec{b}) = \delta\vec{b} + \sum_{ij} \delta a^i \delta b^j (\vec{F}_{ij} - \vec{F}_{ji}) - \delta\vec{b} + \sum_{ij} \delta b^i \delta b^j \vec{F}_{ij} + \dots \quad (\text{III-31})$$

qui nous donne simplement, en ignorant le terme en $\delta b_i \delta b_j$:

$$\delta\vec{c} = \sum_{ij} \delta a^i \delta b^j [\vec{F}_{ij} - \vec{F}_{ji}] \quad (\text{III-32})$$

Si l'on appelle f^k la $k^{\text{ième}}$ composante de \vec{F} :

$$\vec{F}_{ij} = \sum_{k=1}^n f_{ij}^k \vec{e}_k \quad (\text{III-33})$$

[Les \vec{e}_k sont les vecteurs unitaires de la base de R^n] on a aussi :

$$\delta c^k = \sum_{i,j=1}^n \delta a^i \delta b^j (f_{ij}^k - f_{ji}^k) \quad (\text{III-34})$$

L'égalité (III-20) nous permet d'évaluer toute matrice voisine de l'unité dont le paramètre est infinitésimal. Appliquée à $\delta\vec{c}$, elle donne :

$$M(\delta\vec{c}) = (\mathbb{1}) + \sum_{i,j,k=1}^n \delta a^i \delta b^j (f_{ij}^k - f_{ji}^k) X_k \quad (\text{III-35})$$

Si nous comparons à l'égalité (III-24), et compte tenu du fait que les X_k sont des matrices linéairement indépendantes, nous obtenons par identification :

$$[X_i, X_j] = \sum_{k=1}^n C_{ij}^k X_k \quad (\text{III-36})$$

avec :

$$C_{ij}^k = f_{ij}^k - f_{ji}^k \quad (\text{III-37})$$

Donc, quels que soient X_i et X_j , leur commutateur est encore une combinaison linéaire de n matrices X .

c) Constantes de structures ; algèbre de Lie

Les nombres C_{ij}^k , qui sont reliés d'après (III-37) aux dérivées secondes à l'origine de la fonction $\vec{\Phi}_2$, sont appelés "constantes de structures" du groupe. La relation d'antisymétrie :

$$C_{ij}^k = -C_{ji}^k \quad (\text{III-38})$$

permet de voir qu'il y a en fait $n^2(n - 1)/2$ constantes de structure pour un groupe de dimension n .

Les constantes ont été introduites à partir de considérations portant uniquement sur des matrices $M(\delta\vec{a})$ infiniment proches de la matrice unité ($\mathbb{1}$). On pourrait donc croire que les C_{ij}^k traduisent uniquement des propriétés du groupe au voisinage de l'élément identité. En fait, ce n'est pas le cas ; en effectuant le produit :

$$M(\vec{a}_0) M(\delta\vec{a}) \tag{III-39}$$

on peut obtenir des matrices variant de façon infinitésimale autour d'un élément quelconque donné $M(\vec{a}_0)$ du groupe. Les opérateurs X_i , les constantes de structure, etc, traduisent donc des propriétés du groupe valables au voisinage de tout élément.

Les constantes C_{ij}^k jouent un rôle très important dans l'étude des groupes de Lie. Elles donnent les propriétés locales de la loi de composition du groupe, indiquent si cette loi est commutative (7); etc.

Pour un groupe continu, les constantes de structure jouent donc, en quelque sorte, le rôle de la table de multiplication pour un groupe fini.

Elles ne suffisent cependant pas à déterminer entièrement le groupe, c'est-à-dire sa loi de multiplication [la fonction Φ_2]. On montre (nous l'admettons ici sans démonstration) que deux groupes de Lie de même dimension n , ayant les mêmes constantes de structure, sont localement isomorphes, mais pas nécessairement globalement (8). [on montre que ces deux groupes sont homomorphes à un même groupe (9)].

Au voisinage d'un élément $M(\vec{a}_0)$ donné, les égalités (III-17) et (III-39) nous montrent que les variations infinitésimales de toute matrice M sont données par une combinaison linéaire des X_i :

$$X = \sum_i \lambda^i X_i \tag{III-40}$$

(7) Un groupe abélien se reconnaîtra à la nullité de toutes les constantes de structure.

(8) Un exemple sur lequel nous reviendrons est donné par $SO(3)$ et $SU(2)$ qui ont mêmes constantes de structure et ne sont que localement isomorphes.

(9) Si l'on se donne une algèbre de Lie, on peut donc lui faire correspondre plusieurs groupes G, G', \dots qui ne sont pas nécessairement simplement connexes. Cependant, parmi eux, il en existe un G_U qui est simplement connexe et appelé "groupe de recouvrement universel" des G . Un homomorphisme [de noyau discret, isomorphe au groupe d'homotopie Π_1 de G] permet de passer de G_U à G .

L'ensemble \mathcal{L} des opérateurs X ainsi définis (où les λ_i ont des valeurs réelles quelconques) constitue un espace vectoriel appelé "algèbre de Lie" du groupe. Par définition, les X_i forment donc une base de \mathcal{L} . Comme nous l'avons déjà noté, les éléments de cette algèbre n'appartiennent en général pas à G .

Rappelons que, de façon générale, une algèbre est un espace vectoriel muni d'une loi de composition interne supplémentaire (produit) bilinéaire, distributive par rapport à l'addition. En tout, 3 lois de composition (dont deux internes) sont donc définies dans une algèbre : multiplication par un scalaire λ , addition interne, multiplication interne. Dans le cas d'une algèbre de Lie, la deuxième loi est simplement la somme $X + X'$ des deux opérateurs, et la troisième fait correspondre à X et X' leur commutateur :

$$X, X' \implies [X, X'] \quad \text{(III-41)}$$

Cette dernière loi n'est en général pas associative (on dit que l'algèbre n'est pas associative) puisqu'on a l'égalité de Jacobi :

$$[X, [X', X'']] + [X', [X'', X]] + [X'', [X, X']] = 0 \quad \text{(III-42)}$$

Cette égalité permet d'ailleurs d'obtenir certaines contraintes satisfaites par les constantes de structure. En effet, si l'on reporte (III-36) dans (III-42), on obtient, compte tenu de l'indépendance linéaire des X_i :

$$\sum_{\ell} \{C_{ij}^{\ell} C_{\ell k}^m + C_{jk}^{\ell} C_{\ell i}^m + C_{ki}^{\ell} C_{\ell j}^m\} = 0 \quad \forall m ; \forall i, j, k. \quad \text{(III-43)}$$

[les indices i, j, k subissent dans le premier membre de cette égalité une permutation circulaire, alors que m ne bouge pas].

Inversement, on montre que, si l'on se donne des constantes de structure quelconques, antisymétriques [$C_{ij}^k = -C_{ji}^k$] satisfaisant à la relation de Jacobi (III-43), on peut définir (au moins) une loi de composition $\vec{\phi}_2(\vec{a}, \vec{b})$ et donc un groupe de Lie G correspondant.

Un problème intéressant en mathématiques est l'utilisation des relations (III-38) et (III-42) pour construire les algèbres de Lie possibles pour chaque dimension n donnée. Nous ne l'aborderons pas dans ce cours.

Nous appellerons opérateur de Lie toute matrice de \mathcal{L} , c'est-à-dire toute matrice X de la forme de (III-40) ; nous réserverons le nom de "générateurs infinitésimaux" aux mêmes opérateurs multipliés par la constante imaginaire i , dont l'avantage sera d'être hermitiques (et nons antihermitiques) dans plusieurs cas physiques intéressants.

Remarque :

L'égalité (III-43) est liée à l'associativité de la loi de composition interne dans le groupe G, associativité qui se traduit par la relation (III-4) pour la fonction $\vec{\Phi}_2$. Considérons en effet le produit $M(\vec{\delta h}) = M(\vec{\delta a}) M(\vec{\delta b}) M(\vec{\delta c})$ de 3 matrices du groupe. On a :

$$\vec{\delta h} = \vec{\Phi}_2[\vec{\Phi}_2(\vec{\delta a}, \vec{\delta b}), \vec{\delta c}] = \vec{\Phi}_2[\vec{\delta a}, \vec{\Phi}_2(\vec{\delta b}, \vec{\delta c})] \quad (\text{III-44})$$

Calculons les termes en $\delta a \delta b \delta c$ qui apparaissent dans δh . D'après (III-29) :

$$\begin{cases} \vec{\Phi}_2(\vec{\delta a}, \vec{\delta b}) &= \vec{\delta a} + \vec{\delta b} + \sum_{ij} \vec{F}_{ij} \delta a^i \delta b^j + \dots \\ \vec{\Phi}_2(\vec{\delta b}, \vec{\delta c}) &= \vec{\delta b} + \vec{\delta c} + \sum_{jk} \vec{F}_{jk} \delta b^j \delta c^k + \dots \end{cases} \quad (\text{III-45})$$

En utilisant une seconde fois (III-29), on trouve que les termes cherchés sont :

$$\sum_{lk} \vec{F}_{lk} \left(\sum_{ij} f_{ij}^l \delta a^i \delta b^j \right) \delta c^k = \sum_{il} \vec{F}_{il} \left(\sum_{jk} f_{jk}^l \delta b^j \delta c^k \right) \delta a^i \quad (\text{III-46})$$

Par identification des termes correspondants, il vient :

$$\sum_l f_{ij}^l \vec{F}_{lk} = \sum_l f_{jk}^l \vec{F}_{il} \quad (\text{III-47a})$$

ou encore :

$$\sum_l f_{ij}^l f_{lk}^m = \sum_l f_{jk}^l f_{il}^m \quad (\text{III-47b})$$

← [quels que soient i, j, k et m]. D'autre part, d'après la définition de C_{ij}^k , le premier membre de (III-43) vaut :

$$\begin{aligned} & \sum_l (f_{ij}^l - f_{ji}^l) (f_{lk}^m - f_{kl}^m) + \sum_l (f_{jk}^l - f_{kj}^l) (f_{li}^l - f_{il}^l) \\ & + \sum_l (f_{ki}^l - f_{ik}^l) (f_{lj}^m - f_{jl}^m) \end{aligned}$$

quantité dont on montre en utilisant 6 fois l'égalité (III-47b) [et en changeant les noms des indices] qu'elle est nulle, ce qui redémontre donc (III-43)

1 - Groupe SO(2)

Ses matrices sont données en (III-13). On a :

$$M(d\phi) = \begin{pmatrix} 1 & -d\phi \\ d\phi & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{III-48})$$

et donc :

$$X = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i\sigma_y \quad (\text{III-49})$$

où σ_y est la seconde matrice de Pauli :

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III-50})$$

L'algèbre de Lie est ici de dimension 1, et l'unique générateur infinitésimal associé est σ_y . On n'a pas de constante de structure (groupe abélien).

Examinons comment remonter du générateur infinitésimal aux transformations finies. On peut écrire :

$$\begin{aligned} M(\phi + d\phi) &= M(\phi) M(d\phi) \\ &= M(\phi) [1 - id\phi \sigma_y] \end{aligned} \quad (\text{III-51})$$

et :

$$dM(\phi) = -i M(\phi) \sigma_y d\phi \quad (\text{III-52})$$

Comme on a ici en fait un seul opérateur (qui commute évidemment avec lui-même), on peut intégrer l'équation différentielle :

$$\frac{dM(\phi)}{d\phi} = -i M(\phi) \sigma_y \quad (\text{III-53})$$

comme une équation différentielle ordinaire, de sorte que :

$$M(\phi) = e^{-i\phi \sigma_y} \quad (\text{III-54})$$

D'ailleurs, comme $\sigma_y^2 = 1$, on a :

$$\begin{aligned} e^{-i\phi \sigma_y} &= 1 - i\phi \sigma_y + \frac{1}{2} (i\phi)^2 + \dots \\ &= \cos\phi - i \sin\phi \sigma_y \end{aligned} \quad (\text{III-55})$$

qui nous redonne immédiatement (III-13), compte tenu de (III-50).

Ici, les matrices du groupe sont toutes les exponentielles de celles de l'algèbre de Lie (groupe exponentiel). Nous rencontrerons fréquemment ce cas. On a :

$$M(\phi) = \lim_{p \rightarrow \infty} \left(1 + \phi \frac{X}{p}\right)^p \quad (\text{III-56a})$$

Inversement, X est le logarithme des M :

$$X = \frac{1}{\phi} \lim_{p \rightarrow \infty} [p (M^{1/p} - 1)] \quad (\text{III-56b})$$

2 - Transformation de Galilée à une dimension

Les transformations des coordonnées correspondantes sont :

$$\begin{cases} x' &= x + v_0 t + x_0 \\ t' &= t + t_0 \end{cases} \quad (\text{III-57})$$

et le vecteur \vec{a} est un vecteur à 3 composantes :

$$\vec{a} \begin{cases} v_0 \\ x_0 \\ t_0 \end{cases} \quad (\text{III-58})$$

On peut écrire :

$$\begin{pmatrix} x' \\ t' \\ 1 \end{pmatrix} = M(\vec{a}) \begin{pmatrix} x \\ t \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{III-59a})$$

avec :

$$M(\vec{a}) = \begin{pmatrix} 1 & v_0 & x_0 \\ 0 & 1 & t_0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{III-59b})$$

En multipliant deux matrices $M(\vec{a})$ et $M(\vec{a}')$, on trouve immédiatement pour la loi de composition dans le groupe [fonction Φ_2]:

$$M(\vec{a}'') = M(\vec{a}) M(\vec{a}') \iff \begin{cases} v''_0 = v_0 + v'_0 \\ x''_0 = x_0 + x'_0 + v_0 t'_0 \\ t''_0 = t_0 + t'_0 \end{cases} \quad (\text{III-60})$$

Ce groupe est non abélien. Par exemple :

$$M(0, 0, t'_0) M(v_0, 0, 0) - M(v_0, 0, 0) M(0, 0, t'_0) = M(0, -v_0 t'_0, 0) \quad (\text{III-61})$$

[Dans une gare, on saute dans un train en marche de vitesse v_0 , et on attend un temps t_0 ; ou bien, on attend t_0 , et on saute ensuite dans le train ; on n'arrive pas ainsi au même endroit du train (translation)].

Construisons par dérivation l'algèbre de Lie :

$$X_1 = X_K = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad X_2 = X_P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad X_3 = X_H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III-62})$$

Nous avons appelé X_K l'opérateur associé aux transformations de Galilée pures ; X_P celui des translations d'espace ; X_H celui des translations dans le temps (la raison de ces dénominations apparaîtra dans les chapitres ultérieurs). On calcule aisément :

$$\begin{cases} [X_H, X_P] &= 0 \\ [X_K, X_P] &= 0 \\ [X_K, X_H] &= X_P \end{cases} \quad (\text{III-63})$$

Le groupe est donc "presque" abélien : la seule constante de structure non-nulle est C_{13}^2 .

Remontons des X aux transformations finies. On vérifie facilement que $(X_{1,2,3})^2 = 0$ (matrices nilpotentes). Par suite :

$$e^{aX_i} = 1 + aX_i + \frac{a^2}{2} X_i^2 + \dots = 1 + aX_i \quad (\text{III-64})$$

Donc :

$$e^{v_0 X_K} = \begin{pmatrix} 1 & v_0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad e^{x_0 X_P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & x_0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad e^{t_0 X_H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & t_0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{III-65})$$

et il vient :

$$M(v_0, x_0, t) = e^{t_0 X_H} e^{x_0 X_P} e^{v_0 X_K}$$

3 - Groupe SU(2)

Rappelons que c'est le groupe des matrices complexes 2×2 , unimodulaires [$\det M = 1$] et unitaires [$M^\dagger M = M M^\dagger = \mathbb{1}$].

Toute matrice unitaire est diagonalisable dans une base orthonormée [les vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes étant orthogonaux]. Dans cette base, M devient M' qui dépend de deux quantités ϕ_1 et ϕ_2 réelles :

$$M' = \begin{pmatrix} e^{-i\phi_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_2} \end{pmatrix} \quad (\text{III-66})$$

Si l'on pose :

$$N' = \begin{pmatrix} \phi_1 & 0 \\ 0 & \phi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{III-67})$$

on obtient immédiatement $M' = e^{-iN'}$. En revenant ensuite à la base initiale, N' devient N , et on a :

$$M = e^{-iN} \quad (\text{III-68})$$

où N est une matrice hermitique [d'après (III-67), elle est symétrique et réelle dans une base orthonormée]. Comme le déterminant ne dépend pas de la base :

$$\det M = \det M' = e^{-i(\phi_1 + \phi_2)} = e^{-i\text{Tr}\{N'\}} \quad (\text{III-69})$$

Donc (la trace ne dépend pas de la base) :

$$\text{Tr}\{N'\} = \text{Tr}\{N\} = 0 \quad (\text{III-70})$$

Cette égalité implique que, si σ_x , σ_y , et σ_z désignent les matrices de Pauli :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{III-71})$$

On peut écrire :

$$N = \frac{a_1}{2} \sigma_x + \frac{a_2}{2} \sigma_y + \frac{a_3}{2} \sigma_z \quad (\text{III-72})$$

[la condition (III-70) excluant une composante de N sur la matrice unité 2×2]. Pour finir :

$$\begin{aligned} M(\vec{a}) &= e^{-i[a_1\sigma_x + a_2\sigma_y + a_3\sigma_z]/2} \\ &= e^{-i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}/2} \\ &= e^{-ia \sigma_u/2} \end{aligned} \quad (\text{III-73})$$

où :

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2} \\ \vec{u} &= \vec{a}/a \text{ (vecteur unitaire parallèle au vecteur } \vec{a}\text{)} \\ \sigma_u &= \vec{\sigma} \cdot \vec{u} = [a_1\sigma_x + a_2\sigma_y + a_3\sigma_z]/a \end{aligned} \quad (\text{III-74})$$

[σ_u est la composante de $\vec{\sigma}$ sur l'axe parallèle au vecteur \vec{a}].

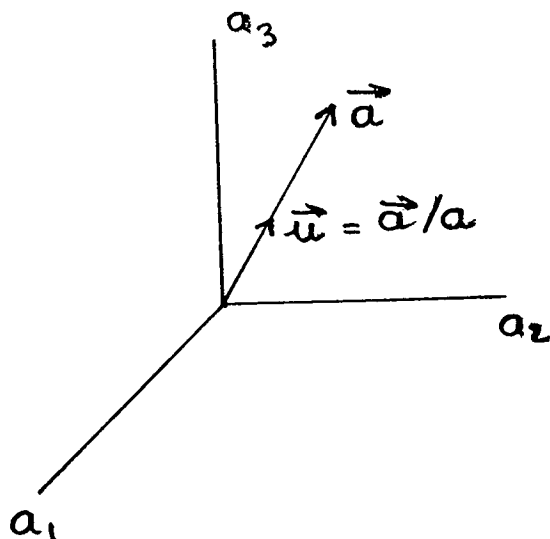


Fig III-10

La formule, généralisation de (III-55) :

$$e^{-ia\sigma_u/2} = \cos \frac{a}{2} - i \sin \frac{a}{2} \sigma_u \quad (\text{III-75})$$

donne alors :

$$M(\vec{a}) = \begin{pmatrix} \cos \frac{a}{2} - i u_z \sin \frac{a}{2} & (-iu_x - u_y) \sin \frac{a}{2} \\ (-iu_x + u_y) \sin \frac{a}{2} & \cos \frac{a}{2} + iu_z \sin \frac{a}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{III-76})$$

[où u_x, u_y et u_z sont les 3 composantes $a_1/a, a_2/a$ et a_3/a du vecteur \vec{u}].

Le produit de deux matrices unitaires unimodulaires a la même propriété. Nous n'écrirons pas la loi de groupe pour les paramètres a_1, a_2 et a_3 , dont nous n'aurons pas besoin par la suite.

Le groupe SU(2) est de dimension $n = 3$. Par dérivation de (III-73) ou (III-76), on obtient les trois opérateurs qui engendrent l'algèbre de Lie :

$$\begin{cases} X_1 &= \frac{\partial}{\partial a_1} M(\vec{a}) \Big|_{\vec{a}=0} &= -i \sigma_x / 2 \\ X_2 &= \frac{\partial}{\partial a_2} M(\vec{a}) \Big|_{\vec{a}=0} &= -i \sigma_y / 2 \\ X_3 &= \frac{\partial}{\partial a_3} M(\vec{a}) \Big|_{\vec{a}=0} &= -i \sigma_z / 2 \end{cases} \quad (\text{III-77})$$

Or, on sait que :

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \quad (\text{III-78})$$

Il vient donc :

$$[X_1, X_2] = X_3 \quad [X_2, X_3] = X_1 \quad [X_3, X_1] = X_2 \quad (\text{III-79})$$

Ces relations nous donnent immédiatement les 9 constantes de structure C_{ij}^k [dont 6 sont nulles, celles pour lesquelles $k = i$ ou j]. Nous aurons l'occasion de revenir sur l'algèbre de Lie ainsi définie, et nous verrons que c'est également celle de SO(3).

Examinons enfin quel est le domaine D de variation de \vec{a} dans l'espace réel à 3 dimensions. Si l'on choisit la base où σ_u est diagonale :

$$e^{-ia\sigma_u/2} = \begin{pmatrix} e^{-ia/2} & 0 \\ 0 & e^{ia/2} \end{pmatrix} \quad (\text{III-80})$$

Donc, le long de l'axe portant le vecteur \vec{u} , a doit varier entre -2π et $+2\pi$ pour que l'on puisse obtenir une matrice unitaire diagonale (de déterminant 1) quelconque. Le long de cet axe, deux vecteurs \vec{a} dont les extrémités sont éloignées de 2π correspondent à des matrices opposées [figure III-11].

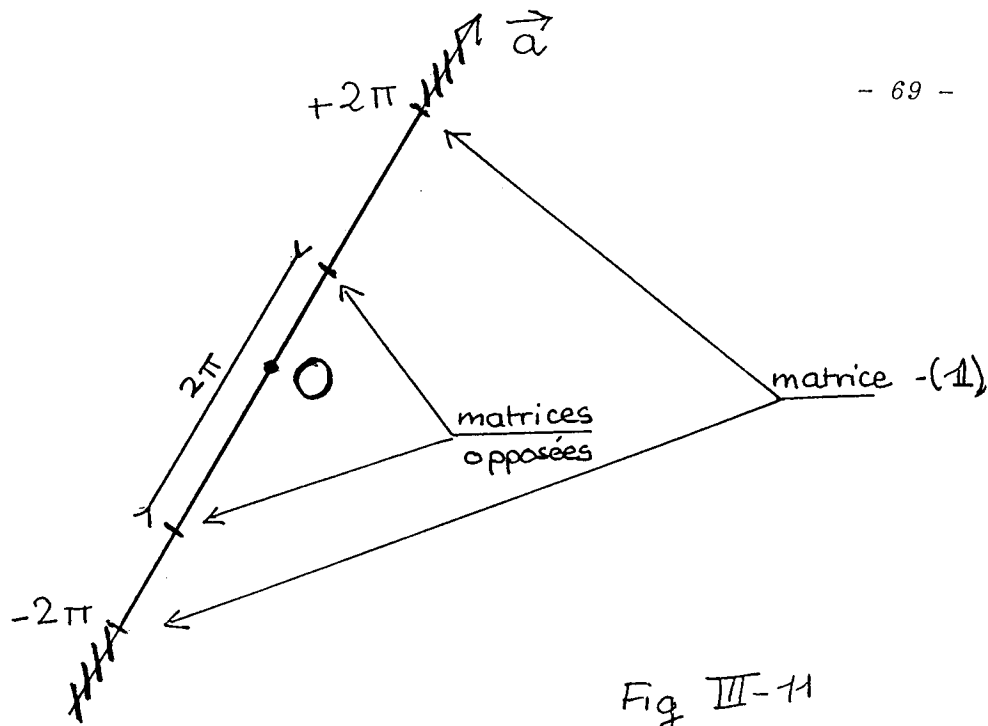


Fig III-11

Lorsque le vecteur unitaire \vec{u} prend une direction quelconque, on voit que le domaine accessible au paramètre \vec{a} est l'intérieur d'une sphère de diamètre 4π . L'origine de la sphère correspond à la matrice identité. Les points sur la surface correspondent tous à la même matrice, qui est l'opposée de la matrice identité.

Nous identifierons donc tous ces points entre eux, en imaginant une sorte de "repliement" de l'espace sur lui-même ^(bien sûr impossible dans la réalité) ou tous les points de la surface de la sphère viennent se confondre ^{entre eux} de façon analogue à ce que nous avons fait pour $SO(2)$, du §A-2 ; ou encore à l'opération qui consiste à faire un tore à partir d'un cylindre en le repliant et en amenant en contact ses extrémités]. De cette façon, un chemin comme celui représenté sur la figure III-12 est fermé.

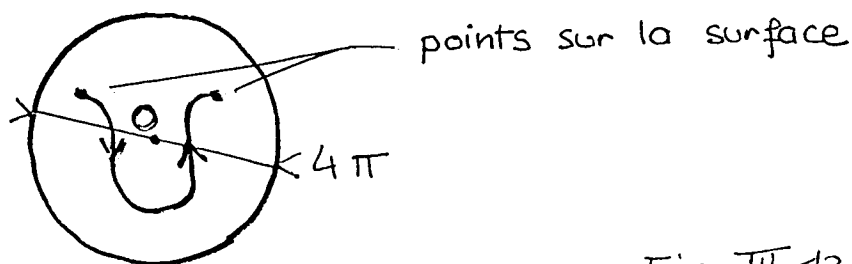


Fig III-12

Une autre façon de représenter ce groupe, où les matrices $(\mathbb{1})$ et $-(\mathbb{1})$ jouent un rôle plus symétrique, serait de le représenter par 2 sphères de diamètre 2π chacune, la première centrée en O [matrice unité], la seconde en O' [matrice opposée à la matrice identité], et en identifiant les points A et A' de leurs surfaces si $O\vec{A} = O'\vec{A}'$ [figure III-13]. De façon plus précise, les points \vec{a} de la sphère initiale de diamètre 4π correspondent,

soit à un point de la sphère de gauche, soit à un point de celle de droite. Si $0 \leq a \leq \pi$ ["cœur" de la sphère initiale], c'est simplement le point de la sphère de gauche tel que $O\vec{A} = \vec{a}$. Si par contre $\pi \leq a \leq 2\pi$ [couronne extérieure de la sphère initiale], on prend le point A' tel que :

$$O\vec{A}' = \vec{a} - 2\pi \frac{\vec{a}}{a} = a\vec{1} \quad (\text{III-81})$$

(\vec{a}' est simplement la valeur du paramètre de la matrice opposée).

On vérifie bien que :

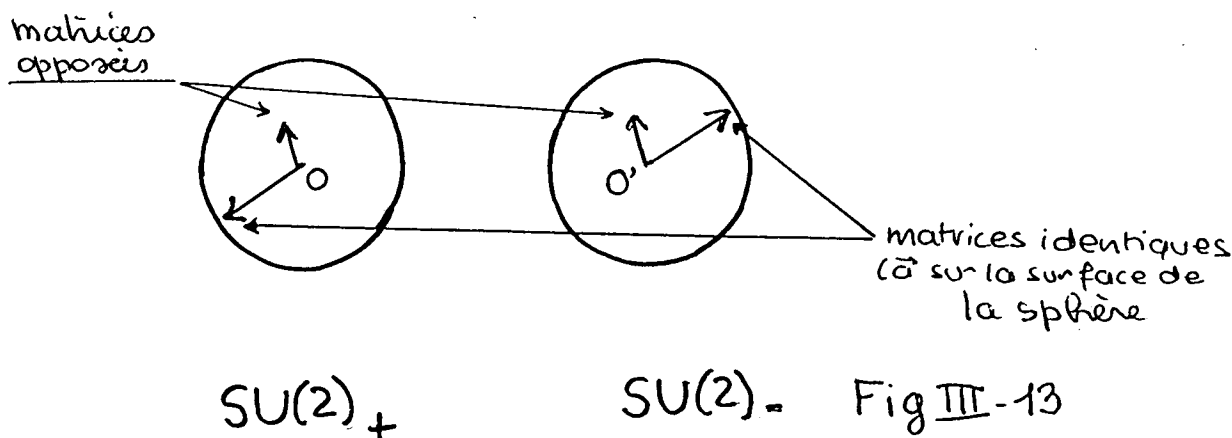
$$O\vec{A}' \rightarrow \vec{0} \quad \text{si } a \rightarrow 2\pi \quad (\text{III-82})$$

Ce point de vue conduit à décomposer en $SU(2)$ deux sous-ensembles, $SU(2)_+$ et $SU(2)_-$, associés respectivement à chacune des deux sphères de la figure III-13, et donc à des matrices opposées. Pour les caractériser, on peut remarquer que, d'après l'égalité (III-76), la trace de chaque matrice de $SU(2)$ est donnée par :

$$\text{Tr} \{M(\vec{a})\} = 2 \cos \frac{a}{2} \quad (\text{III-83})$$

les matrices de $SU(2)_+$ sont donc celles de traces positives, celles de $SU(2)_-$ celles de traces négatives. Ni l'ensemble $SU(2)_+$, ni l'ensemble $SU(2)_-$ ne sont des sous-groupes de $SU(2)$: ces sous-ensembles ne sont pas fermés sous l'effet de la loi de multiplication entre matrices [ce point est facilement visible sur l'égalité (III-80) ; nous y reviendrons en détail au § A-5-b du chapitre VI]

Il ne faut pas se laisser abuser par la figure III-13 et croire que $SU(2)$ n'est pas connexe [rappelons qu'il y a identification entre points correspondants des surfaces des deux sphères]. Le fait que $SU(2)$ est connexe est d'ailleurs évident sur la figure III-12. Sur les deux figures, on peut voir que tout chemin fermé peut être contracté en un chemin arbitrairement petit : $SU(2)$ est donc simplement connexe [nous verrons au § A-d du chapitre V que ce n'est pas le cas pour $SO(3)$, bien que ce groupe ait même algèbre de Lie que $SU(2)$].



C - GROUPES DE GALILEE ET DE POINCARÉ

Ce sont des groupes qui jouent un rôle particulièrement fondamental en physique. Ils traduisent nos conceptions essentielles concernant l'espace et le temps, et fournissent par là-même un cadre dans lequel doivent entrer toutes les lois physiques ("superlois").

Historiquement, les physiciens ont commencé par raisonner en admettant (plus ou moins explicitement) un premier type de relativité, celui de Galilée (¹⁰). Les lois de transformations d'espace temps sont dans ce cas simples et intuitives et nous allons commencer par elles. Ceci nous permettra ensuite de pouvoir clairement dégager les modifications qui apparaissent en relativité d'Einstein (transformations de Lorentz, groupe de Poincaré).

1 - Groupe de Galilée

Ce groupe est constitué par un ensemble de transformations traduisant la façon dont chaque événement est décrit par des coordonnées spatio-temporelles \vec{r}, t différentes dans deux repères galiléens différents. Il existe plusieurs sous-groupes du groupe de Galilée :

▪ Le groupe des rotations $R(3)$ autour d'un point fixe 0. A chaque rotation est associée une matrice 3×3 , orthogonale et de déterminant + 1 [groupe $SO(3)$]. Par exemple, pour une rotation d'angle ϕ autour de l'axe O_z , la matrice est :

$$R_{\vec{e}_z}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{III-84})$$

A chaque rotation, on associe un vecteur rotation \vec{a} parallèle à l'axe de rotation et de longueur ϕ [la direction de \vec{a} donne l'axe orienté autour

(¹⁰) On parle souvent de loi physique "non relativiste" pour désigner une loi qui est invariante par transformation de Galilée. Cette désignation n'est pas très heureuse : en théorie, les transformations de Galilée ne sont en rien "moins relativistes" que celles de Lorentz. Bien sûr, on sait maintenant en physique que ce sont les lois d'invariance relativiste d'Einstein et non celles de Galilée qui sont effectivement respectées par la nature. Ceci limite évidemment beaucoup l'intérêt fondamental des transformations de Galilée ; cependant, dans de nombreux cas physiques intéressants, elles fournissent de bonnes approximations aux transformations de Lorentz (cf. note (¹) du chapitre I).

duquel ϕ doit être compté de façon positive]. La matrice \mathcal{R} devient alors une fonction de 3 paramètres réels :

$$\mathcal{R}(\vec{a}) = \mathcal{R}(a_x, a_y, a_z) \quad (\text{III-85})$$

L'étude plus détaillée de ces matrices de rotation sera faite au chapitre V. Nous n'aurons besoin ^{ici que} des matrices de rotations infinitésimales. A partir de (III-84), on obtient [avec $a_z = d\phi$] :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(0, 0, da_z) &= (\mathbb{1}) + da_z \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= (\mathbb{1}) + da_z \mathcal{M}_z \end{aligned} \quad (\text{III-86})$$

avec :

$$\mathcal{M}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III-87})$$

Par permutation circulaire des axes Ox , Oy et Oz , on trouve :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(da_x, 0, 0) &= (\mathbb{1}) + da_x \mathcal{M}_x \\ \mathcal{R}(da_y, 0, 0) &= (\mathbb{1}) + da_y \mathcal{M}_y \end{aligned} \quad (\text{III-88})$$

avec :

$$\mathcal{M}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{M}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III-89})$$

On obtient facilement :

$$\mathcal{M}_x \mathcal{M}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{M}_y \mathcal{M}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III-90})$$

et donc :

$$[\mathcal{M}_x, \mathcal{M}_y] = \mathcal{M}_z \quad (\text{III-91})$$

[ainsi que les deux autres relations obtenues par permutation circulaire de x , y et z].

■ Le groupe $T(3)$ des translations. Il sera étudié au chapitre V (§A-1). Nous verrons que ses opérateurs infinitésimaux sont également au nombre de 3, mais commutent entre eux, contrairement à ceux des rotations.

- Translations dans le temps.
- Transformations de Galilée pures. Les transformations des coordonnées sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} x' = x + v_x^{\circ} t \\ y' = y + v_y^{\circ} t \\ z' = z + v_z^{\circ} t \\ t' = t \end{array} \right. \quad (\text{III-92})$$

- Nous pourrions ajouter la symétrie d'espace :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{r}' = - \vec{r} \\ t' = t \end{array} \right. \quad (\text{III-93a})$$

ou de temps :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{r}' = \vec{r} \\ t' = - t \end{array} \right. \quad (\text{III-93b})$$

mais ce ne sont pas des transformations dépendant d'un paramètre continu, de sorte que nous n'en parlerons pas ici.

En combinant ces ensembles, on peut obtenir d'autres sous-groupes du groupe de Galilée. Par exemple, rotations et translations (i.e. les opérations géométriques continues) donnent le groupe des déplacements (groupe euclidien) $E(3)$. Pour caractériser le groupe de Galilée tout entier, on peut dire que c'est l'ensemble des transformations linéaires d'espace-temps qui, pour deux évènements quelconques, conserve l'intervalle de temps $t_2 - t_1$, ainsi que la distance $|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$ de tous les évènements simultanés.

A chaque transformation du groupe est associée une matrice 5×5 telle que :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ t' \\ 1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ t \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{III-94})$$

où :

$$M = \left(\begin{array}{ccc|cc} \mathcal{R}(\vec{a}) & v_x^0 & x_0 & & \\ & v_y^0 & y_0 & & \\ & v_z^0 & z_0 & & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & t_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \quad \text{chaque transformation} \quad \text{(III-95)}$$

Le nombre de paramètres continus dont dépend est : 3 (rotations) + 3 (translations) + 3 (transformations de Galilée pure) + 1 (translation dans le temps) = 10.

Nous écrivons :

$$M \equiv M(\vec{a}, \vec{x}_0, \vec{v}_0, t_0) \quad \text{(III-96)}$$

A chacun des paramètres correspond un opérateur infinitésimal :

$$\vec{a} : a_x, a_y, a_z \implies X_{J_x, J_y, J_z}$$

$$\vec{x}_0 : x_0, y_0, z_0 \implies X_{P_x, P_y, P_z}$$

$$t_0 \implies X_H$$

$$\vec{v}_0 : v_x^0, v_y^0, v_z^0 \implies X_{K_x, K_y, K_z} \quad \text{(III-97)}$$

(la raison des notations employées apparaîtra dans la suite). On calcule :

$$X_{J_{x, y, z}} = \left(\begin{array}{ccc|c} m_{x, y, z} & & & 0 \\ \hline & & & 0 \end{array} \right)$$

$$X_{P_x} = \left(\begin{array}{cc|cc} & & 0 & 1 \\ 0 & & 0 & 0 \\ \hline & & 0 & 0 \\ 0 & & & 0 \end{array} \right)$$

$$X_{P_y} = \left(\begin{array}{cc|cc} & & 0 & 0 \\ 0 & & 0 & 1 \\ \hline & & 0 & 0 \\ 0 & & & 0 \end{array} \right)$$

$$\begin{aligned}
 X_{P_z} &= \left(\begin{array}{c|cc} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 1 \end{array} \right) \\
 X_H &= \left(\begin{array}{c|cc} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \\ & 0 & 0 \end{array} \right) \\
 X_{K_x} &= \left(\begin{array}{c|cc} & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 \end{array} \right) \\
 X_{K_y} &= \left(\begin{array}{c|cc} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 \\ & 0 & 0 \end{array} \right) \\
 X_{K_z} &= \left(\begin{array}{c|cc} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ & 1 & 0 \end{array} \right)
 \end{aligned} \tag{III-98}$$

On obtient alors, en notant x_i l'un des 3 indices et ϵ_{ijk} une quantité qui vaut 0 si deux des indices i, j, k sont égaux, + 1 si i, j, k sont une permutation paire de xyz , - 1 s'ils sont une permutation impaire^(*):

$$[X_{J_{x_i}}, X_{J_{x_j}}] = \epsilon_{ijk} X_{J_{x_k}} \tag{III-99a}$$

$$[X_{J_{x_i}}, X_{P_{x_j}}] = \epsilon_{ijk} X_{P_{x_k}} \tag{III-99b}$$

$$[X_{J_{x_i}}, X_{K_{x_j}}] = \epsilon_{ijk} X_{K_{x_k}} \tag{III-99c}$$

$$[X_{J_{x_i}}, X_H] = 0 \quad (\forall i) \quad \text{ou} \quad [X_{\vec{j}}, X_H] = 0 \tag{III-99d}$$

$$[X_{P_{x_i}}, X_{P_{x_j}}] = 0 \quad (\forall i, j) \quad \text{ou} \quad [X_{\vec{p}}, X_{\vec{p}}] = 0 \tag{III-99e}$$

(*) Dans les égalités (III-99) et suivantes, on suppose implicitement une sommation sur l'indice répété k . Cette sommation ne comprend qu'un seul terme non-nul (si $i \neq j$), voire aucun (si $i = j$).

$$[X_{P_{x_i}}, X_{K_{x_j}}] = 0 \quad (Vi,j) \quad \text{ou} \quad [X_{\vec{P}}, X_{\vec{K}}] = 0 \quad (\text{III-99f})$$

$$[X_{P_{x_i}}, X_H] = 0 \quad (Vi) \quad \text{ou} \quad [X_{\vec{P}}, X_H] = 0 \quad (\text{III-99g})$$

$$[X_{K_{x_i}}, X_{K_{x_j}}] = 0 \quad (Vi,j) \quad \text{ou} \quad [X_{\vec{K}}, X_{\vec{K}}] = 0 \quad (\text{III-99h})$$

$$[X_{K_{x_i}}, X_H] = X_{P_{x_i}} \quad (Vi) \quad \text{ou} \quad [X_{\vec{K}}, X_H] = X_{\vec{P}} \quad (\text{III-99i})$$

Ces relations nous donnent les constantes de structure du groupe de Galilée, dont beaucoup sont nulles. Elles s'interprètent de la façon suivante :

- (III-99a) : propriétés de non commutation entre rotations infinitésimales (cf chapitre V)
- (III-99b) : non commutation des rotations dans l'espace et des translations
- (III-99c) : non commutation des rotations et de changement de repère galiléen.

On notera l'analogie entre les relations (III-99a, b, c). Elles expriment que \vec{J} , \vec{P} et \vec{K} sont des quantités vectorielles (cf chapitre VII).

Les relations (III-99e) à (III-99h) expriment la commutation entre opérations ^{soit} purement spatiales (translations), soit dépendant du temps : (III-99g) par exemple exprime la commutation des translations d'espace et de temps.

En ce qui concerne la dernière relation (III-99i), elle a déjà été discutée plus haut (§ B-2) dans un cas à une dimension.

On remarquera que, jusqu'ici, nous n'avons utilisé aucun des postulats de la mécanique quantique (règles de quantification, etc). Cependant, nous voyons déjà apparaître des relations de commutation qui nous rappellent par exemple celles du moment cinétique : $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$, etc, ou encore celle de l'hamiltonien H d'une particule libre avec son impulsion : $[\vec{P}, H] = 0$, (la définition des opérateurs quantiques associés aux X sera donnée dans les chapitres ultérieurs). Cela permet de comprendre le caractère très fondamental de ces relations de commutation, qui sont liées plus à la structure même de l'espace-temps plutôt qu'au type de théorie quantique utilisée ou à la nature du système étudié (les relations de commutation seront par exemple les mêmes pour un champ que pour un système de particules).

Remarque :

(cf par ex. chap. I, § B-2-b-f)

Nous avons déjà vu à plusieurs reprises le lien entre les transformations de Galilée pure et la position du centre de masse du système. On s'attend alors à une relation du type :

$$\vec{R} = \vec{X}_k / \mu$$

(où μ est la masse du système, une particule isolée par exemple), et effectivement, cette relation existe. L'égalité (III-99i) correspond alors simplement au fait que les variations dans le temps de la position d'un système physique sont proportionnelles à ses impulsions ($\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{\mu}$).

Mais alors, comment comprendre (III-99f), puisque on sait bien que position et impulsion ne commutent pas en mécanique quantique ?

La solution à cette difficulté réside dans la nécessité, dans le cas du groupe de Galilée, d'utiliser des représentations projectives dont les facteurs de phase modifient la loi de commutation (III-99f) [cf chapitre IV, § D-4]. Lorsque ces facteurs de phase sont correctement pris en compte, on retrouve de façon très naturelle toutes les relations habituelles de la mécanique quantique, y compris d'ailleurs celles qui concernent le spin de la particule).

2 - Groupe de Poincaré

Le groupe de Poincaré donne les transformations d'espace-temps, dans le cadre de la relativité d'Einstein. Citons quelques types de telles transformations :

α - Rotations (déjà vues au paragraphe précédent)

β - Translations d'espace et de temps (également déjà vues)

γ - Transformations de Lorentz spéciales (ou pures). Ces transformations dépendent d'un paramètre vectoriel \vec{v} (c'est-à-dire de 3 paramètres, comme celles de Galilée pures). Posons :

$$\beta = v/c \qquad \gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2} \qquad \text{(III-100)}$$

Ces transformations s'écrivent, lorsque \vec{v} est parallèle à Ox :

$$\left\{ \begin{array}{l} x' = \frac{x + vt}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \gamma(x + vt) \\ y' = y \\ z' = z \\ t' = \frac{t + vx/c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \gamma\left(t + \frac{\beta x}{c}\right) \end{array} \right. \qquad \text{(III-101)}$$

On écrit ainsi des transformations homogènes entre les 4 coordonnées spatio-temporelles, à laquelle sont associées des matrices $\Lambda(\vec{v})$. Lorsque \vec{v} est parallèle à Ox ⁽¹¹⁾, il découle de (III-101) que :

$$\Lambda(v, 0, 0) = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & \gamma v \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \gamma v/c^2 & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \quad (\text{III-102})$$

On notera que ces matrices, comme les transformations de Lorentz pures, ne forment pas un groupe. Nous y reviendrons.

δ - Réflexions d'espace (symétrie par rapport à un point fixe 0)

ϵ - Réflexions de temps

En combinant entre elles ces transformations, on peut obtenir divers groupes :

- α et γ : l'ensemble des produits de ces deux types d'opérations donne le "groupe de Lorentz propre". Il lui correspond un ensemble de matrices 4×4 de déterminant positif, décrivant des transformations homogènes des coordonnées spatio-temporelles, toutes engendrées à partir de transformations infinitésimales.
- α , γ et δ : on obtient ainsi le "groupe de Lorentz orthochrone". (Le sens du temps n'est pas renversé : si deux événements sont séparés par un intervalle d'univers du type temps, l'antériorité est conservée dans tous les repères considérés).
- ajoutons ϵ aux opérations précédentes, on obtient alors le "groupe de Lorentz complet" (transformations homogènes associées à des matrices 4×4).

Jusqu'ici nous avons laissé de côté les transformations β , car elles ne sont pas homogènes.

Si l'on prend l'ensemble de toutes les transformations, y compris celles engendrées à partir de Λ et ϵ , on obtient le "groupe de Lorentz inhomogène" au "groupe de Poincaré". C'est l'ensemble des transformations linéaires d'espace-temps qui conservent l'intervalle d'univers :

$$c^2(t_2 - t_1)^2 - (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 \quad (\text{III-103})$$

⁽¹¹⁾ Voir par exemple l'ouvrage de Jackson "Classical Electrodynamics", p.p. 517 et 541 de la nouvelle édition, pour une expression de $\Lambda(\vec{v})$ dans le cas général.

entre deux évènements quelconques. Comme au paragraphe précédent, on peut, en ajoutant une 5e coordonnée 1 aux évènements, décrire les transformations par des matrices 5×5 .

Comme dans le cas du groupe de Galilée, nous allons nous limiter à considérer ici le groupe des transformations (obtenues à partir de α , β et γ) qui peuvent être engendrées à partir de transformations infinitésimales. Nous écrivons :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ t' \\ 1 \end{pmatrix} = M(\vec{a}, \vec{\ell}_0, \vec{v}_0, t_0) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ t \\ 1 \end{pmatrix} \tag{III-104}$$

et en déduisons les relations de commutation entre opérateurs infinitésimaux. En fait, il n'est pas nécessaire de reprendre complètement les calculs du § 1 précédent. Des différences apparaissent, car le groupe de Lorentz mélange bien plus intimement espace et temps que ne le fait celui de Galilée. Cependant, pour toutes les transformations d'espace pures, où le temps n'intervient pas, on a exactement les mêmes lois de transformations et les mêmes matrices M. Par suite, on a encore :

$$[X_{J_i}, X_{J_{x_j}}] = \epsilon_{ijk} X_{J_k} \tag{III-105a}$$

$$[X_{J_i}, X_{P_{x_j}}] = \epsilon_{ijk} X_{P_k} \tag{III-105b}$$

$$[X_{\vec{p}}, X_{\vec{p}}] = 0 \tag{III-105c}$$

De même, X_H a la même forme que celle écrite en (III-98). Donc, ici aussi :

$$[X_{\vec{J}}, X_H] = 0 \tag{III-105d}$$

$$[X_{\vec{p}}, X_H] = 0 \tag{III-105e}$$

Les changements apparaissent dès qu'intervient $X_{\vec{K}}$. En effet, par exemple, on voit sur (III-101) que :

$$X_{K_x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/c^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{III-106}$$

Comparant avec (III-98), on voit apparaître ici un nouvel élément, en $1/c^2$ (qui tend donc vers 0 si $c \rightarrow \infty$). On peut dire que c'est cet élément qui introduit tous les effets relativistes.

Un calcul élémentaire donne alors :

$$[X_{J_{x_i}}, X_{K_{x_j}}] = \epsilon_{ijk} X_{K_{x_k}} \tag{III-107a}$$

$$[X_{K_i}, X_{P_j}] = \frac{1}{c^2} \delta_{ij} X_H \tag{III-107b}$$

$$[X_{K_i}, X_{K_j}] = -\frac{1}{c^2} \epsilon_{ijk} X_{J_k} \tag{III-107c}$$

$$[X_{K_{x_i}}, X_H] = X_{P_{x_i}} \tag{III-107d}$$

Si la première et la quatrième de ces relations sont les mêmes que plus haut, la seconde et la troisième sont nouvelles. La seconde est liée à la façon dont est modifiée l'impulsion dans une transformation de Lorentz pure : les composantes normales ne sont pas modifiées (d'où le δ_{ij}), mais la composante parallèle l'est. La troisième relation de commutation nous montre à nouveau que les transformations de Lorentz pures ne forment pas un groupe : il apparaît par produit de transformations pures successives (commutateur) une rotation. Cette remarque permet de comprendre l'origine de la précession de Thomas.

CHAPITRE IV

TRANSFORMATIONS ET REPRÉSENTATIONS

INDUITES DANS L'ESPACE DES ÉTATS

A - CONDITIONS IMPOSEES AUX TRANSFORMATIONS DANS L'ESPACE DES ETATS.....	p.	84
B - THEOREME DE WIGNER.....	p.	86
C - TRANSFORMATION DES OBSERVABLES.....	p.	91
D - REPRESENTATIONS LINEAIRES DANS L'ESPACE DES ETATS.....	p.	92
1 - Action d'un groupe de transformations.....	p.	92
2 - Cas d'un groupe continu.....	p.	94
3 - Les facteurs de phase (représentations finies).....	p.	96
4 - Les facteurs de phase (représentations infinies).....	p.	97
a) Propriétés générales des facteurs de phase....	p.	97
b) Extension de l'algèbre de Lie.....	p.	98
c) Lien entre les constantes de structure et celles		
d'extension	p.	100

Dans ce chapitre nous allons utiliser dans le cadre de la mécanique quantique, les notions introduites précédemment (groupes discrets ou continus de transformations, représentations au sens strict ou projectives, etc.). Nous commencerons, au § A, par étudier quels types d'opérateurs T agissant dans l'espace des états d'un système physique quelconque peuvent correspondre aux transformations \mathcal{G} introduites au chapitre I (translations, rotations, changement de repère galiléen, etc.). Au § B, nous en déduirons que ces opérateurs T ne peuvent être qu'unitaires ou antiunitaires. Ceci nous permettra ensuite, au § C, de considérer la façon dont se transforment les observables du système. Enfin, dans le § D, nous nous intéresserons au cas, extrêmement important, où l'on considère l'action non pas d'une, mais d'un ensemble de transformations \mathcal{G} formant un groupe (continu ou discret).

Dans le cas d'un groupe continu, le résultat de cette étude sera d'aboutir à un certain nombre de relations de commutation que doivent satisfaire les opérateurs G associés aux transformations infinitésimales du groupe (générateurs infinitésimaux). C'est un pas important dans la voie que nous allons suivre à partir du chapitre suivant ; partant de considérations générales sur les transformations que l'on peut faire subir à un système physique, nous verrons comment on peut construire les espaces des états possibles pour un système physique.

Avant d'aborder ce chapitre, rappelons quelques notations et résultats. Nous avons déjà discuté, à la fin du chapitre I (§ C-2), l'effet sur le vecteur d'état $|\psi\rangle$ d'un système physique d'une opération \mathcal{G}

Commençons par raisonner sur un exemple, celui où \mathcal{G} est une opération de translation d'un vecteur $\vec{\ell}$. Soit donc un système physique quelconque décrit, dans un référentiel $Oxyz$, par un ket $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{E}$. Introduisons un second référentiel $O'x'y'z'$ [fig IV-1] obtenu par action d'une translation de vecteur $-\vec{\ell}$ sur $Oxyz$. Dans le point de vue du second référentiel, le même système physique apparaît comme ayant toutes les

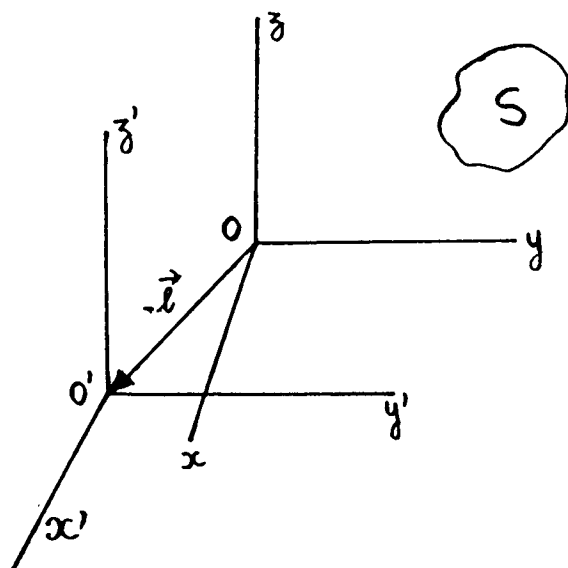


Fig. IV-1

mêmes propriétés que dans le point de vue du premier, si ce n'est sa position absolue dans l'espace ; cette position a subi une translation de $+\vec{\ell}$. Si maintenant $|\psi'(t)\rangle$ est le ket de \mathcal{E} qui décrit le système physique considéré ^{point de vue du} dans le référentiel $O'x'y'z'$, le problème est alors de connaître $|\psi'(t)\rangle$ en fonction de $|\psi(t)\rangle$. Nous allons appeler F la transformation qui fait passer de $|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi'(t)\rangle$:

$$|\psi'(t)\rangle = F(|\psi(t)\rangle) \quad (IV-1)$$

[nous utilisons ce type de notation pour insister sur le fait qu'à ce stade rien n'assure que la transformation F soit linéaire ; nous reviendrons ensuite à la notation T des chapitres précédents].

Ces considérations peuvent facilement être généralisées à d'autres opérations \mathcal{G} : rotations, symétrie par rapport à un point, changement de référentiel d'inertie (transformation de Galilée ou de Lorentz pures) etc. Une égalité du type (IV-1) nous servira dans tous les cas à écrire la transformation correspondante du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{E}$. La question qui se pose alors est : que faut-il imposer à la transformation F sur des critères physiques ? Nous allons discuter ce point au § A.

Remarque :

Nous avons considéré ici un système physique unique, mais décrit dans les axes de référentiels différents ; c'est ce que l'on appelle parfois le "point de vue passif". Par opposition, le "point de vue actif" consisterait à garder un seul système d'axes, et à introduire un second système physique obtenu (dans l'exemple précédent) par une translation de $+\vec{\ell}$: c'est le système qui "bouge", pas les axes.

Dans la mesure où la définition même d'une translation, rotation, etc. est basée sur un changement des coordonnées d'espace (ou de temps) du système physique, seules interviennent les positions relatives de S et du système de référence, et il est clair que points de vue actif et passif sont strictement équivalents.

En réalité, la distinction entre ces deux points de vue ne prend vraiment son sens que si l'un des référentiels est privilégié par rapport à l'autre. C'est par exemple le cas si l'on a supposé (comme on le fait souvent implicitement) l'existence d'un troisième référentiel, indépendant à la fois de $Oxyz$ et du système étudié, par exemple le référentiel du laboratoire ($Oxyz$ peut alors être un référentiel lié à des instruments de mesure qui, comme le système étudié, sont mobiles par rapport au laboratoire). La différence entre les deux points de vue est

alors claire : on "bouge", soit le système, soit les appareils de mesure. Un autre cas où points de vue actif et passif différent est celui où $Oxyz$ est un référentiel d'inertie mais où la transformation \mathcal{C} considérée dépend du temps de telle sorte que ce ne soit plus le cas de $O'x'y'z'$ (par exemple \mathcal{C} est une rotation de vitesse angulaire constante). Dans un cas de cette sorte, le point de vue passif est beaucoup plus simple en mécanique quantique ⁽¹⁾. C'est donc celui que nous prendrons dans tout ce qui va suivre.

A - CONDITIONS IMPOSEES AUX TRANSFORMATIONS DANS L'ESPACE DES ETATS

En premier lieu, il est clair que, si la transformation F existe, il faut qu'on puisse effectuer la transformation inverse : dans l'exemple de la translation, on peut évidemment revenir du référentiel $O'x'y'z'$ à $Oxyz$. On aura donc :

$$|\psi(t)\rangle = F^{-1}(|\psi'(t)\rangle) \tag{IV-2}$$

où la fonction F^{-1} est définie quel que soit $|\psi'\rangle$ [dans le cas contraire, nous aurions introduit une dissymétrie fondamentale entre les systèmes décrits par les $|\psi\rangle$ et ceux décrits par les $|\psi'\rangle$].

Il faut ensuite que les postulats de la mécanique quantique concernant la mesure ne nous conduisent pas à des résultats incohérents. Supposons en effet que B soit une observable du système (opérateur hermitique à spectre complet dans \mathcal{E}) et $|b_i\rangle$ un ket propre de B de valeur propre b_i :

$$B|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle \tag{IV-3}$$

(nous supposons pour simplifier le spectre de B discret et non dégénéré). Si le système physique est dans l'état $|b_i\rangle$ on est sûr, lors de la mesure, de trouver le résultat b_i .

Soit maintenant :

$$|b'_i\rangle = F(|b_i\rangle) \tag{IV-4}$$

⁽¹⁾ Un exemple simple permet de comprendre les difficultés du point de vue actif dans ce cas. On sait que la circulation de la "vitesse" (courant de probabilité) d'un électron dans un potentiel central est quantifiée. Une augmentation de sa vitesse angulaire d'une quantité quelconque n'est donc pas possible en mécanique quantique.

le ket décrivant le système après action de la transformation \mathcal{G} . Nous allons appeler B' l'opérateur qui admet les kets $|b'_i\rangle$ avec les mêmes valeurs propres b_i :

$$B' = b_i |b'_i\rangle \langle b'_i| \quad \forall |b'_i\rangle \quad (IV-5)$$

Quel sens physique donner à B' ? Il revient au même de dire qu'avant une mesure, le système est décrit dans le référentiel initial par $|b_i\rangle$ ou, après action de \mathcal{G} , par $|b'_i\rangle$. Or, à ces kets correspondent des résultats certains (b_i) pour les mesures associées à B et B' respectivement. B' décrit donc la même mesure que B (l'interaction du système avec les mêmes instruments de mesure), mais dans le point de vue associé au nouveau référentiel d'espace. Pour revenir à l'exemple déjà cité d'une translation d'un vecteur $\vec{\mathcal{L}}$, B' décrira des mesures effectuées par un même dispositif, mais repéré dans des axes $O'x'y'z'$ au lieu de $Oxyz$ pour B . [Il est donc équivalent de dire que le changement de B en B' correspond à une translation de $+\vec{\mathcal{L}}$ des appareils de mesure ; de façon générale, le passage de B à B' revient à effectuer, sur ces appareils, la même opération \mathcal{G} qui change le ket du système physique de $|\psi\rangle$ en $|\psi'\rangle$].

Si maintenant le système est dans un état quelconque $|\psi\rangle$ (superposition linéaire des $|b_i\rangle$), la probabilité de trouver b_i dans le résultat de la mesure vaut, calculée dans le premier référentiel :

$$\mathcal{S}(b_i) = |\langle b_i | \psi \rangle|^2 \quad (IV-6)$$

et, dans le second :

$$\mathcal{S}'(b_i) = |\langle b'_i | \psi' \rangle|^2 \quad (IV-7)$$

On doit bien sûr avoir l'égalité de ces deux expressions, c'est-à-dire :

$$|\langle b_i | \psi \rangle| = |\langle b'_i | \psi' \rangle| \quad (IV-8)$$

Cette égalité peut être généralisée car, si $|\phi\rangle$ est un ket quelconque de \mathfrak{E} , il peut être considéré comme ket propre associé à une [ou plusieurs (²)] observables B_1, B_2, \dots avec une (ou plusieurs) valeurs propres b_{i_1}, b_{i_2}, \dots . Le même raisonnement impose alors que :

$$|\langle \phi' | \psi' \rangle| = |\langle \phi | \psi \rangle| \quad (IV-9)$$

La transformation F doit donc conserver le module du produit scalaire. Si c'est le cas, on dit souvent que F "conserve les propriétés

(²) Par exemple un E.C.O.C. (Ensemble Complet d'Observables qui Commutent).

physiques" du système. Un théorème important permet alors de restreindre considérablement l'ensemble des transformations F acceptables.

B - THEOREME DE WIGNER

Nous allons montrer que le fait que la transformation F soit biunivoque et conserve le module des produits scalaires entraîne que F est équivalente, soit à une opération linéaire et unitaire, soit à une opération antilinéaire et unitaire (c'est-à-dire "antiunitaire").

Soit $\{|u_i\rangle\}$ une base orthonormée de \mathcal{E} ($i = 1, 2, \dots, N$). L'ensemble des :

$$|u'_i\rangle = F(|u_i\rangle) \quad (IV-10)$$

constitue une autre base orthonormée de \mathcal{E} . En effet :

- l'ensemble des $|u'_i\rangle$ est orthonormé puisque F conserve le module du produit scalaire :

$$|\langle u'_i | u'_j \rangle| = |\langle u_i | u_j \rangle| = \delta_{ij} \quad (IV-11)$$

et donc :

$$\langle u'_i | u'_j \rangle = \delta_{ij} \quad (IV-12)$$

(puisque $\langle u_i | u_i \rangle$ est réel).

- c'est une base. Dans le cas contraire, il existerait un ket $|\psi'\rangle$ non-nul orthogonal à tous les $|u'_i\rangle$, et $|\psi\rangle = F^{-1}(|\psi'\rangle)$ serait orthogonal à tous les $|u_i\rangle$, ce qui est impossible si les $\{|u_i\rangle\}$ forment une base orthonormée.

Considérons maintenant les kets :

$$|\phi_i\rangle = |u_1\rangle + |u_i\rangle \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$|\phi'_i\rangle = F(|u_1\rangle + |u_i\rangle) \quad (IV-13)$$

Le produit scalaire de $|\phi'_i\rangle$ par $|u'_k\rangle$ doit valoir 1 en module si $k = 1$ ou i , zéro sinon. Par suite :

$$|\phi'_i\rangle = e^{i\alpha_i} |u'_1\rangle + e^{i\beta_i} |u'_i\rangle \quad (\alpha_i, \beta_i \text{ réels}) \quad (IV-14)$$

Introduisons une nouvelle base de kets $|v'_i\rangle$, proportionnels aux $|u'_i\rangle$:

$$\begin{cases} |v'_1\rangle = |u'_1\rangle \\ |v'_i\rangle = e^{i(\beta_i - \alpha_i)} |u'_i\rangle \end{cases} \quad i = 2, \dots, N \quad (IV-15)$$

On a alors simplement :

$$F (|u_1\rangle + |u_i\rangle) = e^{i\alpha_i} [|v'_1\rangle + |v'_i\rangle] \quad (\text{IV-16})$$

Soit $|\chi\rangle$ le ket défini par :

$$|\chi\rangle = \lambda \sum_i x_i |u_i\rangle \quad (\text{IV-17})$$

où λ est un nombre complexe quelconque, et les x_i sont réels [nous dirons que $|\chi\rangle$ est "proportionnel à un ket réel" ⁽³⁾]. Nous supposons :

$$x_1 \neq 0 \quad (\text{IV-18})$$

On peut toujours écrire :

$$|\chi'\rangle = F (|\chi\rangle) = \lambda \sum_i g_i |v'_i\rangle \quad (\text{IV-19})$$

avec :

$$|g_i| = \frac{1}{|\lambda|} |\langle v'_i | \chi' \rangle| = \frac{1}{|\lambda|} |\langle u_i | \chi \rangle| = |x_i| = \pm x_i \quad (\text{IV-20})$$

Effectuons le produit scalaire de $|\chi\rangle$ par le ket $|\phi_i\rangle$ défini plus haut :

$$\begin{aligned} |\langle \phi_i | \chi \rangle| &= |\lambda| |x_1 + x_i| \\ &= |\langle \phi'_i | \chi' \rangle| = |\lambda| |g_1 + g_i| \end{aligned} \quad (\text{IV-21})$$

Donc :

$$|x_1 + x_i| = |g_1 + g_i| \quad (\text{IV-22})$$

Comme par ailleurs $|x_i| = |g_i|$, cette égalité entraîne que g_i/g_1 est réel :

$$\frac{g_i}{g_1} = \frac{x_i}{x_1} \quad (\text{IV-23})$$



⁽³⁾ Il faut bien voir que cette notion de "ket réel" n'a rien d'absolu, mais dépend de la base à laquelle on se réfère.

← En effet, si dans le plan complexe les vecteurs représentant g_1 et g_2 n'étaient pas parallèles (ou antiparallèles) comme ceux représentant x_1 et x_2 , on ne pourrait pas satisfaire l'égalité (IV-21) cf. fig (IV-2) . Ceci entraîne que :

$$|\chi'\rangle = \lambda e^{i\beta} \sum_i x_i |v_i\rangle \quad (IV-24)$$

où :

$$e^{i\beta} = \frac{g_1}{x_1} = \frac{g_2}{x_2} = \dots \quad (IV-25)$$

Remarque :

Nous avons utilisé pour arriver à (IV-24) le fait que $|\chi\rangle$ a été choisi avec $x_1 \neq 0$. Que se passe-t-il si, par exemple, on prend un ket $|\theta\rangle$ tel que :

$$|\theta\rangle = \mu \sum_{i=2}^N y_i |u_i\rangle \quad (IV-26a)$$

où μ est complexe et les y_i réels ? Alors :

$$|\theta'\rangle = \mu \sum_{i=2}^N h_i |v'_i\rangle \quad (IV-26b)$$

avec, pour les mêmes raisons que plus haut :

$$|h_i| = |y_i| = \pm y_i \quad (IV-27)$$

Si $|\chi\rangle$ est alors le ket déjà introduit (avec $x_1 \neq 0$), on a :

$$\begin{aligned} |\langle\theta|\chi\rangle| &= |\lambda\mu| \left| \sum_{i=2}^N x_i y_i \right| \\ &= |\langle\theta'|\chi'\rangle| = |\lambda\mu| \left| \sum_{i=2}^N x_i g_i \right| \end{aligned} \quad (IV-28)$$

[d'après (IV-24)] . Choisissons pour les valeurs $|\chi\rangle = \sqrt{x_1} = x_2 = x_3 = 1$, les autres x_i nuls. Alors :

$$|y_2 + y_3| = |g_2 + g_3| \quad (IV-29)$$

et le même raisonnement que plus haut donne :

$$|\theta'\rangle = \mu e^{i\gamma} \sum_{i=2}^N y_i |v'_i\rangle \quad (IV-30)$$

La restriction $x_1 \neq 0$ n'est donc pas essentielle, les kets $|\theta'\rangle$ ayant des propriétés analogues à celles des $|\chi'\rangle$.

Pour résumer, avec les bases $\{|u_i\rangle\}$ et $\{|v'_i\rangle\}$ que nous avons choisies, le transformé de tout ket proportionnel à un ket "réel" a la même propriété.

La dernière étape du raisonnement consiste maintenant à prendre un ket $|\psi\rangle$ quelconque ("complexe") :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i |u_i\rangle \\ |\psi'\rangle &= \sum_i d_i |v'_i\rangle \end{aligned} \tag{IV-31}$$

où, nécessairement :

$$|d_i| = |c_i| \tag{IV-32}$$

Effectuons le produit scalaire par un quelconque des kets $|\chi\rangle$ considérés plus haut :

$$\begin{aligned} |\langle\chi|\psi\rangle| &= \left| \sum_i x_i c_i \right| \\ &= |\langle\chi'|\psi'\rangle| = \left| \sum_i x_i d_i \right| \end{aligned} \tag{IV-33}$$

Choisissons en premier $x_1 = 1, x_2 = 1, x_3 = x_4 = \dots = 0$. On a alors :

$$|d_1 + d_2| = |c_1 + c_2| \tag{IV-34}$$

Dans le plan complexe, on peut représenter c_1 et la somme $c_1 + c_2$ par les points M_1 et M_2 ; c'_1 et $c'_1 + c'_2$ par les points M'_1 et M'_2 . Les relations écrites plus haut entraînent $|M_1M_2| = |M'_1M'_2|$ et on voit alors [figure IV-3] que deux cas sont possibles :

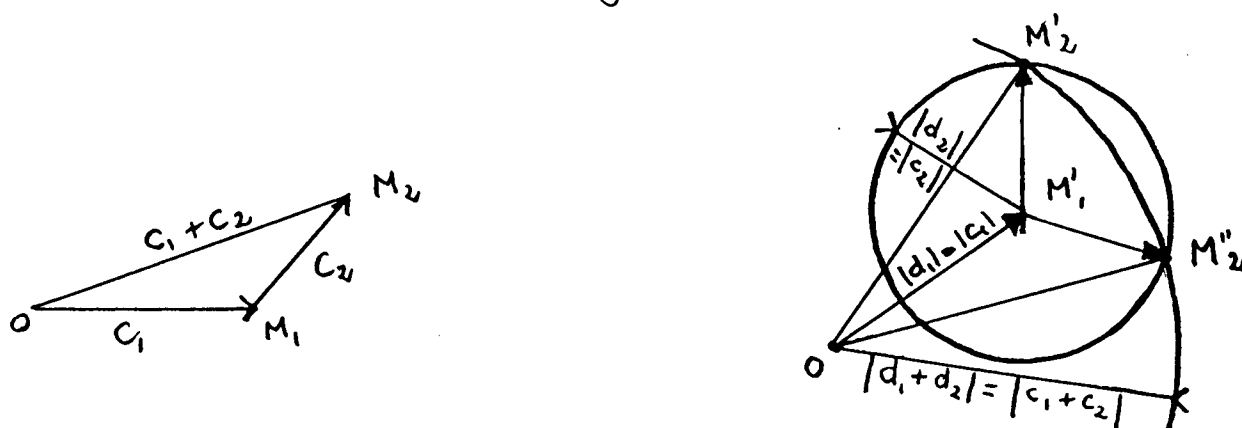
$$\frac{d_2}{d_1} = \frac{c_2}{c_1} \tag{IV-35a}$$

(figures obtenues par rotation dans le plan complexe)

$$\frac{d_2}{d_1} = \left(\frac{c_2}{c_1}\right)^* \tag{IV-35b}$$

(rotation plus symétrie par rapport à l'axe portant d_1).

Fig IV-3



Un autre choix possible des x_i est $x_1 = x_2 = 1$, (les autres x_i nuls), ou $x_1 = x_3 = 1$ (les autres nuls), ou encore $x_1 = x_2 = x_3 = 1$, (les autres nuls). Il vient alors :

$$\begin{aligned} |d_2 + d_3| &= |c_2 + c_3| \\ |d_1 + d_2 + d_3| &= |c_1 + c_2 + c_3| \end{aligned} \quad (\text{IV-36})$$

Si M_3 est le point représentant la somme $c_1 + c_2 + c_3$, M'_3 celui représentant $d_1 + d_2 + d_3$, ce dernier point sera à des distances de l'origine, de M'_1 et M'_2 égales à celles de M_3 aux points correspondants. Dans l'hypothèse (IV-35a), on aura donc :

$$\frac{d_3}{d_1} = \frac{c_3}{c_1} \quad (\text{IV-37a})$$

et, dans l'hypothèse (IV-35b) :

$$\frac{d_3}{d_1} = \left(\frac{c_3}{c_1}\right)^* \quad (\text{IV-37b})$$

le raisonnement continue de même pour d_4, d_5, \dots et l'on voit que :

- . ou les M'_i se déduisent des M par une rotation autour de l'origine dans le plan complexe ;
- . ou ils s'en déduisent par une rotation suivie d'une symétrie par rapport à un axe du plan.

Ceci entraîne que :

$$|\psi'\rangle = \begin{cases} \text{soit } e^{i\delta} \sum_i c_i |v'_i\rangle \\ \text{soit } e^{i\delta} \sum_i c_i^* |v'_i\rangle \end{cases} \quad (\text{IV-38})$$

où δ est une phase réelle dépendant de $|\psi\rangle$.

Appelons T la transformation telle que :

$$T|\psi\rangle = e^{-i\delta} |\psi'\rangle \quad (\text{IV-39})$$

T est physiquement équivalente à la transformation F initiale, dont elle ne diffère que par un facteur de phase globale. Les relations (IV-38) indiquent alors que T est, soit une transformation linéaire :

$$T|\psi\rangle = \sum_i c_i |v_i\rangle \quad (\text{IV-40a})$$

soit antilinéaire ⁽⁴⁾ :

$$T|\psi\rangle = \sum_i c_i^* |v_i\rangle \quad (\text{IV-40b})$$

⁽⁴⁾ Rappelons qu'une transformation T est antilinéaire si, quels que soient $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$:

$$T(\lambda|\phi_1\rangle + \mu|\phi_2\rangle) = \lambda^* T|\phi_1\rangle + \mu^* T|\phi_2\rangle$$

Nous reviendrons au chapitre VIII sur les propriétés de telles transformations.

Rappelons d'autre part que les $|v_i\rangle$ sont, par construction, une base orthonormée. Si l'on compare (IV-40) et (IV-31), on voit que, dans les deux cas, l'opérateur T conserve la norme et le produit scalaire des kets, ce qui implique qu'il est unitaire ($T^{-1} = T^\dagger$).

Réciproquement, il est facile de vérifier que des transformations linéaires ou antilinéaires unitaires conservent le module du produit scalaire.

Le théorème est donc établi (pour un espace de dimension N finie; nous l'admettrons pour un espace des états de dimension infinie).

C - TRANSFORMATIONS DES OBSERVABLES

Supposons que l'on connaisse l'opérateur T linéaire (ou antilinéaire) qui, à partir de chaque ket $|\psi\rangle$ du système physique considéré, donne le ket $|\psi'\rangle$ du système après transformation \mathcal{C} .

$$|\psi'(t)\rangle = T(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{IV-41})$$

On peut se demander ensuite comment se transforment les observables du système dans cette transformation. Si B est l'opérateur (hermitique) décrivant une mesure réalisée par un dispositif expérimental donné (par exemple, aimant de Stern et Gerlach) quel est l'opérateur B' qui décrit la mesure que donne le dispositif expérimental lorsqu'il a subi l'opération \mathcal{C} (aimant de Stern et Gerlach ayant subi une rotation par exemple) ?

Nous avons en fait déjà discuté cette question au § A, en introduisant les kets propres b_i d'une observable B :

$$B|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle \quad (\text{IV-42})$$

et les kets :

$$|b'_i\rangle = T|b_i\rangle \quad (\text{IV-43})$$

Nous avons alors vu que :

$$B'|b'_i\rangle = b_i|b'_i\rangle \quad (\text{IV-44})$$

(où la valeur propre b_i est inchangée). Par suite ⁽⁵⁾ :

$$B'T|b_i\rangle = b_i T|b_i\rangle = TB|b_i\rangle \quad (\text{IV-45})$$

et :

$$(T^{-1}B'T)|b_i\rangle = B|b_i\rangle \quad (\text{IV-46})$$

⁽⁵⁾ Comme b_i est réel, T commute avec la multiplication par b_i , même si T est antilinéaire [cf note ⁽⁴⁾].

Les $\{|b_i\rangle\}$ formant une base, on a :

$$B = T^{-1} B' T \quad (\text{IV-47a})$$

et, inversement :

$$B' = T B T^{-1} \quad (\text{IV-47b})$$

Si T est unitaire (ou antiunitaire), $T^{-1} = T^\dagger$, et ces égalités peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned} B &= T^\dagger B' T \\ B' &= T B T^\dagger \end{aligned} \quad (\text{IV-48})$$

Nous avons donc obtenu les relations cherchées qui lient B et B' . La démonstration se généralise aisément au cas où le spectre de B est dégénéré et continu et conduit au même résultat.

Remarque :

Si B commute avec T :

$$[B, T] = 0 \quad (\text{IV-49})$$

alors on voit immédiatement que $B' = B$. L'observable correspondante est alors dite invariante dans l'opération \mathcal{G} . [Par exemple, l'observable S_z , composante du spin d'une particule sur un axe Oz , est invariante dans toute rotation autour de Oz].

D - REPRESENTATIONS LINEAIRES DANS L'ESPACE DES ETATS

1 - Action d'un groupe de transformations

Considérons un ensemble de transformations \mathcal{G} formant un groupe \mathcal{G} . A chacune d'entre elles, nous associerons un opérateur unitaire T , linéaire ou antilinéaire d'après le théorème de Wigner, agissant dans l'espace des états :

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= T(\mathcal{G}) |\psi\rangle \\ |\psi\rangle &= T^\dagger(\mathcal{G}) |\psi'\rangle \end{aligned} \quad (\text{IV-50})$$

Nous allons en fait nous restreindre ici au cas où T est linéaire [nous verrons par la suite que, dans de nombreux cas, on n'a pas besoin d'introduire d'opérateurs antilinéaires en mécanique quantique ; jusqu'au chapitre VIII, nous ne les considérerons donc pas ⁽⁶⁾].

Effectuons maintenant deux opérations successives \mathcal{G}_1 et \mathcal{G}_2 , dans cet ordre. Le vecteur d'état devient :

$$|\psi''\rangle = T(\mathcal{G}_2) |\psi'\rangle = T(\mathcal{G}_2) T(\mathcal{G}_1) |\psi\rangle \quad (\text{IV-51})$$

⁽⁶⁾ Voir note page suivante.

Mais nous pouvons également directement effectuer la transformation produit :

$$\mathcal{C}_3 = \mathcal{C}_2 \mathcal{C}_1 \quad (\text{IV-52})$$

et obtenir le vecteur d'état :

$$|\tilde{\psi}''\rangle = T(\mathcal{C}_3)|\psi\rangle \quad (\text{IV-53})$$

Les kets $|\psi'\rangle$ et $|\tilde{\psi}''\rangle$ décrivent en réalité le même état physique du système (dans le même système de coordonnées). Nous allons donc imposer que $|\psi''\rangle$ et $|\tilde{\psi}''\rangle$ ne diffèrent que par un facteur de phase globale (7) :

$$|\tilde{\psi}''\rangle = e^{i\xi(\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_1)} |\psi''\rangle \quad (\text{IV-54})$$

où ξ est une fonction réelle qui dépend de \mathcal{C}_2 et \mathcal{C}_1 . D'après (IV-51) et (IV-53) on doit donc avoir [le ket $|\psi\rangle$ étant quelconque] :

$$T(\mathcal{C}_2) T(\mathcal{C}_1) = e^{-i\xi(\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_1)} T(\mathcal{C}_2 \mathcal{C}_1) \quad (\text{IV-55})$$

Les T donnent donc en général une représentation projective (cf chapitre II §B-1) du groupe G. Aux opérateurs T, on peut associer des matrices (finies ou infinies suivant la dimension de l'espace des états) d'éléments :

$$T_{ij}(\mathcal{C}) = \langle u_j | T(\mathcal{C}) | u_i \rangle \quad (\text{IV-56})$$

où les $\{|u_i\rangle\}$ sont une base quelconque de \mathfrak{E} . Lorsque cette base est ortho-normée, l'unitarité des T entraîne celle des matrices de la représentation.

(6) Dans le cas d'un groupe continu de transformations \mathcal{C} , l'opérateur T est nécessairement unitaire (et non antiunitaire), du moins lorsque \mathcal{C} est proche de la transformation identité. Pour le voir on peut (comme dans le § 2 qui suit) introduire un paramètre $\vec{\alpha}$ pour décrire les transformations \mathcal{C} , donc les T, et développer $T(\delta\vec{\alpha})$ au premier ordre en $\delta\vec{\alpha}$ [égalités (IV-57) à (IV-59)] On obtient alors $T(\delta\vec{\alpha}) = T(\delta\vec{\alpha}/2) T(\delta\vec{\alpha}/2)$, égalité qui est incompatible avec l'antiunitarité des opérateurs T (le produit de deux opérateurs antiunitaires est unitaire ; cf chapitre VIII § B-1). L'unitarité des opérateurs T n'est d'ailleurs pas limitée au voisinage de l'unité mais peut être étendue à toute la "nappe" (composante connexe) où se trouve cet élément unité.

(7) Nous admettons ici que la structure de l'espace des états du système étudié est telle que, si deux kets $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ ne sont pas proportionnels, ils ne sont pas physiquement équivalents (il existe au moins une mesure physique qui permet de les distinguer).

Supposons, sans justification pour le moment, qu'on puisse annuler la fonction ξ quels que soient \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 . On aura alors une représentation (au sens strict) du groupe \mathcal{G} dans l'espace des états \mathcal{E} du système considéré, de dimensions N (dimensions de \mathcal{E}). Un problème important que nous allons étudier dans les chapitres ultérieurs sera la réductibilité de ces représentations.

2 - Cas d'un groupe continu

Lorsque le groupe \mathcal{G} est continu, on peut repérer ses éléments par le paramètre \vec{a} (\vec{a} a n composantes réelles) :

$$\mathcal{C} \equiv \mathcal{C}(\vec{a}) \tag{IV-57a}$$

l'opérateur unitaire T agissant dans \mathcal{E} est alors également une fonction de \vec{a} :

$$T \equiv T(\vec{a}) \tag{IV-57b}$$

Comme au chapitre III, dont nous utiliserons les notations, nous allons raisonner sur les \vec{a} plutôt que sur les éléments \mathcal{C} de \mathcal{G} eux-mêmes. Nous supposerons que $\vec{a} = \vec{0}$ correspond à l'opération \mathcal{C} identité et que, par suite :

$$T(\vec{0}) = \mathbb{1} \tag{IV-58}$$

(opérateur identité agissant dans \mathcal{E}). Si les opérateurs T sont des fonctions continues, dérivables, etc., des \vec{a} , on peut écrire, lorsque $\delta\vec{a}$ est infinitésimal :

$$T(\delta\vec{a}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \sum_j \delta a^j G_j + \dots = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \vec{G} + \dots \tag{IV-59}$$

où les G_j (résumés dans la notation \vec{G} qui symbolise un vecteur à n dimensions dont les composantes sont des opérateurs agissant dans \mathcal{E}) seront appelés "générateurs infinitésimaux". Le facteur \hbar a été introduit par raison de commodité (nous verrons pourquoi par la suite), et le i dans le second membre de (IV-56) assure que les G_j sont des opérateurs hermitiques. En effet :

$$T^\dagger(\delta\vec{a}) = 1 + \frac{i}{\hbar} \sum_j \delta a^j G_j^\dagger + \dots \tag{IV-60}$$

et l'unitarité de T entraîne :

$$T^\dagger(\delta\vec{a}) T(\delta\vec{a}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \sum_j \delta a^j (G_j - G_j^\dagger) + \dots \tag{IV-61}$$

c'est-à-dire (les δa^j étant quelconques) :

$$G_j = G_j^\dagger \quad (IV-62)$$

Cette égalité est essentielle pour pouvoir associer des observables physiques aux opérateurs G (elle assure la réalité de leurs valeurs propres).

Nous avons vu au chapitre III l'importance des constantes de structure d'un groupe de Lie. Ces constantes qui sont liées aux dérivées secondes de la fonction $\vec{\Phi}_2$, qui exprime la loi de groupe dans \mathcal{G} , par :

$$C_{ij}^k = f_{ij}^k - f_{ji}^k \quad (IV-63)$$

où les f_{ij}^k sont les composantes des n^2 vecteurs :

$$\vec{f}_{ij} = \left. \frac{\partial^2}{\partial a^i \partial b^j} \vec{\Phi}_2(\vec{a}, \vec{b}) \right|_{\vec{a} = \vec{b} = 0} \quad (IV-64)$$

Nous allons calquer ici le raisonnement du § 2-b du chapitre III pour trouver l'image, dans l'espace des états, de la transformation $\mathcal{C}(\delta\vec{c})$ (commutateur dans \mathcal{G}) définie par :

$$\mathcal{C}(\delta\vec{c}) = \mathcal{C}(\delta\vec{a}) \mathcal{C}(\delta\vec{b}) \mathcal{C}^{-1}(\delta\vec{a}) \mathcal{C}^{-1}(\delta\vec{b}) \quad (IV-65)$$

Rappelons [égalité (III-34) du chapitre III] que la $k^{\text{ième}}$ composante de $\delta\vec{c}$ vaut :

$$\delta c^k = \sum_{ij} C_{ij}^k \delta a^i \delta b^j \quad (IV-66)$$

D'autre part, à la transformation (IV-65) correspond dans l'espace des états & l'opérateur [nous supposons toujours l'absence de facteur de phase dans (IV-55)] :

$$T(\delta\vec{a}) T(\delta\vec{b}) T^\dagger(\delta\vec{a}) T^\dagger(\delta\vec{b}) = T(\delta\vec{c}) \quad (IV-67)$$

Dans (IV-59), reportons cette égalité [et une relation identique où $\delta\vec{b}$ remplace $\delta\vec{a}$]. Nous limitons le calcul au second ordre inclus en δa et δb en effectuant un raisonnement analogue à celui du §A-2-b du chapitre III [en particulier on voit sur (IV-67) que $T(\delta\vec{a})$ vaut identiquement 1 si soit $\delta\vec{a}$ soit $\delta\vec{b}$ est nul, ce qui permet d'éliminer les termes "carrés" en $\delta\vec{a}$ et $\delta\vec{b}$, et justifie l'utilisation de l'égalité (IV-59) limitée au premier ordre]. Il vient :

$$\begin{aligned} & \left\{ 1 + \frac{i}{\hbar} [(\delta\vec{a} \cdot \vec{G}) + (\delta\vec{b} \cdot \vec{G})] - \frac{1}{\hbar^2} (\delta\vec{a} \cdot \vec{G})(\delta\vec{b} \cdot \vec{G}) \right\} \left\{ 1 - \frac{i}{\hbar} [(\delta\vec{a} \cdot \vec{G}) + (\delta\vec{b} \cdot \vec{G})] - \frac{1}{\hbar^2} (\delta\vec{a} \cdot \vec{G})(\delta\vec{b} \cdot \vec{G}) \right\} + \dots \\ & = 1 + \frac{1}{\hbar} [(\delta\vec{a} \cdot \vec{G}) + (\delta\vec{b} \cdot \vec{G})]^2 - \frac{2}{\hbar^2} (\delta\vec{a} \cdot \vec{G})(\delta\vec{b} \cdot \vec{G}) + \dots = 1 - \frac{i}{\hbar} (\delta\vec{c} \cdot \vec{G}) + \dots \quad (IV-68) \end{aligned}$$

ou encore (en ignorant les termes carrés en δa et δb) :

$$[\delta \vec{a} \cdot \vec{G}, \delta \vec{b} \cdot \vec{G}] = i\hbar \delta \vec{c} \cdot \vec{G} \quad (IV-69)$$

Si maintenant l'on tient compte de (IV-66) et l'on identifie les termes en $\delta a_i \delta b_j$ ($\delta \vec{a}$ et $\delta \vec{b}$ peuvent être choisis de façon quelconque), on aboutit à la relation importante :

$$[G_i, G_j] = i\hbar \sum_k c_{ij}^k G_k \quad (IV-70)$$

De façon extrêmement générale, nous obtenons donc des relations de commutation satisfaites par les observables G_k . Remarquons qu'aucune hypothèse n'est intervenue dans le raisonnement sur la nature du système physique étudié et donc la structure précise de son espace des états : seules interviennent dans le résultat les propriétés du groupe \mathcal{G} par l'intermédiaire de ses constantes de structure.

Revenons maintenant sur la question délicate des facteurs de phase, question que nous avons éludée jusqu'ici, et examinons ce qui doit être modifié dans les résultats précédents.

En fonction des paramètres \vec{a} et \vec{b} associés à \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 , la relation (IV-55) devient alors :

$$T(\vec{a}) T(\vec{b}) = e^{-i\xi(\vec{a}, \vec{b})} T[\vec{\Phi}_2(\vec{a}, \vec{b})] \quad (IV-71)$$

Commençons par étudier l'effet du facteur $e^{-i\xi(\vec{a}, \vec{b})}$ dans le cas le plus simple, celui où la dimension N de l'espace des états est finie.

3 - Les facteurs de phase (représentations finies) ⁽⁸⁾

Pour un espace de dimension finie, les matrices de la représentation, dont les éléments sont donnés en (IV-56), sont des matrices carrées $N \times N$ finies.

Dans ce cas, les facteurs de phase peuvent facilement être éliminés. Appelons en effet Δ le déterminant des matrices :

$$\Delta(\vec{a}) = \det \begin{pmatrix} T_{11}(\vec{a}) & T_{12}(\vec{a}) & \dots \\ T_{21}(\vec{a}) & & \\ \vdots & & \\ T_{N1}(\vec{a}) & & \end{pmatrix} \quad (IV-72)$$

⁽⁸⁾ Nous pouvons également supposer, sans nécessairement que N soit fini, que la représentation du groupe \mathcal{G} par les T a été décomposée en plusieurs représentations dont une au moins est finie (les T laissent globalement invariant un sous-espace \mathcal{E}' de \mathcal{E} , de dimension finie). C'est alors cette représentation finie (si elle existe) qui est étudiée au § 3.

L'unitarité des T entraîne :

$$|\Delta(\vec{a})| = 1 \tag{IV-73}$$

La relation (IV-70) donne alors (le déterminant d'un produit est le produit des déterminants) :

$$\Delta(\vec{a}) \Delta(\vec{b}) = e^{-iN\xi(\vec{a}, \vec{b})} \Delta(\vec{d}) \tag{IV-74}$$

où \vec{d} est le paramètre associé au produit $T(\vec{a}) T(\vec{b})$:

$$\vec{d} = \Phi_2(\vec{a}, \vec{b}) \tag{IV-75}$$

Il est clair sur (IV-74) que, si les déterminants Δ de toutes les matrices valent 1, les facteurs de phase ξ ne peuvent prendre que les valeurs $0, 2\pi/N, 4\pi/N, \dots, (N-1)2\pi/N$. Or, il suffit pour cela de remplacer les opérateurs T par les T' définis par :

$$T'(\vec{a}) = T(\vec{a}) / [\Delta(\vec{a})]^{1/N} \tag{IV-76}$$

de chacun

Un simple changement de phase des opérateurs T suffit donc à ramener à un nombre fini les valeurs possibles des facteurs de phase. Dans le complément IV-C, on montre que, si le groupe est simplement connexe, tous les ξ se ramènent à 0, de sorte que la représentation projective devient représentation au sens strict.

Cette opération n'est cependant plus possible dans un espace de dimension infinie, et nous ne pouvons pas ignorer cette possibilité : on sait bien en mécanique que, même dans un cas simple comme celui d'un système constitué d'une particule unique sans spin, l'espace des états n'est pas de dimension finie.

4 - Les facteurs de phase (représentations infinies)

Reprenons donc la discussion précédente dans le cas général où N étant infini, on ne peut pas définir le déterminant $\Delta(\vec{a})$.

a) Propriétés générales des facteurs de phase

Si on fait $\vec{a} = 0$ ou $\vec{b} = 0$ dans (IV-71), on obtient :

$$\xi(\vec{a}, \vec{0}) = \xi(\vec{0}, \vec{b}) = 0 \quad \forall \vec{a}, \vec{b} \tag{IV-77}$$

de sorte qu'au voisinage de l'origine, le développement de ξ au second ordre compris ne comprend que des termes "croisés" :

$$\xi(\delta\vec{a}, \delta\vec{b}) = \sum_{ij} \gamma_{ij} \delta a^i \delta b^j + \dots \tag{IV-78}$$

D'autre part, la fonction ξ n'est pas complètement arbitraire.

Considérons en effet trois opérations \mathcal{C} successives de paramètres $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Les paramètres associés aux produits $\mathcal{C}(\vec{a})\mathcal{C}(\vec{b})$ et $\mathcal{C}(\vec{b})\mathcal{C}(\vec{c})$ sont :

$$\begin{aligned} \vec{d}_1 &= \Phi_1(\vec{a}, \vec{b}) \\ \vec{d}_2 &= \Phi_2(\vec{b}, \vec{c}) \end{aligned} \tag{IV-79}$$

et celui associé au produit $\mathcal{L}(\vec{a}) \mathcal{L}(\vec{b}) \mathcal{L}(\vec{c})$:

$$\vec{d} = \Phi_2(\vec{d}_1, \vec{c}) = \Phi_2(\vec{a}, \vec{d}_2) \quad (\text{IV-80})$$

[associativité du produit dans \mathcal{G} ; cf. relation (III-44) du chapitre III].

On a :

$$\begin{cases} T(\vec{a}) T(\vec{b}) &= e^{-i\xi(\vec{a}, \vec{b})} T(\vec{d}_1) \\ T(\vec{b}) T(\vec{c}) &= e^{-i\xi(\vec{b}, \vec{c})} T(\vec{d}_2) \end{cases} \quad (\text{IV-81})$$

et donc :

$$\begin{aligned} T(\vec{a}) T(\vec{b}) T(\vec{c}) &= e^{-i\xi(\vec{a}, \vec{b})} e^{-i\xi(\vec{d}_1, \vec{c})} T(\vec{d}) \\ &= e^{-i\xi(\vec{a}, \vec{d}_2)} e^{-i\xi(\vec{b}, \vec{c})} T(\vec{d}) \end{aligned} \quad (\text{IV-82})$$

Donc, l'associativité du produit entraîne que :

$$\boxed{\xi(\vec{a}, \vec{b}) + \xi(\vec{d}_1, \vec{c}) = \xi(\vec{a}, \vec{d}_2) + \xi(\vec{b}, \vec{c})} \quad (\text{IV-83})$$

[avec (IV-78)]. Cette relation nous sera utile dans la suite.

b) Extension de l'algèbre de Lie

Reprenons maintenant le raisonnement du paragraphe 1 précédent, compte tenu de la présence des facteurs de phase. Il faut alors remplacer (IV-67) par ⁽⁹⁾ :

$$T(\delta\vec{a}) T(\delta\vec{b}) T^+(\delta\vec{a}) T^+(\delta\vec{b}) = e^{-i\delta\xi} T(\delta\vec{c}) \quad (\text{IV-84})$$

Un raisonnement analogue à celui qui nous a conduit à (IV-82) donne :

$$\delta\xi = \xi(\delta\vec{a}, \delta\vec{b}) + \xi(\delta\vec{d}_1, \delta\vec{a}') + \xi(\delta\vec{d}_3, \delta\vec{b}') + \dots \quad (\text{IV-85})$$

avec :

$$\begin{aligned} \delta\vec{a}' &= \Phi_1(\delta\vec{a}) \\ \delta\vec{b}' &= \Phi_1(\delta\vec{b}) \end{aligned} \quad (\text{IV-86})$$

et :

$$\begin{aligned} \delta\vec{d}_1 &= \Phi_2(\delta\vec{a}, \delta\vec{b}) \\ \delta\vec{d}_3 &= \Phi_2(\delta\vec{d}_1, \delta\vec{a}') \end{aligned} \quad (\text{IV-87})$$

⁽⁹⁾ L'équation (IV-84) suppose implicitement que deux opérateurs inverses \mathcal{G} et \mathcal{G}^{-1} correspondent à des opérateurs inverses T et $T^{-1} = T^\dagger$. Le cas plus général où cette hypothèse n'est pas réalisée sera traité dans ce qui suit, et les résultats essentiels seront les mêmes.

Nous nous limiterons ici encore aux termes du deuxième ordre en δa et δb . En utilisant la formule (IV-78), on voit qu'on peut se limiter dans le calcul de $\delta \vec{a}'$, $\delta \vec{b}'$, $\delta \vec{d}_1$ et $\delta \vec{d}_3$ aux termes du premier ordre :

$$\begin{aligned} \delta \vec{a}' &= -\delta \vec{a} + \dots \\ \delta \vec{b}' &= -\delta \vec{b} + \dots \\ \delta \vec{d}_1 &= \delta \vec{a} + \delta \vec{b} + \dots \\ \delta \vec{d}_3 &= \delta \vec{d}_1 + \delta \vec{a} = \delta \vec{b} + \dots \end{aligned} \quad (IV-88)$$

et que, par suite :

$$\begin{aligned} \delta \xi &= \sum_{ij} \gamma_{ij} \left[\delta a^i \delta b^j + (\delta a^i + \delta b^i)(-\delta a^j) + (\delta b^i)(-\delta b^j) \right] + \dots \\ &= \sum_{ij} \gamma_{ij} (\delta a^i \delta b^j - \delta b^i \delta a^j) - \sum_{ij} \gamma_{ij} (\delta a^i \delta a^j + \delta b^i \delta b^j) \end{aligned} \quad (IV-89)$$

Remplaçons $e^{-i\delta\xi}$ par $1-i\delta\xi$ au second membre de (IV-84), ce qui est possible puisqu'on fait ainsi une erreur du 3ème ordre au moins. Il vient alors :

$$1 - \frac{1}{\hbar^2} [\delta \vec{a} \cdot \vec{G}, \delta \vec{b} \cdot \vec{G}] = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{c} \cdot \vec{G} - i\delta\xi \quad (IV-90)$$

qui remplace (IV-68). L'identification des développements au second ordre des deux membres de cette égalité donne alors, compte tenu de (IV-89) :

$$[G_i, G_j] = i\hbar \sum_k C_{ij}^k G_k + i\hbar^2 (\gamma_{ij} - \gamma_{ji}) \quad (IV-91)$$

et :

$$\gamma_{ij} + \gamma_{ji} = 0 \quad (IV-92)$$

La seconde de ces égalités montre que la matrice Γ des dérivées secondes à l'origine de la fonction ξ est antisymétrique. La première nous indique comment, dans le cas d'une représentation projective, il faut modifier les relations de commutation entre générateurs infinitésimaux : aux termes donnés par les constantes de structure du groupe, C_{ij}^k , il suffit d'ajouter des constantes antisymétriques (proportionnelles à l'opérateur unité) :

$$\beta_{ij} = \gamma_{ij} - \gamma_{ji} \quad (IV-93)$$

L'opérateur qui consiste à modifier l'algèbre de Lie de cette façon en lui adjoignant l'opérateur unité porte le nom d'extension de l'algèbre de Lie.

Remarque :

Pour écrire (IV-84) nous avons supposé que deux opérateurs inverses $T(\delta \vec{a})$ et $T^\dagger(\delta \vec{a})$ correspondent aux deux opérations inverses

$\mathcal{L}(\delta\vec{a})$ et $\mathcal{L}^{-1}(\delta\vec{a})$. C'est en fait l'origine des relations (IV-92) ⁽¹⁰⁾.

Rien n'empêche de généraliser ce que nous avons fait et de simplement supposer, comme l'impose (IV-71), que :

$$\mathcal{L}(\vec{a}'') = \mathcal{L}^{-1}(\vec{a}) \tag{IV-94}$$

entraîne que :

$$T(\vec{a}'') = e^{-i\chi(\vec{a})} T^+(\vec{a}) \tag{IV-95}$$

La fonction χ , comme ξ , ne peut varier qu'au second ordre au voisinage de l'origine : on sait que si \vec{a} a la valeur infinitésimale $\delta\vec{a}$, \vec{a}'' vaut $-\delta\vec{a}$ au premier ordre près [cf équation (III-27) du chapitre III] et on vérifie sur (IV-58) que $T(-\delta\vec{a}) = T^{-1}(\delta\vec{a}) + O(\delta a^2)$. Donc :

$$\chi(\delta\vec{a}) = \sum_{ij} \theta_{ij} \delta a^i \delta a^j \tag{IV-96}$$

avec :

$$\theta_{ij} = \theta_{ji}$$

L'introduction de cette fonction χ revient à multiplier le premier membre de (IV-84) par $e^{i[\chi(\delta\vec{a}) + \chi(\delta\vec{b})]}$ et donc à y ajouter des termes du second ordre en δa^2 et δb^2 (mais pas de termes croisés). Par suite, (IV-91) reste toujours valable, mais (IV-92) devient :

$$\gamma_{ij} + \gamma_{ji} = 2\theta_{ij} = 2\theta_{ji} \tag{IV-97}$$

c) Lien entre les constantes d'extension et les constantes de structure
.....

Il ne faut pas croire que la fonction ξ , et par suite les β_{ij} qui sont reliés à ses dérivées secondes, sont quelconques. Nous avons déjà écrit en (IV-83) une relation nécessairement satisfaite par ξ . Examinons ce qu'elle implique concernant les constantes β_{ij} d'extension de l'algèbre de Lie.

Pour cela, remplaçons \vec{a} par $\delta\vec{a}$, \vec{b} par $\delta\vec{b}$ et \vec{c} par $\delta\vec{c}$ et écrivons l'égalité des développements des deux membres de (IV-83), en nous limitant au terme croisé du 3ème ordre du type $\delta a \delta b \delta c$. On a [cf chapitre III, relation (III-28)] :

⁽¹⁰⁾ On peut directement démontrer que $\gamma_{ij} = -\gamma_{ji}$ en considérant l'opération inverse de $T(\delta\vec{a})$, notée $T(\delta\vec{a}'')$, en écrivant d'après (IV-70) que $e^{-i\xi(\delta\vec{a}, \delta\vec{a}'')} = 1$ et en développant au second ordre en δa .

$$\begin{aligned} \delta \vec{d}_1 &= \Phi_2(\delta \vec{a}, \delta \vec{b}) = \delta \vec{a} + \delta \vec{b} + \sum_{ij} \tilde{F}_{ij} \delta a^i \delta b^j + \dots \\ \delta \vec{d}_2 &= \Phi_2(\delta \vec{b}, \delta \vec{c}) = \delta \vec{b} + \delta \vec{c} + \sum_{ij} \tilde{F}_{jk} \delta b^j \delta c^k + \dots \end{aligned} \quad (IV-98)$$

Si l'on ne garde de (IV-83) que :

$$\xi(\delta \vec{d}_1, \vec{c}) = \xi(\delta \vec{a}, \delta \vec{d}_2) + \dots \quad (IV-99)$$

[puisque $\xi(\delta \vec{a}, \delta \vec{b})$ et $\xi(\delta \vec{b}, \delta \vec{c})$ n'ont pas de termes en $\delta a \delta b \delta c$] il vient compte tenu de (IV-78) :

$$\sum_{k\ell} \gamma_{\ell k} \left(\sum_{ij} f_{ij}^\ell \delta a^i \delta b^j \right) \delta c^k = \sum_{i\ell} \gamma_{i\ell} \delta a^i \left(\sum_{jk} f_{jk}^\ell \delta b^j \delta c^k \right) \quad (IV-100)$$

Par identification :

$$\sum_{\ell} \gamma_{\ell k} f_{ij}^\ell = \sum_{\ell} \gamma_{i\ell} f_{jk}^\ell \quad \forall i, j, k \quad (IV-101)$$

Un calcul du même type que celui du chapitre III, qui nous a permis de passer de (III-47b) à la relation générale (III-43) permet alors de montrer que [on utilise en fait 6 fois (IV-101) avec des dénominations différentes des indices et on effectue une somme] :

$$\sum_{\ell} \{ \beta_{\ell i} C_{jk}^\ell + \beta_{\ell j} C_{ki}^\ell + \beta_{\ell k} C_{ij}^\ell \} = 0 \quad (IV-102)$$

[dans cette égalité, i, j et k sont quelconques et subissent une permutation circulaire].

CHAPITRE V

LE GROUPE DES DÉPLACEMENTS GÉOMÉTRIQUES

A - RAPPELS : PROPRIETES CLASSIQUES DES DEPLACEMENTS.....	p. 105
1 - Les translations.....	p. 105
2 - Les rotations.....	p. 107
a) Paramètres du groupe.....	p. 107
b) Matrices de rotation.....	p. 109
c) Rotations infinitésimales.....	p. 110
d) Topologie du groupe des rotations.....	p. 112
3 - Déplacement quelconque.....	p. 115
B - OPERATEURS ASSOCIES DANS L'ESPACE DES ETATS.....	p. 117
1 - Générateurs infinitésimaux. Relations de commutation.....	p. 117
2 - Opérateurs de déplacement fini.....	p. 120
a) Translations.....	p. 120
b) Rotations.....	p. 122
c) Déplacements quelconques.....	p. 123
3 - Ensemble de deux sous-systèmes.....	p. 124
4 - Invariance par translation ou rotation.....	p. 126
C - CONSTRUCTION D'UN ESPACE DES ETATS PARTICULIEREMENT SIMPLE.....	p. 128
1 - Opérateur Position.....	p. 128
2 - Relations de commutation.....	p. 130
3 - Action de \vec{P} et \vec{J} en représentation $\{ \vec{r}\rangle\}$	p. 131
4 - Densité et courant de probabilité.....	p. 137

Ce chapitre est consacré à l'étude des opérateurs associés à l'ensemble des transformations \mathcal{G} qui sont des déplacements dans l'espace.

Nous commencerons par rappeler la définition du groupe $\mathcal{E}_{(3)}$ des déplacements et, au § A, rappellerons un certain nombre de propriétés qui nous seront utiles pour la suite. Dans le § B, nous étudierons les relations de commutation entre opérateurs infinitésimaux \vec{P} et \vec{J} associés aux déplacements (compte tenu de la possibilité de représentations projectives du groupe des déplacements dans l'espace des états). Nous démontrerons la propriété d'additivité des impulsions et des moments cinétiques, et discuterons de façon générale l'invariance par translation et rotation. Nous commencerons ensuite à appliquer le programme défini dans le chapitre précédent : sachant que, dans l'espace des états \mathcal{E} d'un système physique quelconque, les opérateurs T associés aux déplacements donnent nécessairement des représentations du groupe euclidien $\mathcal{E}_{(3)}$, on peut envisager de construire les divers espaces \mathcal{E} a priori possibles. Au § C, nous chercherons à obtenir le plus simple de ces espaces, compte tenu d'hypothèses très générales sur le système physique envisagé (existence d'un opérateur de position à spectre complet). Le système physique ainsi obtenu sera simplement le système "élémentaire" constitué par une particule unique sans spin. [Le problème de la construction d'espaces \mathcal{E} plus complexes sera repris au chapitre VI après une étude plus détaillée des représentations du sous groupe $R_{(3)}$ des rotations].

Dans l'espace ponctuel euclidien réel, à trois dimensions, faisons correspondre à tout point M un point M' (image de M) de façon que :

- . les longueurs des vecteurs soient conservées ; si M'_1 et M'_2 sont les images de M_1 et M_2 , on doit toujours avoir :

$$|\overrightarrow{M'_1 M'_2}| = |\overrightarrow{M_1 M_2}| \quad (V-1)$$

- . les produits scalaires, donc les angles (non orientés), soient conservés ; si M'_3 et M'_4 sont les images de M_3 et M_4 :

$$\overrightarrow{M'_1 M'_2} \cdot \overrightarrow{M'_3 M'_4} = \overrightarrow{M_1 M_2} \cdot \overrightarrow{M_3 M_4} \quad (V-2)$$

On obtient ainsi un ensemble de transformations comprenant les rotations, translations et réflexions d'espace (symétrie par rapport à un point quelconque) et les produits de ces opérations ⁽¹⁾. Cet ensemble constitue un groupe \mathcal{G} .

Plusieurs sous-groupes de \mathcal{G} peuvent être construits. Par exemple :

- α . Groupe $T_{(3)}$ des translations (dimension 3)
- β . Groupe $R_{(3)}$ des rotations autour d'un point arbitraire donné (dimension 3)
- γ . Symétrie par rapport à un point arbitraire donné (parité) et opération identité.

On peut aussi combiner β et γ , ce qui donne le groupe $O_{(3)}$; ou encore α et β , ce qui donne le groupe euclidien $\mathcal{E}_{(3)}$ des déplacements. D'autres sous-groupes sont les groupes "ponctuels" de symétrie cristallo-graphiques, dont nous ne parlerons pas ici.

Ces transformations se présentent exactement de la même façon dans le cadre de la relativité de Galilée ou de Lorentz. Il est donc particulièrement intéressant de les étudier.

De fait, ce chapitre sera consacré aux déplacements (c'est-à-dire aux translations et rotations), mais on trouvera dans le complément V-A une étude succincte de l'opérateur parité et de ses propriétés.

A - RAPPELS : PROPRIETES CLASSIQUES DES DEPLACEMENTS

1 - Les translations

Au point M, repéré par rapport à un référentiel donné par un vecteur position \vec{r} , on fait correspondre un point M' de vecteur position \vec{r}' tel que :

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{\ell} \quad (V-3)$$

Les translations \mathcal{L} sont repérées par les 3 composantes du vecteur $\vec{\ell}$ (qui joue le rôle du vecteur noté \vec{a} dans les chapitres précédents)

$$\mathcal{L}(\vec{\ell}) \vec{r} = \vec{r} + \vec{\ell} \quad (V-4)$$

⁽¹⁾ Si la transformation considérée laisse un point 0 invariant, il est facile de voir que c'est une transformation linéaire, à laquelle on associe une matrice 3×3 . Si le déterminant de cette matrice vaut + 1, la transformation est une rotation ; s'il vaut - 1, le produit d'une rotation et d'une symétrie par rapport au point 0. Pour une transformation quelconque, où 0' est l'image de 0, on se ramène au cas précédent en appliquant une translation de vecteur $\vec{O'O}$.

[les translations seront écrites, soit sous la forme $\mathcal{C}(\vec{\ell})$, soit $\mathcal{C}_{\vec{u}}(\ell)$, où \vec{u} est le vecteur unitaire parallèle à $\vec{\ell}$]. La loi de groupe est :

$$\mathcal{C}(\vec{\ell}') \mathcal{C}(\vec{\ell}) = \mathcal{C}(\vec{\ell}' + \vec{\ell}) \quad (V-5)$$

égalité qui montre que le groupe des translations est abélien. C'est un groupe non compact (le domaine accessible à $\vec{\ell}$ a un volume infini).

Les coordonnées x' , y' et z' de \vec{r}' sont données en fonction de celles, x , y et z , de \vec{r} , par :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{pmatrix} = M(\vec{\ell}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} \quad (V-6)$$

avec :

$$M(\vec{\ell}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \ell_x \\ 0 & 1 & 0 & \ell_y \\ 0 & 0 & 1 & \ell_z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (V-7)$$

On voit sur cette expression que l'opération infinitésimale $M(d\vec{\ell})$ s'écrit :

$$\begin{aligned} M(d\vec{\ell}) &= (1) + d\ell_x \Pi_x + d\ell_y \Pi_y + d\ell_z \Pi_z \\ &= (1) + d\vec{\ell} \cdot \vec{\Pi} \end{aligned} \quad (V-8)$$

où les trois composantes du vecteur $\vec{\Pi}$ sont les matrices :

$$\Pi_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (V-9a)$$

$$\Pi_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (V-9b)$$

$$\Pi_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (V-9c)$$

On vérifie facilement que :

$$\Pi_{x_i} \Pi_{x_j} = 0 \quad \forall i, j \quad (V-10)$$

Par suite, les matrices Π commutent toutes entre elles :

$$[\Pi_{x_i}, \Pi_{x_j}] = 0 \quad \forall i, j \quad (V-11a)$$

ou encore :

$$[\vec{\Pi}, \vec{\Pi}] = 0 \quad (V-11b)$$

Nous retrouvons un résultat déjà établi au § C du chapitre III : les constantes de structure du groupe des translations sont toutes nulles (groupe abélien).

D'autre part, la relation (V-10) entraîne également que :

$$\begin{aligned} e^{(\vec{x} \cdot \vec{\Pi})} &= 1 + (\vec{x} \cdot \vec{\Pi}) + \frac{1}{2} (\vec{x} \cdot \vec{\Pi})^2 + \dots \\ &= 1 + \vec{x} \cdot \vec{\Pi} \end{aligned} \quad (V-12a)$$

qui nous redonne immédiatement la matrice (V-7). Donc :

$$M(\vec{x}) = e^{(\vec{x} \cdot \vec{\Pi})} \quad (V-12b)$$

Cette relation permet donc d'exprimer toute matrice de translation en fonction des matrices composantes de $\vec{\Pi}$.

2 - Les rotations

Une rotation peut être définie comme une transformation \mathcal{R} biunivoque entre les points de l'espace réel à 3 dimensions et lui-même, transformation qui conserve un point de l'espace (choisi comme origine 0), les distances (donc les angles) et le sens des trièdres (ce qui élimine les symétries par rapport à 0 ou un plan contenant 0).

a) Paramètres du groupe

Les rotations \mathcal{R} dépendent de 3 paramètres (groupe de dimension $n = 3$). Nous avons déjà introduit au chapitre III paramétrisation du groupe des rotations, par un vecteur :

$$\vec{a} = \vec{u}_\phi \quad (V-13)$$

où \vec{u} est le vecteur unitaire de l'axe de rotation autour duquel l'angle de rotation ϕ est compté de façon positive.

Une autre façon d'associer 3 paramètres à chaque rotation est de la caractériser par ses trois "angles d'Euler" α , β et γ . Ces angles sont représentés sur la figure V-1. Soit $Oxyz$ le trièdre de référence. Sous l'effet de la rotation \mathcal{R} , les points qui coïncident avec les axes $Oxyz$ viennent coïncider avec ceux d'un nouveau trièdre $OXYZ$; α et β sont par définition les angles polaires de OZ par rapport au trièdre initial $Oxyz$.

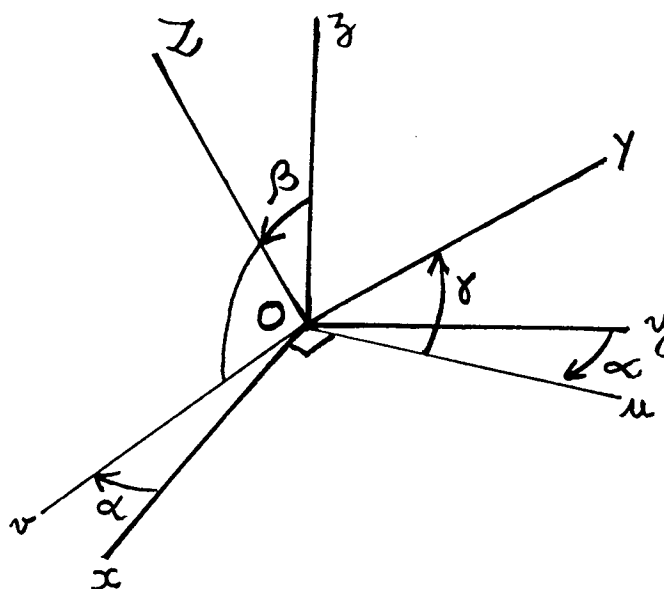


Fig. V-1

Soit Ov la projection orthogonale de l'axe OZ dans le plan Oy ,
Ou l'axe de ce plan perpendiculaire à Ov . Pour amener $Oxyz$ sur $OXYZ$, on
peut successivement :

- . effectuer une rotation autour de Oz d'angle α (cette rotation amène les
points de Oy sur Ou).
- . effectuer une rotation autour de Ou , d'angle β (on amène par la suite
de ces deux opérations Oz sur OZ , tandis que Oy reste confondu avec Ou).
- . effectuer enfin une rotation autour de OZ , d'angle γ (γ est donc par
définition l'angle entre Ou et OY' compté positivement autour de OZ').

Les 3 angles α , β , γ sont comptés algébriquement [sur la figure
V-1, α est négatif]. Pour finir, on a :

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_Z(\gamma)R_U(\beta)R_Z(\alpha) \quad (V-14)$$

Dans cette expression interviennent des rotations autour de OZ et de Ou ,
qui sont des axes dépendant de la rotation considérée. Il est cependant
possible de la modifier pour que n'apparaissent que des rotations autour
des axes des coordonnées. En effet, on a :

$$R_U(\beta) = R_Z(\alpha)R_Y(\beta)R_Z(-\alpha) \quad (V-15)$$

Pour comprendre cette égalité considérons un objet (ensemble de points)
sur lequel est appliquée la suite des 3 rotations écrites au second
membre. On commence par amener l'axe de l'objet qui coïncide avec Ou sur
 Oy , on effectue ensuite autour de Oy une rotation d'angle β , puis on ramène
l'axe de l'objet sur Ou . Il est clair que cet axe reste invariant dans
l'opération globale envisagée (ce qui rend plausible que cette dernière

soit une rotation autour de Ou).

De fait, la formule (V-15), écrite sous forme matricielle, peut être considérée comme une formule de changement d'axes de coordonnées pour les matrices associées à un même opérateur : dans un changement d'axes repéré par une matrice S (dont les colonnes contiennent les composantes des nouveaux vecteurs de base sur les anciens) on sait que la matrice M qui représente un opérateur linéaire quelconque devient $M' = S^{-1} M S$. De ce point de vue, le second membre de (V-15) s'interprète comme l'opération qui, dans des axes tournés de $-\alpha$ autour de Oz , décrit une rotation de β autour de Oy . La même matrice, dans les axes $Oxyz$, décrira donc une rotation d'un angle β autour de l'axe du plan xOy obtenu à partir de Oy par rotation de $+\alpha$ autour de Oz , c'est-à-dire autour de Ou : c'est bien $R_u(\beta)$.

De même, on verrait que :

$$R_z(\gamma) = R_u(\beta) R_z(\gamma) R_u(-\beta) \tag{V-16}$$

Reportons (V-15) et (V-16) dans (V-14). Il vient :

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(-\alpha) R_z(\gamma) R_u(-\beta) R_u(\beta) R_z(\alpha) \tag{V-17}$$

c'est-à-dire [toutes les rotations autour de Oz commutent entre elles] :

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma) \tag{V-18}$$

b) Matrices de rotation

Soient \vec{e}_1, \vec{e}_2 et \vec{e}_3 les vecteurs unitaires des trois axes de coordonnées et :

$$\vec{e}'_i = R \vec{e}_i \quad i = 1, 2, 3 \tag{V-19}$$

leurs transformés par R . Par définition, la matrice (R) , d'éléments R_{ji} est telle que :

$$(\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3) = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3) \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \tag{V-20}$$

Dans les colonnes de la matrice (R) se trouvent les coordonnées des transformés \vec{e}'_i des vecteurs de base. On a :

$$\vec{e}'_i = \sum_j R_{ji} \vec{e}_j \quad i, j = 1, 2, 3 \tag{V-21}$$

Si \vec{OM} s'écrit :

$$\vec{OM} = \sum_{i=1}^3 x_i \vec{e}_i \tag{V-22}$$

le transformé M' de M par la rotation est donné par :

$$\vec{OM}' = \sum_i x_i \vec{e}'_i = \sum_{ij} x_i R_{ji} \vec{e}_j \tag{V-23}$$

c'est-à-dire :

$$x'_j = \sum_i R_{ji} x_i$$

ou encore :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = (R) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{V-24}$$

Les matrices (R) sont les matrices 3×3 orthogonales (réelles et unitaires) unimodulaires (de déterminant unité), c'est-à-dire celles du groupe $S0(3)$. On a :

$$\begin{cases} (R)^{-1} = (R)^t \\ \det(R) = 1 \\ \text{Tr}(R) = 1 + 2 \cos\phi \end{cases} \tag{V-25}$$

où $(R)^t$ désigne la matrice transposée de (R) .

Que l'on prenne les paramètres \vec{a} ou α, β, γ , l'égalité (V-18) peut être utilisée pour donner l'expression explicite de (R) . Par exemple :

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos\gamma \cos\beta \cos\alpha - \sin\gamma \sin\alpha & -\sin\gamma \cos\beta \cos\alpha - \cos\gamma \sin\alpha & \sin\beta \cos\alpha \\ \cos\gamma \cos\beta \sin\alpha + \sin\gamma \cos\alpha & -\sin\gamma \cos\beta \sin\alpha + \cos\gamma \cos\alpha & \sin\beta \sin\alpha \\ -\cos\gamma \sin\beta & \sin\gamma \sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{V-26}$$

La rotation identité n'est obtenue que pour la valeur nulle du paramètre \vec{a} , alors qu'elle est associée à une infinité de valeur des paramètres α, β et γ [toutes les valeurs telle que $\beta = 0, \alpha + \gamma = 0$], ce qui est un inconvénient des angles d'Euler.

c) Rotations infinitésimales

Dans une rotation infinitésimale de vecteur :

$$\delta\vec{a} = \vec{u} \delta\phi \tag{V-27}$$

Le transformé M' de M (figure V-2) est tel que, au premier ordre en $\delta\phi$:

$$\vec{MM}' = \delta\phi \vec{u} \times \vec{OM} + \dots \quad (V-28)$$

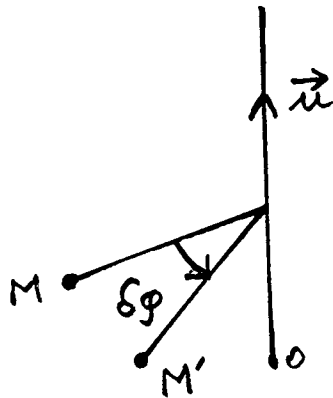


Fig. V-2

donc :

$$\begin{aligned} \vec{OM}' &= \vec{OM} + \delta\phi \vec{u} \times \vec{OM} + \dots \\ &= \vec{OM} + \delta\vec{a} \times \vec{OM} + \dots \end{aligned} \quad (V-29)$$

et on peut écrire :

$$\mathcal{R}(\vec{u}\delta\phi) = 1 + \delta\phi \vec{u} \times + \dots \quad (V-30)$$

Par suite, la matrice associée à \mathcal{R} est :

$$(\mathcal{R}(\vec{u}\delta\phi)) = 1 + \delta\phi \mathcal{M}_u + \dots \quad (V-31)$$

où \mathcal{M}_u est donné en fonction des composantes u_x , u_y et u_z de \vec{u} par :

$$\mathcal{M}_u = u_x \mathcal{M}_x + u_y \mathcal{M}_y + u_z \mathcal{M}_z \quad (V-32)$$

et :

$$\mathcal{M}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{M}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{M}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (V-33)$$

Les \mathcal{M}_{x_i} ($x_i = x, y$ ou z) engendrent l'algèbre de Lie du groupe des matrices (\mathcal{R}) .

On obtient immédiatement [cf chapitre III § C-1] :

$$[\mathcal{M}_x, \mathcal{M}_y] = \mathcal{M}_z \quad (V-34a)$$

et, par permutation circulaire de x, y et z :

$$[\mathcal{M}_{x_i}, \mathcal{M}_{x_j}] = \epsilon_{ijk} \mathcal{M}_{x_k} \quad (V-34b)$$

[la définition de ϵ_{ijk} a été donnée au chapitre III § C-1]. Ces relations montrent que $R(3)$ n'est pas un groupe abélien et nous donnent les constantes de structure :

$$C_{ij}^k = \epsilon_{ijk} \quad (V-35)$$

Calculons, au deuxième ordre en $\delta\phi$ et $\delta\phi'$, la rotation produit [commutateur de $\mathcal{R}_{\vec{u}}(\delta\phi)$ et de $\mathcal{R}_{\vec{v}}(\delta\phi')$] :

$$\mathcal{R}_{\vec{u}}(\delta\phi)\mathcal{R}_{\vec{v}}(\delta\phi')\mathcal{R}_{\vec{u}}(-\delta\phi)\mathcal{R}_{\vec{v}}(-\delta\phi') \tag{V-36}$$

Le raisonnement général du § 2-b du chapitre III s'applique ici ; les termes carrés en $\delta\phi^2$ ou $\delta\phi'^2$ sont nuls (la rotation produit étant l'identité si $\delta\phi$ ou $\delta\phi'$ est nul), ce qui permet facilement d'inverser (V-30), et :

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \mathcal{R}_{\vec{v}}(-\delta\phi')\vec{r} = \vec{r} - \delta\phi'\vec{v} \times \vec{r} + \dots \\ \vec{r}_2 &= \mathcal{R}_{\vec{u}}(-\delta\phi)\vec{r}_1 = \vec{r}_1 - \delta\phi\vec{u} \times \vec{r}_1 + \dots \\ &= \vec{r} - \delta\phi'\vec{v} \times \vec{r} - \delta\phi\vec{u} \times [\vec{r} - \delta\phi'\vec{v} \times \vec{r}] + \dots \\ \vec{r}_3 &= \mathcal{R}_{\vec{v}}(\delta\phi')\vec{r}_2 = \vec{r}_2 + \delta\phi'\vec{v} \times \vec{r}_2 \\ &= \vec{r} - \delta\phi\vec{u} \times [\vec{r} - \delta\phi'\vec{v} \times \vec{r}] - \delta\phi\delta\phi'\vec{v} \times [\vec{u} \times \vec{r}] + \dots \\ \vec{r}_4 &= \mathcal{R}_{\vec{u}}(\delta\phi)\vec{r}_3 = \vec{r}_3 + \delta\phi\vec{u} \times \vec{r}_3 \\ &= \vec{r} + \delta\phi\delta\phi' [\vec{u} \times (\vec{v} \times \vec{r}) - \vec{v} \times (\vec{u} \times \vec{r})] \\ &= \vec{r} + \delta\phi\delta\phi' (\vec{u} \times \vec{v}) \times \vec{r} \end{aligned} \tag{V-37}$$

Pour finir, au second ordre en $\delta\phi$ et $\delta\phi'$:

$$\mathcal{R}_{\vec{u}}(\delta\phi)\mathcal{R}_{\vec{v}}(\delta\phi')\mathcal{R}_{\vec{u}}(-\delta\phi)\mathcal{R}_{\vec{v}}(-\delta\phi') = \mathcal{R}_{\vec{u} \times \vec{v}}(\delta\phi\delta\phi') + \dots \tag{V-38-a}$$

Donc, avec les notations de la relation (III-19) :

$$\vec{\delta}_c = [\vec{u} \times \vec{v}] \delta\phi \delta\phi' \tag{V-38-b}$$

d) Topologie du groupe des rotations

Le domaine D accessible au vecteur \vec{a} (qui a 3 composantes) est l'intérieur d'une sphère de diamètre 2π [figure V-3]. Deux rotations sont toujours différentes si les vecteurs \vec{a} sont différents, sauf si leurs extrémités se trouvent sur la surface de la sphère (deux rotations de même axe et d'angles $+\pi$ et $-\pi$ donnent le même résultat). On voit de plus que deux vecteurs \vec{a} opposés tels que $|\vec{a}| = 2\pi - \epsilon$, où $\epsilon \rightarrow 0$, correspondent à des rotations infiniment voisines.

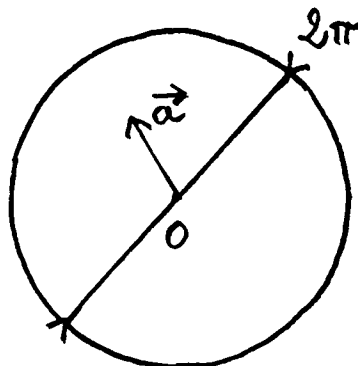


Fig. V-3

Pour préserver la topologie du groupe des rotations, il faut donc identifier deux à deux tous les points diamétralement opposés de la surface de la sphère [on notera ici une différence importante avec $SU(2)$, où il fallait identifier entre eux tous les points de la sphère frontière ; cf chapitre III § B-3].

Le groupe des rotations est compact, il est connexe. Par contre, il n'est pas simplement connexe, mais 2-connexe [son groupe Π_1 d'homotopie est homomorphe au groupe cyclique abélien Z_2]. En effet, un chemin comme celui de la figure V-4, aboutissant à deux points diamétralement opposés A et A' de la surface de la sphère, doit être considéré comme fermé [A et A' correspondent au même élément de $R(3)$]. Il est clair qu'il n'est pas possible de déformer continûment ce chemin en un chemin infinitésimal puisque A et A' sont toujours astreints à rester diamétralement opposés.

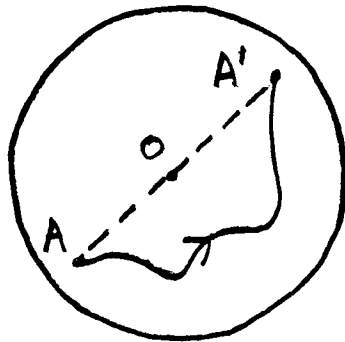
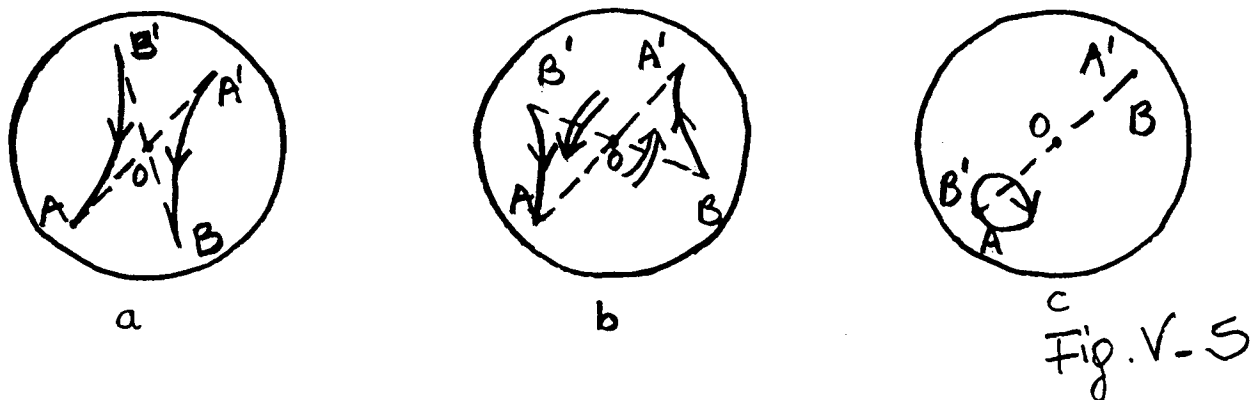


Fig V-4

Par contre, si le chemin considéré passe par deux couples de points diamétralement opposés, A et A' , B et B' , on peut [cf figure V-5] le déformer continûment en un chemin nul. De façon générale, si le chemin passe un nombre pair de fois par une rotation d'angle π , c'est-à-dire coupe la surface de la sphère en un nombre pair de couples de points, il est homotope à zéro. Si ce nombre est impair, il est homotope à celui de la figure V-4.

Si l'on considère seulement des rotations autour d'un axe donné, un chemin où l'objet fera un tour (rotation de 2π) sera non homotope à zéro, deux tours (4π) homotope à zéro, etc.
dans $R(3)$



Légende de la Figure V-5

On considère dans $R_{(3)}$ un chemin fermé dont l'image est représentée sur la figure a : le chemin coupe la surface de la sphère en deux couples de points diamétralement opposés , A et A' d'une part, B et B' de l'autre.

Il est possible de déformer un tel chemin de façon continue en un chemin nul (c'est donc un chemin homotope à zéro). En effet, sans déplacer A et A' on peut incliner l'axe BB' de façon que B' se rapproche de A et B et A' (figure b) . Lorsque ces points sont confondus le chemin initial est formé de deux lacets fermés passant l'un par A l'autre par B : un mobile qui suit le chemin fermé décrit successivement un lacet partant et aboutissant à A, puis un autre partant et aboutissant à B. On peut alors contracter le deuxième de ces lacets en un point (chemin nul), le point B. Dans ces conditions , le mobile , après avoir décrit le premier lacet non nul, reste ensuite immobile en B. Il revient au même de dire qu'il reste immobile en A ce qui permet de complètement ignorer le second lacet. Il est alors visible que le chemin qui reste est homotope à zéro.

De façon générale, on voit que l'on peut, par ce procédé, supprimer par paires les couples de points où le chemin perce la surface de la sphère, mais pas un couple isolé. Les chemins fermés ayant un nombre pair de ces couples sont donc homotopes à zéro, ceux en ayant un nombre impair homotopes au lacet de la figure V-4.

Il apparaît ici une propriété très importante de $R_{(3)}$ [ou $SO_{(3)}$] qui possède une structure topologique plus compliquée que celle d'un groupe simplement connexe. Comparons par exemple $R_{(3)}$ à $SU(2)$, groupe dont la dimension est également $n = 3$ [cf chapitre III § B-3] et dont les constantes de structure sont les mêmes que celles de $R_{(3)}$ [cf égalités (III-79) du chapitre III]. $R_{(3)}$ et $SU(2)$ sont donc localement isomorphes mais ne le sont pas globalement. On peut en fait définir un homomorphisme entre $SU(2)$ et $R_{(3)}$ [cf complément VI-A] ; cet homomorphisme fait correspondre à toute matrice de $SU(2)$, repérée par le paramètre \vec{a} comme au § B-3 du chapitre III, la rotation \mathcal{R} associée à la même valeur du paramètre si $|\vec{a}| < \pi$; sinon, on prend la valeur de \vec{a} définissant la matrice opposée de $SU(2)$ [relation (VIII-81)]. De cette façon, deux matrices opposées de $SU(2)$ [fig. III-11] correspondent

à la même rotation \mathcal{R} . Le fait que $SU(2)$ apparaît alors comme "deux fois plus grand" que $R_{(3)}$ se voit également si l'on compare les figures III-12 et V-3 (2).

Contrairement à $R_{(3)}$, le groupe $SU(2)$ est d'ailleurs simplement connexe comme nous l'avons vu au § B-3 du chapitre III. Le groupe $SU(2)$ est donc le "groupe de revêtement universel" de $R_{(3)}$ [cf note (9) du chapitre III].

La propriété générale de l'espace qui veut que le groupe des rotations est 2-connexe a d'importantes conséquences : c'est elle qui entraîne en mécanique quantique la possibilité d'existence de particules de spin demi-entier. Nous reviendrons sur ce point au chapitre VI.

3 - Déplacement quelconque

Un déplacement quelconque peut être obtenu par l'application successive d'une rotation de vecteur \vec{a} et d'une translation de vecteur $\vec{\ell}$, dans cet ordre (mais on pourrait avoir choisi l'ordre inverse). Les coordonnées xyz d'un point se transforment suivant :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{pmatrix} = \mathcal{D}(\vec{a}, \vec{\ell}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} \tag{V-39a}$$

où \mathcal{D} est une matrice 4×4 qui s'écrit en fonction des composantes a_x, a_y, a_z de

(2) Le centre de $SU(2)$ [sous-groupe invariant commutant avec tous les éléments de $SU(2)$] est constitué de la matrice identité 2×2 et de son opposée ; c'est un groupe à 2 éléments isomorphes à Z_2 . Le groupe des rotations est isomorphe au groupe quotient $SU(2) / Z_2$ [cf complément II-A].

\vec{a} et l_x, l_y, l_z de \vec{l} sous la forme :

$$D(\vec{a}, \vec{l}) = \left(\begin{array}{ccc|c} & & & l_x \\ & \mathcal{R}(\vec{a}) & & l_y \\ & & & l_z \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \quad (V-39b)$$

Dans cette expression $\mathcal{R}(\vec{a})$ est une des matrices 3×3 de rotations écrites au paragraphe 2 précédent. Les égalités (V-39) sont équivalentes à :

$$\vec{r}' = \mathcal{R}(\vec{a}) \vec{r} + \vec{l} \quad (V-40a)$$

ou, inversement :

$$\vec{r} = \mathcal{R}^{-1}(\vec{a}) [\vec{r}' - \vec{l}] \quad (V-40b)$$

Par dérivation de (V-39b), on obtient les matrices de l'algèbre de Lie. On trouve ainsi les trois matrices Π_x, Π_y, Π_z écrites en (V-9), auxquelles s'ajoutent 3 matrices obtenues en adjoignant une ligne et une colonne de zéro aux \mathcal{M} données en (V-33). Nous ne redonnons pas ici le calcul des relations de commutation entre ces 6 matrices, qui a en fait déjà été effectué au § C du chapitre V (dans le cas de matrices 5×5 , mais le résultat est le même). On retrouverait ainsi les relations (V-11) et (V-34).

Effectuons plutôt un calcul élémentaire d'analyse vectorielle, ce qui nous permettra en plus d'obtenir les relations de commutation entre opérateurs infinitésimaux de translation et de rotation. L'opération de déplacement infinitésimal la plus générale transforme \vec{r} en \vec{r}' donné par [cf (V-4) et (V-29)] :

$$\vec{r}' = 1 + (\delta\vec{a} \times \vec{r}) + \delta\vec{l} \quad (V-41)$$

Calculons au second ordre en $\delta\phi$ et $\delta\ell$ l'effet du commutateur :

$$\mathcal{R}_{\vec{u}}(\delta\phi) \mathcal{C}_{\vec{v}}(\delta\ell) \mathcal{R}_{\vec{u}}(-\delta\phi) \mathcal{C}_{\vec{v}}(-\delta\ell) \quad (V-42)$$

Il vient, par le même raisonnement qu'au paragraphe 2-c :

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \mathcal{C}_{\vec{v}}(-\delta\ell) \vec{r} = \vec{r} - \vec{v}\delta\ell \\ \vec{r}_2 &= \mathcal{R}_{\vec{u}}(-\delta\phi) \vec{r}_1 = \vec{r}_1 - \delta\phi \vec{u} \times \vec{r}_1 + \dots \\ &= \vec{r} - \vec{v}\delta\ell - \delta\phi \vec{u} \times [\vec{r} - \vec{v}\delta\ell] \\ \vec{r}_3 &= \mathcal{C}_{\vec{v}}(\delta\ell) \vec{r}_2 = \vec{r}_2 + \vec{v}\delta\ell \\ &= \vec{r} - \delta\phi \vec{u} \times \vec{r} + \delta\phi\delta\ell \vec{u} \times \vec{v} + \dots \\ \vec{r}' &= \mathcal{R}_{\vec{u}}(\delta\phi) \vec{r}_3 = \vec{r}_3 + \delta\phi \vec{u} \times \vec{r}_3 + \dots \\ &= \vec{r} + \delta\phi\delta\ell \vec{u} \times \vec{v} + \dots \end{aligned} \quad (V-43)$$

Donc, au second ordre en $\delta\phi$ et $\delta\ell$:

$$\mathcal{C}_{\vec{u}}(\delta\phi)\mathcal{C}_{\vec{v}}(\delta\ell)\mathcal{R}_{\vec{u}}(-\delta\phi)\mathcal{C}_{\vec{v}}(-\delta\ell) = \mathcal{C}_{\vec{u} \times \vec{v}}(\delta\phi\delta\ell) \quad (V-44)$$

relation qui nous montre que le commutateur infinitésimal est une translation de vecteur $\delta\phi\delta\ell(\vec{u} \times \vec{v})$.

Adoptons la correspondance suivante :

$$\begin{matrix} i & = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ & & J_x & J_y & J_z & P_x & P_y & P_z \end{matrix} \quad (V-45)$$

Alors, si l'on convient de choisir $i, j, k \leq 3$:

$$C_{ij}^k = \epsilon_{ijk} \quad C_{ij}^{k+3} = 0 \quad (V-46a)$$

[non-commutation des rotations entre elles]

$$\begin{cases} C_{i+3, j+3}^{k+3} = 0 \\ C_{i+3, j+3}^k = 0 \end{cases} \quad (V-46b)$$

[les translations commutent entre elles] et :

$$\begin{cases} C_{i, j+3}^k = 0 \\ C_{i, j+3}^{k+3} = \epsilon_{ijk} \end{cases} \quad (V-46c)$$

[non-commutation des translations et des rotations, écrite en (V-44)].

Ces égalités sont équivalentes aux relations (III-99a), (III-99b) et (III-99e) du chapitre III.

B - OPERATEURS ASSOCIES DANS L'ESPACE DES ETATS

Suivant le schéma du § D du chapitre IV, nous allons maintenant chercher l'image, dans l'espace des états & du système étudié, du groupe &₍₃₎ des déplacements.

1 - Générateurs infinitésimaux. Relations de commutation

Soit $|\psi\rangle$ le vecteur d'état du système initial, $|\psi'\rangle$ celui du système après un déplacement de paramètres \vec{a} et $\vec{\ell}$. L'opérateur unitaire T permet de passer de $|\psi\rangle$ à $|\psi'\rangle$:

$$|\psi'\rangle = T(\vec{a}, \vec{\ell}) |\psi\rangle \quad (V-47)$$

Lorsque \vec{a} et $\vec{\ell}$ sont infinitésimaux, on a :

$$\boxed{T(\delta\vec{a}, \delta\vec{\ell}) = 1 - \frac{i}{\hbar} (\delta\vec{a} \cdot \vec{J} + \delta\vec{\ell} \cdot \vec{P}) + \dots} \quad (V-48)$$

Cette égalité doit être considérée comme la définition des opérateurs \vec{J} (c'est-à-dire des 3 composantes J_x, J_y et J_z qui sont chacune un opérateur) et de \vec{P} (qui, de même, symbolise 3 opérateurs P_x, P_y, P_z). Si maintenant nous écrivons comme en (IV-60) et (IV-61) que $T^\dagger T = 1$ (T est unitaire), nous obtenons :

$$\begin{cases} P_{x_i} &= P_{x_i}^\dagger \\ J_{x_i} &= J_{x_i}^\dagger \end{cases} \quad \begin{matrix} x_i &= & x, y, z \\ & & " & " \end{matrix} \quad (V-49)$$

Les opérateurs \vec{P} et \vec{J} sont donc hermitiques. Le premier d'entre eux sera, par définition, l'impulsion totale du système physique étudié ; le second sera son moment cinétique total.

Il nous reste maintenant à appliquer le raisonnement général du § D-2 du chapitre IV pour trouver les relations de commutation entre composantes de \vec{P} et \vec{J} . Commençons par imposer que les T donnent une représentation (au sens strict) du groupe des déplacements ; nous verrons ensuite si l'hypothèse plus faible où la représentation n'est que projective change les résultats obtenus.

On a la correspondance suivante entre opérateurs, \vec{H} et \vec{M} agissant dans l'espace ordinaire $R^{(3)}$ et \vec{P} et \vec{J} agissant dans \mathfrak{E} :

$$\begin{aligned} \vec{H} &\Leftrightarrow -\frac{i}{\hbar} \vec{P} \\ \vec{M} &\Leftrightarrow -\frac{i}{\hbar} \vec{J} \end{aligned} \quad (V-50)$$

Si maintenant nous écrivons des relations du type (IV-70) avec les constantes C_{ij}^k données en (V-46), il vient :

$$\begin{cases} [P_{x_i}, P_{x_j}] &= 0 \\ [J_{x_i}, J_{x_j}] &= i\hbar \epsilon_{ijk} J_{x_k} \\ [J_{x_i}, P_{x_j}] &= i\hbar \epsilon_{ijk} P_{x_k} \end{cases} \quad (V-51a)$$

La première de ces relations est l'image de la relation (V-11), la seconde correspond à (V-34) ou, si l'on préfère (V-38). La troisième est conséquence de (V-44). Insistons ici une fois de plus sur le fait que l'origine profonde de (V-51a) est purement géométrique, et ne dépend en aucune façon du système physique étudié.

Examinons maintenant ce que deviennent les relations (V-51a) dans le cas des représentations projectives. L'égalité (IV-91) du chapitre IV

nous dit ce qui doit a priori être modifié ; il faut ajouter des termes au second membre de (V-49a) qui devient :

$$\begin{aligned}
 [P_{x_i}, P_{x_j}] &= i\hbar^2 \beta_{ij} \\
 [J_{x_i}, J_{x_j}] &= i\hbar \epsilon_{ijk} J_{x_k} + i\hbar^2 \beta'_{ij} \\
 [J_{x_i}, P_{x_j}] &= i\hbar \epsilon_{ijk} P_{x_k} + i\hbar^2 \beta''_{ij}
 \end{aligned}
 \tag{V-51b}$$

Nous allons voir qu'en fait tous les termes β du second membre peuvent être supprimés. Tout d'abord, une redéfinition des composantes de \vec{J} , de la forme :

$$\begin{aligned}
 J_x &\Rightarrow J_x - \hbar\beta'_{yz} \\
 J_y &\Rightarrow J_y - \hbar\beta'_{zx} \\
 J_z &\Rightarrow J_z - \hbar\beta'_{xy}
 \end{aligned}
 \tag{V-52}$$

nous permet d'éliminer les β' sans rien modifier des autres relations de commutation.

Nous avons vu en (IV-102) que les constantes β sont reliées aux constantes de structure. Ecrivons donc cette relation en choisissant :

$$\begin{aligned}
 i = 1 &\Leftrightarrow J_x \\
 j = 4 &\Leftrightarrow P_x \\
 k = 6 &\Leftrightarrow P_z
 \end{aligned}
 \tag{V-53}$$

Il vient alors :

$$\sum_{\ell = 1, 2, 3} \left\{ \begin{aligned}
 &\beta'_{\ell 1} C_{46}^{\ell} + \beta''_{\ell 1} C_{46}^{\ell+3} \\
 &- \beta''_{1\ell} C_{61}^{\ell} + \beta_{\ell 1} C_{61}^{\ell+3} \\
 &- \beta''_{3\ell} C_{14}^{\ell} + \beta_{\ell 3} C_{14}^{\ell+3} \end{aligned} \right\} = 0
 \tag{V-54}$$

Dans cette égalité, beaucoup de constantes de structure C sont nulles : C_{46}^{ℓ} et $C_{46}^{\ell+3}$ (les translations commutent entre elles), C_{14}^{ℓ} et $C_{14}^{\ell+3}$ (une rotation commute avec une translation le long du même axe), C_{61}^{ℓ} (le commutateur de translations et de rotations donne une translation, pas une rotation). D'autre part, la constante $C_{61}^{\ell+3}$ n'est non-nulle que si $\ell=2$ et vaut 1. Pour finir, il reste :

$$\beta_{21} = 0
 \tag{V-55}$$

ce qui indique que :

$$[P_y, P_x] = 0
 \tag{V-56a}$$

Par permutation circulaire des composantes x, y et z, on voit que tous les commutateurs entre composantes de \vec{P} sont nuls :

$$[\vec{P}, \vec{P}] = 0 \tag{V-56b}$$

Il ne nous reste plus maintenant à éliminer que les coefficients β'' . Comme pour les β , ce résultat peut être obtenu par une redéfinition des opérateurs $P^{(*)}$:

$$\begin{aligned} P_x &\Rightarrow P_x - \hbar \beta''_{yz} \\ P_y &\Rightarrow P_y - \hbar \beta''_{zx} \\ P_z &\Rightarrow P_z - \hbar \beta''_{xy} \end{aligned} \tag{V-57}$$

Pour finir, nous sommes simplement ramenés aux équations (V-51a) qui sont donc valables même si la représentation est projective (moyennant éventuellement une redéfinition des opérateurs \vec{P} et \vec{J}).

Remarque :

Pour éliminer les constantes β , il a fallu utiliser les propriétés du groupe $\mathfrak{E}(3)$ des déplacements dans son ensemble. Nous n'aurions pas pu arriver à ce résultat en considérant séparément le groupe $T(3)$ des translations ou $R(3)$ des rotations.

2 - Opérateurs de déplacement fini

a) Translations

Commençons par calculer l'opérateur $T(0, \vec{\ell})$ associé à une translation pure (sans rotation). Considérons pour commencer l'opérateur infinitésimal $T(0, \vec{\ell}\delta x)$ où $\delta x \rightarrow 0$. D'après (V-48) :

$$\begin{aligned} T(0, \vec{\ell}\delta x) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \delta x \vec{\ell} \cdot \vec{P} + \dots \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \delta x \ell P_u + \dots \end{aligned} \tag{V-58}$$

où :

$$P_u = \vec{u} \cdot \vec{P} \quad \vec{u} = \frac{\vec{\ell}}{|\vec{\ell}|} \tag{V-59}$$

est le vecteur unitaire porté par $\vec{\ell}$. Calculons ensuite l'opérateur $T(0, \vec{\ell}x)$ associé à une translation finie $\vec{\ell}x$. Cet opérateur doit satisfaire à l'équation :

$$T(0, \vec{\ell}(x + \delta x)) = e^{-i\xi(x, \delta x)} T(0, \vec{\ell}\delta x) T(0, \vec{\ell}x) \tag{V-60}$$

qui exprime qu'une translation de $\vec{\ell}(x + \delta x)$ est le produit d'une translation de $\vec{\ell}x$ par une autre de $\vec{\ell}\delta x$ [cette égalité est la relation (IV-22) dans un cas particulier]. Le facteur de phase $e^{i\xi(x, \delta x)}$ doit a priori être

(*) une démonstration plus détaillée de ce point est donnée dans le § 1-b du complément IV-B.

introduit car, si nous avons montré que par un choix convenable des opérateurs \vec{P} et \vec{J} son effet peut être éliminé des opérateurs infinitésimaux, il n'est pas évident que la même élimination soit possible pour les opérateurs finis.

Commençons cependant par supposer que $\vec{\xi}$ est nul et cherchons quel opérateur T nous obtenons dans ce cas. Les équations (V-58) et (V-60) donnent alors :

$$\begin{aligned} T(0, \vec{\ell}(x + \delta x)) - T(0, \vec{\ell}x) \\ = \left[-\frac{i}{\hbar} \delta x \ell P_u \right] T(0, \vec{\ell}x) \end{aligned} \quad (V-61)$$

ou encore :

$$\frac{d}{dx} T(0, \vec{\ell}x) = \frac{i}{\hbar} P_u T(0, \vec{\ell}x) \quad (V-62)$$

Cette équation différentielle du premier ordre doit être résolue, compte tenu de la condition initiale :

$$T(0, x=0) = \mathbb{1} \quad (V-63)$$

On a donc :

$$T(0, \vec{\ell}x) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \ell x P_u \right\} \quad (V-64)$$

[par dérivation de cette égalité, qui ne présente aucune difficulté puisqu'un seul opérateur (P_u) y apparaît, on obtient immédiatement (V-62)]. Si maintenant nous posons $x=1$, il vient :

$$\boxed{T(0, \vec{\ell}) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{\ell} \cdot P \right\}} \quad (V-65)$$

Cette expression sera prise comme définition des opérateurs de translation.

Les opérateurs T donnent une représentation du groupe des translations où tous les facteurs de phase ont été éliminés. En effet, toutes les composantes de P commutent entre elles, on voit sur (V-65) que :

$$T(0, \vec{\ell}') T(0, \vec{\ell}) = T(0, \vec{\ell}' + \vec{\ell}) \quad (V-66)$$

(l'opérateur produit correspond bien au produit des translations). Nous verrons que la situation n'est pas toujours aussi simple dans le cas du groupe des rotations.

Remarque : Si nous avons gardé dans (V-60) les facteurs de phase ξ , nous aurions obtenu pour représenter les translations des opérateurs K différant des T, mais physiquement équivalents. En effet, on a :

$$\xi(x, \delta x = 0) \equiv 0 \quad \forall x \quad (V-67)$$

de sorte que, au premier ordre en δx :

$$e^{-i \xi(x, \delta x)} = 1 - i \delta x \zeta(x) + \dots \quad (V-68)$$

où $\zeta(x)$ est la dérivée de $\xi(x, \delta x)$ par rapport à δx , prise en $\delta x = 0$ (comme nous l'avons toujours fait jusqu'ici, nous supposons la continuité de toutes les fonctions et opérateurs, ainsi que celle de leurs dérivées).

On voit alors facilement que (V-62) doit être remplacé par :
d'après (V-60)

$$\frac{d}{dx} T(0, lx) = \left[-\frac{i}{\hbar} l P_u - i \zeta(x) \right] T(0, lx) \quad (V-69)$$

Soit $K(x)$ la solution de cette équation satisfaisant à :

$$K(x \geq 0) = \mathbf{1} \quad (V-70)$$

On voit aisément que :

$$K(x) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} lx P_u - i \theta(x) \right\} \quad (V-71-a)$$

où :

$$\theta(x) = \int_0^x dx' \zeta(x') \quad (V-71-b)$$

Les opérateurs $K(x)$ ne sont donc autres que les $T(0, lx)$, multipliés par un facteur de phase $e^{i \theta(x)}$ sans conséquence physique.

b) Rotations

Nous allons faire pour les rotations un raisonnement du même type que pour les translations. Une rotation infinitésimale de vecteur $\vec{a} \delta x$ correspond d'après (V-48) à l'opérateur :

$$\begin{aligned}
 T(\vec{a}\delta x, 0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \delta x \vec{a} \cdot \vec{J} + \dots \\
 &= 1 - \frac{i}{\hbar} \delta x a J_u + \dots
 \end{aligned}
 \tag{V-72}$$

où :

$$\vec{u} = \frac{\vec{a}}{|\vec{a}|} \qquad J_u = \vec{u} \cdot \vec{J}
 \tag{V-73}$$

Toutes les équations (V-58) à (V-69) peuvent alors être réécrites en remplaçant $T(0, \vec{x})$ par $T(\vec{a}x, 0)$ et P_u par J_u . Il vient ainsi :

$$\boxed{T(\vec{a}, 0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{J} \right\}}
 \tag{V-74}$$

expression que nous conviendrons d'adopter pour celle d'un opérateur de rotation.

Une différence importante avec les translations apparaît cependant à ce stade : les composantes de \vec{J} ne commutent pas entre elles et il n'est pas possible a priori d'écrire une relation du type (V-66). Nous ne pouvons donc pas affirmer que nous aurons toujours une représentation au sens strict du groupe des rotations dans l'espace des états. Dans la suite, nous verrons que, suivant la structure de l'espace des états & du système étudié, la représentation est, soit une vraie représentation, soit une représentation projective telle que (*)

$$T(\mathcal{R}_2) T(\mathcal{R}_1) = \pm T(\mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1)
 \tag{V-75}$$

Nous verrons également le lien qui existe entre les représentations bivaluées et la structure 2-connexe du groupe des rotations.

c) Déplacement quelconque

Pour un déplacement repéré comme en (V-39) ou (V-45) par les paramètres \vec{a} et \vec{x} l'opérateur T associé agissant dans l'espace des états & sera par définition :

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 T(\vec{a}, \vec{x}) &= T(\vec{0}, \vec{x}) T(\vec{a}, \vec{0}) \\
 &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot \vec{P} \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{J} \right\}
 \end{aligned}
 }
 \tag{V-76}$$

Comme dans le cas des rotations, il n'est pas évident a priori que la représentation du groupe des déplacements $\mathcal{E}(3)$ ainsi obtenue dans l'espace des états soit vraie (non-projective), et ce n'est effectivement pas toujours le cas.

(*)

Cette relation peut-être établie à partir des résultats du complément IV-C (le groupe des rotations étant 2-connexe).

3 - Ensemble de deux sous-systèmes

Considérons maintenant un système physique obtenu par la réunion de deux, ou d'un nombre plus élevé, de sous-systèmes. Il peut s'agir par exemple d'un système constitué de plusieurs particules, de particules et de champs, etc.. Raisonnons pour simplifier dans le cas où le nombre de sous-systèmes est deux. L'espace des états \mathcal{E} du système physique global est le produit tensoriel :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \quad (V-77)$$

des espaces des états \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 associés respectivement aux sous-systèmes (1) et (2).

Dans chacun de ces espaces, on peut définir des opérateurs impulsion \vec{P}_1 et \vec{P}_2 ainsi que des opérateurs de moment cinétique \vec{J}_1 et \vec{J}_2 . De même, dans \mathcal{E}_1 comme dans \mathcal{E}_2 , nous pouvons introduire des opérateurs T de déplacement. Par exemple, pour une translation de vecteur $\vec{\lambda}$:

$$\begin{aligned} T_1(\vec{0}, \vec{\lambda}) &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{\lambda} \cdot \vec{P}_1 \right\} \\ T_2(\vec{0}, \vec{\lambda}) &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{\lambda} \cdot \vec{P}_2 \right\} \end{aligned} \quad (V-78)$$

On sait qu'à tout opérateur A_1 agissant dans \mathcal{E}_1 , on peut associer un opérateur (opérateur "prolongé") agissant dans $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. Par définition, on pose, si $|\phi_1\rangle$ est un ket de \mathcal{E}_1 et $|\phi_2\rangle$ un ket de \mathcal{E}_2 :

$$A_1(|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle) = (A_1|\phi_1\rangle) \otimes |\phi_2\rangle \quad (V-79)$$

Bien sûr, il en est de même pour un opérateur agissant initialement dans \mathcal{E}_2 . On vérifie facilement que tout opérateur affecté d'un indice 1 commute avec tout opérateur ayant un indice 2. Par exemple :

$$\begin{aligned} [\vec{J}_1, \vec{J}_2] &= 0 \\ [J_1, \vec{P}_2] &= 0 \\ [T_1, T_2] &= 0 \quad \text{etc...} \end{aligned} \quad (V-80)$$

Considérons un état du système total de la forme :

$$|\psi\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \quad (V-81)$$

Il est clair que, pour effectuer une translation sur ce système, il faut effectuer une translation de chacune des deux particules. L'état $|\psi'\rangle$ ainsi obtenu est :

$$|\psi'\rangle = |\phi'_1\rangle \otimes |\phi'_2\rangle \quad (V-82)$$

avec :

$$\begin{aligned} |\phi'_1\rangle &= T_1(\vec{0}, \vec{x}) |\phi_1\rangle \\ |\phi'_2\rangle &= T_2(\vec{0}, \vec{x}) |\phi_2\rangle \end{aligned} \quad (V-83)$$

Par suite, $|\psi'\rangle$ s'obtient à partir de $|\psi\rangle$ par la relation :

$$|\psi'\rangle = T_1(\vec{0}, \vec{x}) T_2(\vec{0}, \vec{x}) |\psi\rangle \quad (V-84)$$

Si maintenant $|\psi\rangle$ est un ket quelconque de \mathcal{E} (pas nécessairement un produit tensoriel), il peut être décomposé linéairement en une somme de produits tensoriels de la forme $|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle$, et on voit facilement que la formule (V-84) reste encore valable. Ceci nous montre donc que les opérateurs de translation (ou plus généralement, de déplacement) sont simplement obtenus par produits des opérateurs traduisant le même déplacement dans chacun des espaces des états individuels \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 . La généralisation à un nombre plus grand de sous-systèmes est évidente.

De cette propriété découle que l'impulsion totale \vec{P} du système et son moment cinétique total \vec{J} sont simplement les sommes :

$$\boxed{\begin{cases} \vec{P} &= \vec{P}_1 + \vec{P}_2 \\ \vec{J} &= \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \end{cases}} \quad (V-85)$$

Considérons en effet une translation de vecteur infinitésimal $d\vec{x}$. On a :

$$\begin{aligned} T(\vec{0}, d\vec{x}) &= T_1(\vec{0}, d\vec{x}) T_2(\vec{0}, d\vec{x}) \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} d\vec{x} \cdot \vec{P}_1 + \dots\right] \left[1 - \frac{i}{\hbar} d\vec{x} \cdot \vec{P}_2 + \dots\right] \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} d\vec{x} \cdot (\vec{P}_1 + \vec{P}_2) + \dots \end{aligned} \quad (V-86)$$

La première des égalités (V-85) découle donc simplement de la définition de l'impulsion totale du système (opérateur hermitique engendrant les translations infinitésimales). Pour les rotations, le raisonnement est identique à celui des translations. Les égalités (V-85) sont donc démontrées et nous voyons que l'impulsion totale et le moment cinétique total du système sont simplement obtenus par addition des impulsions et moments cinétiques des sous-systèmes.

D'autre part, les relations de commutation entre composantes de \vec{P} ou de \vec{J} sont les mêmes pour le système total que pour chacun des sous-systèmes ; ceci découle immédiatement de (V-80) et (V-85).

Remarques :

(i) Les égalités (V-85) restent valables dans tous les cas, que les sous-systèmes interagissent ou non.

(ii) Les espaces \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 peuvent être relatifs à des variables différentes d'un même système (variables orbitales et de spin d'une même particule par exemple).

(iii) Si le système (1) est une particule, (2) un champ, les structures des espaces des états \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 sont très différentes. Un champ a un nombre infini de degrés de liberté et un espace des états est "bien plus grand" que celui d'une particule unique. Les égalités (V-85) sont cependant toujours valides dans ce cas.

4 - Invariance par translation ou rotation

Dans une translation de vecteur $\vec{\ell}$, une observable B devient (cf. chap. IV, § C) :

$$\begin{aligned} B' &= T(0, \vec{\ell}) B T^\dagger(0, \vec{\ell}) \\ &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{\ell} \cdot \vec{P} \right\} B \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \vec{\ell} \cdot \vec{P} \right\} \end{aligned} \quad (V-87)$$

et dans une rotation de vecteur \vec{a} :

$$\begin{aligned} B'' &= T(\vec{a}, \vec{0}) B T^\dagger(\vec{a}, \vec{0}) \\ &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{J} \right\} B \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{J} \right\} \end{aligned} \quad (V-88)$$

Une observable B est dite invariante par translation si $B' = B$, invariante par rotation si $B'' = B$.

L'égalité $B' = B$ est équivalente à :

$$[B, T(0, \vec{\ell})] = 0 \quad (V-89)$$

ou encore :

$$[B, \vec{P}] = 0 \quad (V-90)$$

Cette dernière égalité peut donc être prise comme définition : une observable invariante par translation est une observable qui commute avec l'impulsion totale \vec{P} du système.

Exemple :

Dans le chapitre I, nous avons vu que, pour un système d'hamiltonien H indépendant du temps (système conservatif), les opérations de translation sont transformation de symétrie du mouvement, à condition que :

$$[H, T(\vec{0}, \vec{\ell})] = 0 \quad \forall \vec{\ell} \quad (V-91)$$

c'est-à-dire :

$$[H, \vec{P}] = 0 \quad (V-92)$$

L'hamiltonien est donc invariant par translation.
 Cela revient donc à dire que l'impulsion \vec{P} est constante du mouvement.

Remarque : Pour un système composé de plusieurs sous-systèmes interagissant, il faut bien distinguer les relations de commutation avec les impulsions individuelles $\vec{P}_1, \vec{P}_2, \dots$ des sous-systèmes et celles avec l'impulsion totale :

$$\vec{P} = \sum_i \vec{P}_i \quad (V-93)$$

Si le système global est libre (pas de potentiel extérieur), alors son hamiltonien H commute nécessairement avec \vec{P} :

$$[H, \vec{P}] = 0 \quad (V-94)$$

mais les commutateurs $[H, P_i]$ ne sont pas nécessairement nuls (bien que leur somme le soit).

Tout ce qui précède se transpose immédiatement, et sans changement autre que de remplacer \vec{P} par \vec{J} , à l'invariance par rotation. L'observable B est invariante par rotation si :

$$[B, \vec{J}] = 0 \quad (V-95)$$

Pour un système d'hamiltonien H indépendant du temps, une rotation quelconque autour d'un point donné 0 est une opération de symétrie si le moment cinétique \vec{J} autour de ce point est une constante du mouvement :

$$[H, \vec{J}] = 0 \quad (V-96)$$

Exemple :

Considérons une particule (ou un système physique) libre dans l'espace. Le moment cinétique \vec{J} de ce système par rapport à un point quelconque est une constante du mouvement.

C - CONSTRUCTION D'UN ESPACE DES ETATS PARTICULIEREMENT SIMPLE

Nous allons maintenant appliquer les résultats généraux obtenus dans les deux paragraphes précédents à un cas particulier. A ce stade, il devient utile de préciser la structure de l'espace des états \mathcal{E} de façon à donner explicitement l'action des opérateurs \vec{P} et \vec{J} dans cet espace. Nous allons chercher à obtenir un espace \mathcal{E} dont la structure soit la plus simple possible et nous verrons que le système physique correspondant est une particule unique sans spin.

1 - Opérateur position

Nous allons donc construire un espace des états \mathcal{E} où l'on puisse définir l'action d'opérateurs \vec{P} et \vec{J} satisfaisant aux relations de commutation fondamentales (V-51a). Pour pouvoir parler comme nous l'avons fait de déplacement du système physique, nous nous attendons à ce qu'on puisse définir un opérateur position \vec{R} du système (c'est-à-dire 3 opérateurs hermitiques X , Y et Z). Pour construire l'espace des états \mathcal{E} "minimum", nous admettons que X , Y et Z forment un E.C.O.C. (Ensemble Complet d'Observables qui Commutent), c'est-à-dire qu'il existe une base orthonormée de dont chaque vecteur est ket propre commun à X , Y et Z et peut être spécifié (à une phase près) par la donnée des valeurs propres correspondantes x , y et z . On comprend en effet que si X , Y et Z ne formaient pas un E.C.O.C., il faudrait adjoindre des nombres quantiques supplémentaires à x , y , z pour définir une base de \mathcal{E} et que cet espace deviendrait par là-même "plus grand". Nous nous en tiendrons donc dans ce paragraphe à cette "hypothèse minimum", et nous appellerons le système physique correspondant une particule sans spin.

A tout état $|\psi\rangle$ de la particule correspond la fonction d'onde :

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \quad (V-97)$$

où \vec{r} est une rotation condensée pour les 3 nombres x , y et z :

$$|\vec{r}\rangle = |x, y, z\rangle \quad (V-98)$$

Il revient au même de se donner $|\psi\rangle$ appartenant à \mathcal{E} où une fonction d'onde complexe $\psi(\vec{r})$ de carré sommable. Le problème est alors de donner l'effet sur $\psi(\vec{r})$ d'un opérateur T .

L'action de T sur un ket propre $|\vec{r}\rangle$ est en fait très simple : si le système physique est localisé par rapport au référentiel $Oxyz$ au point

\vec{r}' , dans le référentiel $O'x'y'z'$ obtenu par translation de $-\vec{\ell}$ à partir de $Oxyz$ [cf figure IV-1] il est nécessairement localisé en $\vec{r} + \vec{\ell}$. De même dans une rotation ou un déplacement quelconque obtenu par action successive de $\mathcal{R}(\vec{a})$ et $\mathcal{C}(\vec{\ell})$, le système est nécessairement localisé en :

$$\vec{r}' = \mathcal{R}(\vec{a}) \vec{r} + \vec{\ell} \quad (V-99a)$$

Rappelons que cette égalité est une façon condensée d'écrire la relation entre composantes x'_i de \vec{r}' et x_j de \vec{r} :

$$x'_i = \sum_j \mathcal{R}(\vec{a})_{ij} x_j + \ell_{x_i} \quad x_i, x_j = x, y \text{ ou } z \quad (V-99b)$$

Par suite, on doit avoir :

$$T(\vec{a}, \vec{\ell}) |\vec{r}\rangle = e^{i\alpha} |\vec{r}'\rangle \quad (V-100)$$

où $e^{i\alpha}$ est un facteur de phase. Si l'on applique aux deux membres de cette égalité l'un quelconque des trois opérateurs X, Y, Z , on voit que :

$$\begin{aligned} \vec{R} T(\vec{a}, \vec{\ell}) |\vec{r}\rangle &= e^{i\alpha} \vec{R} |\vec{r}'\rangle \\ &= \vec{r}' e^{i\alpha} |\vec{r}'\rangle \\ &= \vec{r}' T(\vec{a}, \vec{\ell}) |\vec{r}\rangle \end{aligned} \quad (V-101)$$

Multiplions cette égalité par $T^\dagger(\vec{a}, \vec{\ell})$, il vient :

$$T^\dagger(\vec{a}, \vec{\ell}) \vec{R} T(\vec{a}, \vec{\ell}) |\vec{r}\rangle = \vec{r}' |\vec{r}\rangle \quad (V-102)$$

Considérons alors l'opérateur vectoriel :

$$\tilde{\vec{R}} = \mathcal{R}(\vec{a}) \vec{R} + \vec{\ell} \quad (V-103-a)$$

dont, par définition, les composantes \tilde{R}_i s'expriment en fonction de celles X_i de \vec{R} par la même relation que (V-79b) (nous verrons dans la remarque qui suit pourquoi $\tilde{\vec{R}}$ ne doit pas être noté \vec{R}') :

$$\tilde{R}_i = \sum_j (\mathcal{R}(\vec{a}))_{ij} X_j + \ell_i \quad (V-103-b)$$

Il est clair que :

$$\tilde{R}_i |\vec{r}\rangle = \left\{ \sum_j (\mathcal{R}(\vec{a}))_{ij} x_j + \ell_i \right\} |\vec{r}\rangle \quad (V-104-a)$$

c'est-à-dire :

$$\tilde{\vec{R}} |\vec{r}\rangle = \vec{r}' |\vec{r}\rangle \quad (V-104-b)$$

Si nous reportons cette égalité au second membre de (V-102), et tenons compte du fait que les $\{|\vec{r}\rangle\}$ forment une base, nous pouvons écrire :

$$T^\dagger(\vec{a}, \vec{\ell}) \vec{R} T(\vec{a}, \vec{\ell}) = \tilde{\vec{R}} \quad (V-105-a)$$

ou encore :

$$\boxed{T^\dagger(\vec{a}, \vec{\ell}) \vec{R} T(\vec{a}, \vec{\ell}) = \mathcal{R}(\vec{a}) \vec{R} + \vec{\ell}} \quad (V-105-b)$$

Cette relation nous sera utile par la suite.

Remarque :

L'opérateur \vec{R}' , transformé de \vec{R} dans le déplacement considéré, s'écrit [chap. IV § C] :

$$\vec{R}' = T(\vec{a}, \vec{\ell}) \vec{R} T^\dagger(\vec{a}, \vec{\ell}) \quad (V-106)$$

Multiplions (V-85b) à droite par T^\dagger , à gauche par T . Il vient :

$$\begin{aligned} \vec{R} &= \mathcal{R}(\vec{a}) [T^\dagger(\vec{a}, \vec{\ell}) \vec{R} T(\vec{a}, \vec{\ell})] + \vec{\ell} \\ &= \mathcal{R}(\vec{a}) \vec{R}' + \vec{\ell} \end{aligned} \quad (V-107-a)$$

Inversement, on obtient :

$$\vec{R}' = \mathcal{R}^{-1}(\vec{a}) [\vec{R} - \vec{\ell}] \quad (V-107-b)$$

Ces résultats correspondent bien à ce que l'on attend du résultat de l'opérateur de déplacement sur l'observable \vec{R} . Par exemple, si l'on translate d'une quantité $+\vec{\ell}$ cette observable (c'est-à-dire les appareils de mesure correspondants), on obtient une nouvelle observable qui est $\vec{R} - \vec{\ell}$ (position par rapport à un référentiel qui a subi la translation $+\vec{\ell}$). Ce sont donc effectivement des opérations inverses qui permettent de passer de \vec{r} à \vec{r}' et de \vec{R} à \vec{R}' [cf (V-99 et (V-107)].

Quant à l'opérateur \vec{R} introduit plus haut, il donne simplement l'opérateur \vec{R} après un déplacement inverse de celui associé à $T(\vec{a}, \vec{\ell})$.

2. - Relations de commutation

De l'égalité (V-105) [ou de (V-107)] découlent les relations de commutation entre \vec{R} et \vec{P} d'une part, \vec{R} et \vec{J} de l'autre.

Considérons par exemple le cas où le déplacement est une translation infinitésimale :

$$T(0, d\vec{\ell}) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\vec{\ell} \cdot \vec{P} + \dots \quad (V-108)$$

Alors, au premier ordre en $d\ell$, (V-105) s'écrit :

$$\vec{R} + \frac{i}{\hbar} [d\vec{\ell} \cdot \vec{P}, \vec{R}] = \vec{R} + d\vec{\ell} \quad (V-109)$$

Donc :

$$[\vec{R}, d\vec{\ell} \cdot \vec{P}] = i\hbar d\vec{\ell} \quad (V-110)$$

Prenons $d\vec{\ell} = \vec{\ell}_x d\ell$ (où $\vec{\ell}_x$ est le vecteur unitaire de Ox). Il vient :

$$[\vec{R}, P_x] = i\hbar \vec{\ell}_x \tag{V-111a}$$

c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} [X, P_x] &= i\hbar \\ [Y, P_x] &= 0 \\ [Z, P_x] &= 0 \end{aligned} \tag{V-111b}$$

Par permutation circulaire de x, y et z , on obtient la relation générale :

$$\boxed{[X_i, P_{x_j}] = i\hbar \delta_{ij}} \tag{V-112}$$

qui sont les relations fondamentales de commutation de la position et de l'impulsion d'une particule en mécanique quantique. Ici, au lieu de les introduire à partir de règles de quantification, nous les avons obtenues de façon "géométrique".

Appliquons le même raisonnement à une rotation infinitésimale. Il faut alors remplacer (V-108) par :

$$T(d\vec{a}, 0) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\vec{a} \cdot \vec{J} + \dots \tag{V-113}$$

et (V-109) par [cf (V-30)] :

$$\vec{R} + \frac{i}{\hbar} [d\vec{a} \cdot \vec{J}, \vec{R}] = \vec{R} + d\vec{a} \times \vec{R} \tag{V-114}$$

L'équivalent de (V-110) est alors :

$$[\vec{R}, d\vec{a} \cdot \vec{J}] = i\hbar d\vec{a} \times \vec{R} \tag{V-115}$$

c'est-à-dire si $\vec{a} = \vec{u}d\phi$, et si \vec{v} est un vecteur quelconque :

$$[\vec{v} \cdot \vec{R}, \vec{u} \cdot \vec{J}] = i\hbar \vec{v} \cdot (\vec{u} \times \vec{R}) \tag{V-116}$$

Si l'on choisit pour \vec{u} et \vec{v} successivement les vecteurs unitaires des trois axes Ox, Oy, Oz , on obtient :

$$[R_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} R_{x_k} \tag{V-117}$$

On constate par comparaison avec (V-51a) que \vec{R} et \vec{P} ont avec \vec{J} les mêmes relations de commutation : \vec{R} et \vec{P} sont deux opérateurs vectoriels [cf chapitre VII].

3 - Action de \vec{P} et \vec{J} en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$

a) Translations

..... Nous pouvons définir la phase relative des vecteurs de la base $\{|\vec{r}\rangle\}$ par [cf (V-100)] :

$$|\vec{r}\rangle = T(\vec{0}, \vec{x} = \vec{r}) |\vec{r} = \vec{0}\rangle \quad (V-118)$$

Alors, d'après (V-66) :

$$\begin{aligned} |\vec{r}\rangle &= T(\vec{0}, \vec{x} = \vec{r}) |\vec{r} = 0\rangle \\ &= T(\vec{0}, \vec{x} = \vec{r}) T^\dagger(\vec{0}, \vec{x} = \vec{r}') |\vec{r}'\rangle \\ &= T(\vec{0}, \vec{x} = \vec{r} - \vec{r}') |\vec{r}'\rangle \end{aligned} \quad (V-119)$$

de sorte que la valeur $\vec{r} = 0$ ne joue aucun rôle privilégié dans la définition des kets $|\vec{r}\rangle$. Pour les opérateurs de translation, nous pouvons ainsi complètement supprimer les facteurs de phase $e^{i\alpha}$ de (V-100) Alors, si :

$$|\psi'\rangle = T(0, \vec{x}) |\psi\rangle \quad (V-120)$$

la fonction d'onde $\psi'(\vec{r})$ associée au ket $|\psi'\rangle$ est donnée par :

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | \psi' \rangle = \langle \vec{r} | T(\vec{0}, \vec{x}) | \psi \rangle \\ &= \langle \vec{r} - \vec{x} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (V-121)$$

où :

$$\begin{aligned} |\vec{r}\rangle &= T^\dagger(\vec{0}, \vec{x}) |\vec{r}\rangle \\ &= T(\vec{0}, -\vec{x}) |\vec{r}\rangle \\ &= |\vec{r} - \vec{x}\rangle \end{aligned} \quad (V-122)$$

On a donc tout simplement :

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{x}) \quad (V-123)$$

la fonction d'onde subit la même translation que la particule.

Remarque :

Il ne faut pas s'étonner de trouver $-\vec{x}$ dans (V-123) pour une translation de $+\vec{x}$. A une dimension par exemple, on voit bien qu'une fonction réelle $f(x)$ devient $f(x - x_0)$ par translation de $+x_0$ [cf figure V-6].

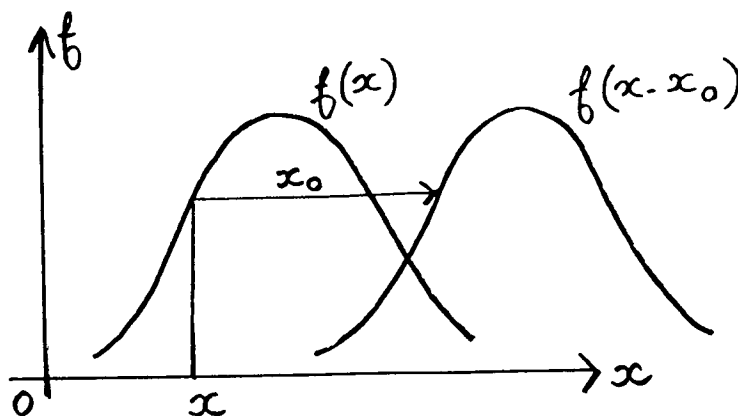


Fig. V-6

Si maintenant $d\vec{\ell}$ est infinitésimal, (V-100) devient, après multiplication par le bra $\langle \vec{r} |$:

$$\psi'(\vec{r}) = \langle \vec{r} | (1 - \frac{i}{\hbar} d\vec{\ell} \cdot \vec{P}) | \psi \rangle \quad (V-124)$$

c'est-à-dire : puisque $\psi(r) = \psi(r-d)$:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | d\vec{\ell} \cdot \vec{P} | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} [\psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r} - d\vec{\ell})] + \dots \\ &= \frac{\hbar}{i} d\vec{\ell} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) + \dots \end{aligned} \quad (V-125)$$

Donc :

$$\langle \vec{r} | \vec{P} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) \quad (V-126)$$

et l'action de \vec{P} en représentation \vec{r} est donnée par :

$$\boxed{\vec{P} \Leftrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}} \quad (V-127a)$$

Il est bien connu d'autre part que les opérations de dérivation par rapport à x, y ou z commutent entre elles. La première des relations de commutation (V-51a) est donc effectivement vérifiée. Comme d'autre part :

$$\vec{R} \Leftrightarrow \vec{r} \quad (V-127b)$$

on vérifie immédiatement en utilisant (V-127a) que les relations de commutation (V-112) entre \vec{R} et \vec{P} sont bien vérifiées.

On peut introduire la base $\{|\vec{p}\rangle\}$ des kets propres communs aux 3 composantes P_x, P_y, P_z de \vec{P} , qui commutent entre elles (les valeurs propres correspondantes étant les composantes du vecteur \vec{p}). Nous allons vérifier immédiatement que ces trois opérateurs forment un E.C.O.C., ce qui justifie la rotation utilisée pour les kets $|\vec{p}\rangle$ (pas d'indice supplémentaire). En effet, la fonction d'onde $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = f(\vec{r})$ devra, d'après (V-127a), satisfaire :

$$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} f(\vec{r}) = \vec{p} f(\vec{r}) \quad (V-128a)$$

ce qui nous donne :

$$f(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \propto e^{i\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar} \quad (V-128b)$$

On a bien une solution unique à un facteur multiplicatif près. Ce dernier est choisi de façon à orthonormer (au sens large, puisque \vec{p} est une valeur propre continue) la base, et on pose :

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar} \quad (V-129)$$

[voir par exemple référence ⁽¹³⁾, chapitre II § A-3-a et § E].

b) Rotations
.....

Examinons maintenant l'action des opérateurs de rotation et celle des composantes de \vec{J} . Pour les translations, nous avons éliminé dans (V-100) les facteurs de phase $e^{i\alpha}$ par un choix convenable des phases relatives des kets $|\vec{r}\rangle$. Il n'est pas évident a priori que cette élimination soit également valable pour les rotations. Dans un premier temps, nous l'admettons pour simplifier ; nous démontrerons ensuite que les résultats demeurent inchangés si l'on tient compte de l'existence possible de ces facteurs de phase.

En l'absence de facteurs de phase, on a :

$$T(\vec{a}, \vec{0}) |\vec{r}\rangle = |\mathcal{R}(\vec{a}) \vec{r}\rangle \quad (V-130)$$

et un raisonnement identique à celui qui nous a conduit à (V-123) montre ici que, si :

$$\psi'(\vec{r}) = \langle \vec{r} | T(\vec{a}, \vec{0}) | \psi \rangle \quad (V-131a)$$

la fonction d'onde $\psi'(\vec{r})$ est donnée par :

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\mathcal{R}^{-1}(\vec{a})\vec{r}) \quad (V-131b)$$

le fait que la rotation \mathcal{R} implique une opération inverse sur la variable \vec{r} s'explique comme dans le cas des translations.

Pour une rotation infinitésimale, l'analogie de (V-125) est ici :

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | d\vec{a} \cdot \vec{J} | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} [\psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r} - d\vec{a} \times \vec{r})] + \dots \\ &= \frac{\hbar}{i} (d\vec{a} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \psi + \dots \\ &= \frac{\hbar}{i} d\vec{a} \cdot (\vec{r} \times \vec{\nabla} \psi) + \dots \end{aligned} \quad (V-132)$$

Donc :

$$\langle \vec{r} | \vec{J} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla} \psi \quad (V-133)$$

de sorte que l'action de \vec{J} en représentation \vec{r} est donnée par :

$$\vec{J} \rightsquigarrow \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla} \quad (V-134)$$

Nous sommes ainsi conduits à poser, compte tenu de (V-102) :

$$\vec{J} = \vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} \quad (V-135)$$

et nous retrouvons ainsi l'expression bien connue du moment cinétique orbital d'une particule. Sous cette forme, et compte tenu des relations de commutation de \vec{R} et \vec{P} déjà obtenues, on vérifie aisément que toutes les relations de commutation (V-51a) sont satisfaites. Par exemple :

$$[J_x, P_x] = [Y P_z - Z P_y, P_x] = 0 \quad (V-136a)$$

(d'après les relations de commutation entre \vec{R} et \vec{P} qui ont déjà été vérifiées) et :

$$\begin{aligned} [J_x, P_y] &= [Y P_z - Z P_y, P_y] \\ &= [Y, P_y] P_z = i\hbar P_z \end{aligned} \quad (V-136b)$$

relations qui correspondent bien à la deuxième égalité (V-51a).

On peut remarquer que les résultats quantiques obtenus ici rappellent de très près les résultats classiques du chapitre I § 3-b, où les crochets de Poisson jouaient le rôle des commutateurs rencontrés ici.

Si maintenant nous tenons compte de l'existence éventuelle de facteurs de phase $e^{i\alpha}$ dans (V-100), nous allons remplacer (V-131) par :

$$\psi(\vec{r}) = e^{-i\alpha(\vec{a}; \vec{r})} \psi(\mathcal{R}^{-1}(\vec{a})\vec{r}) \quad (V-137)$$

où le facteur de phase $\alpha(\vec{a}; \vec{r})$ est identiquement nul si $\vec{a} = 0$. Lorsque \vec{a} est infinitésimal, il faut alors ajouter au second membre de (V-132) l'expression :

$$\frac{\hbar}{i} [i \vec{d}\vec{a} \cdot \vec{\chi}(\vec{r})]$$

où $\vec{\chi}(\vec{r})$ est le gradient par rapport à \vec{a} de α , pris en $\vec{a} = 0$. La correspondance (V-134) est alors modifiée, l'action de \vec{J} en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ s'écrivant :

$$\frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla} + \vec{\chi}(\vec{r})$$

et le deuxième membre de (V-135) devenant :

$$\vec{R} \times \vec{P} + \vec{\chi}(\vec{R})$$

On peut alors voir ⁽³⁾ que les relations (V-51a) ne sont plus satisfaites.

⁽³⁾ Calculons en effet les relations de commutation de l'opérateur $\vec{J}'' = \vec{R} \times \vec{P} + \vec{\chi}(\vec{R}) = \vec{J} + \vec{\chi}(\vec{R})$ avec les trois composantes de \vec{P} . Un calcul semblable à celui de (V-116a) donne maintenant :

$$[J''_x, P_x] = [J_x, P_x] + [\chi_x(\vec{R}), P_x] = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \chi_x(\vec{R})$$

De même, (V-136b) devient :

$$[J''_x, P_y] = i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \chi_x(\vec{R}) + i\hbar P_z$$

et de même pour $[J''_x, P_z]$. Si nous voulons préserver la troisième des relations de commutation (V-51a), χ_x est nécessairement une constante indépendante de x, y et z (par symétrie, la même conclusion est valable pour les 3 composantes de $\vec{\chi}$, qui sont donc des constantes). Mais alors, on aurait par exemple :

$$[J''_x, J''_y] = i\hbar J''_z - \chi_z$$

et, pour préserver la deuxième des relations de commutation (V-51a), nous ne pouvons que faire $\chi \equiv 0$.

Or nous avons déjà montré qu'elles peuvent toujours l'être, moyennant éventuellement une redéfinition des opérateurs infinitésimaux (qui revient d'ailleurs à supprimer χ des expressions précédentes). Nous considérerons donc comme valables toutes les égalités écrites de (V-119) à (V-135).

Dans le cas simple où nous nous sommes placés, nous avons donc obtenu des représentations au sens strict du groupe des rotations et de celui des translations. Ce résultat est directement évident sur (V-131) et (V-123) puisqu'il suffit d'effectuer sur la variable \vec{r} de la fonction d'onde l'opération géométrique inverse de celle que subit le système physique. Par exemple :

$$\psi''(\vec{r}) = \psi'(\mathcal{R}^{-1}(\vec{b})\vec{r}) \quad (V-138)$$

alors :

$$\begin{aligned} \psi''(\vec{r}) &= \psi(\mathcal{R}^{-1}(\vec{a})\mathcal{R}^{-1}(\vec{b})\vec{r}) \\ &= \psi(\mathcal{B}^{-1}(\vec{c})\vec{r}) \end{aligned} \quad (V-139)$$

avec :

$$\mathcal{B}(\vec{c}) = \mathcal{B}(\vec{b})\mathcal{B}(\vec{a}) \quad (V-140)$$

On a donc :

$$T(\vec{c}, 0) = T(\vec{b}, \vec{0}) T(\vec{a}, \vec{0}) \quad (V-141)$$

et aucun facteur de phase n'apparaît.

(i) Les formules (V-123) et (V-131b) montrent que, pour effectuer un déplacement donné de la particule considérée, il suffit d'appliquer ce déplacement au "nuage de probabilité" $\psi(\vec{r})$ lui-même (fonction complexe de la coordonnée \vec{r}). Dans la mesure où la seule donnée de $\psi(\vec{r})$ permet de calculer toutes les propriétés physiques de la particule (valeurs moyennes des diverses observables), on est effectivement sûr de faire subir au système le déplacement désiré (nous avons construit, à partir de conditions qu'ils satisfont nécessairement, les opérateurs T ; on vérifie ensuite qu'ils conduisent bien au résultat désiré). Ce résultat est si simple qu'il peut paraître évident ; on peut même si on le désire en faire un postulat. Cependant, il faut prendre garde à deux difficultés. En premier lieu, il convient de définir convenablement la phase relative des vecteurs $|\vec{r}\rangle$ si l'on veut arriver à un simple déplacement du nuage de probabilité [cf (V-118)]. Ensuite, il existe un cas important où les propriétés physiques de la particule ne se déduisent ^{pas} de $\psi(\vec{r})$ seulement : celui où la particule est chargée et est soumise à l'action d'un potentiel vecteur $A(\vec{r})$. Ce point plus délicat sera discuté au § d suivant (nous

verrons que, par conditions nécessaires, nous pouvons aboutir à des opérateurs T qui, physiquement, ne sont pas satisfaisants).

4 - Densité et courant de probabilité

A la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ normée ($\int d^3r |\psi(\vec{r})|^2 = 1$) on associe une densité de probabilité $\rho(\vec{r})$ et un courant de probabilité $\vec{J}(\vec{r})$ données par (4) :

$$\begin{cases} \rho(\vec{r}) &= |\psi(\vec{r})|^2 \geq 0 & (V-142a) \\ \vec{J}(\vec{r}) &= \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla}\psi(\vec{r}) - c.c.] & (V-142b) \end{cases}$$

(où c.c. signifie "complexe conjugué"). Le fait que $\psi(\vec{r})$ soit normée entraîne que :

$$\int d^3r \rho(\vec{r}) = 1 \quad (V-143)$$

Ecrivons ψ sous la forme :

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{\rho(\vec{r})} e^{i\theta(\vec{r})} \quad (V-144)$$

en introduisant la phase $\theta(\vec{r})$ de la fonction d'onde. Alors (V-1 2b) s'écrit :

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{m} \rho(\vec{r}) \vec{\nabla}\theta(\vec{r}) \quad (V-145)$$

Sous cette forme il est évident que :

$$\vec{\nabla} \times \begin{bmatrix} \vec{J}(\vec{r}) \\ \rho(\vec{r}) \end{bmatrix} = 0 \quad (V-146)$$

Inversement, si l'on se donne une densité de probabilité $\rho(\vec{r})$ quelconque positive satisfaisant (V-143), et un courant $\vec{J}(\vec{r})$ satisfaisant (V-146), on peut utiliser (V-144) pour construire la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ correspondante [définie à une phase globale près, puisque seul le gradient de θ est imposé].

On peut utiliser les expressions de $\vec{\rho}$ et \vec{J} pour retrouver l'expression des opérateurs T en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, calculée au paragraphe précédent. Prenons par exemple le cas d'une translation de vecteur $\vec{\ell}$. Il est clair que, si $\psi(\vec{r})$ désigne la fonction d'onde initiale de la particule, $\psi'(\vec{r})$ la fonction d'onde après translation, on doit avoir :

$$\begin{aligned} \vec{\rho}'(\vec{r}) &= \vec{\rho}(\vec{r} - \vec{\ell}) \\ \vec{J}'(\vec{r}) &= \vec{J}(\vec{r} - \vec{\ell}) \end{aligned} \quad (V-147)$$

[où $\vec{\rho}'(\vec{r})$ et $\vec{J}'(\vec{r})$ sont les densité et courant de probabilité associés à ψ']. Il existe une solution évidente $\psi'(\vec{r})$ qui donne ces égalités :

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{\ell}) \quad (V-148)$$

(4) Nous supposons pour le moment que la particule étudiée n'est pas une particule chargée plongée dans un potentiel vecteur (voir remarque à la fin du paragraphe).

et cette solution est la seule (à un facteur de phase globale près).

Le même raisonnement est valable pour une rotation, ou un déplacement quelconque. On aura [cf (V-40b)] :

$$\psi'(\vec{r}) = \psi[\mathcal{O}^{-1}(\vec{a})(\vec{r} - \vec{\ell})] \quad (\text{V-147})$$

(\vec{a} et $\vec{\ell}$ sont comme plus haut les paramètres associés au déplacement).

Remarques :

(i) Le raisonnement de ce paragraphe peut sembler beaucoup plus élégant et rapide que celui des paragraphes précédents. Il faut cependant voir qu'il est beaucoup moins général et qu'il contient sous forme d'hypothèse les résultats auxquels nous avons abouti. En effet, admettre les égalités (V-142) revient à admettre la forme de l'opérateur \vec{P} en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ et donc considérer comme acquises les relations de commutations de \vec{R} et \vec{P} .

(ii) Le cas où la particule possède une charge q et se trouve soumise à l'action d'un potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r})$ [et éventuellement un potentiel scalaire $U(\vec{r})$] mérite quelques commentaires. Les formules (V-142a) et (V-145) ne sont plus valables dans ce cas, et il faut les remplacer par :

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{r}) &= \frac{1}{2m} [\psi^*(\vec{r}) (\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{r})) \psi(\vec{r}) + \text{c.c.}] \\ &= \frac{1}{m} \rho(\vec{r}) [\hbar \vec{\nabla}\theta(\vec{r}) - q\vec{A}(\vec{r})] \end{aligned} \quad (\text{V-150})$$

L'origine de cette modification tient au fait qu'en présence d'un potentiel vecteur, il faut distinguer entre impulsion de la particule [au sens de la définition (I-68) du chap. I] et quantité de mouvement [produit de la masse par la vitesse]. Pour une discussion plus détaillée de ce point, nous renvoyons au complément H-III de la référence (13)

Discutons ici encore en termes de translation d'une longueur $\vec{\ell}$ (rien n'est à changer dans le cas d'un déplacement quelconque). Il est clair que l'opérateur translation dont l'action a été donnée en (V-123) et qui translate la fonction d'onde elle-même de $+\vec{\ell}$, ne conduit à :

$$\vec{J}'(\vec{r}) = \vec{J}(\vec{r} - \vec{\ell}) \quad (\text{V-151})$$

qu'à condition de translater également le potentiel vecteur :

$$\vec{A}'(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r} - \vec{\ell}) \quad (\text{V-152})$$

C'est d'ailleurs bien ce à quoi conduit naturellement le point de vue que nous avons adopté (changement de référentiel pour décrire un même système physique). Donc aucune difficulté ne se présente si l'on prend la précaution de toujours déplacer de la même façon $\psi(\vec{r})$ et les potentiels. Mais, dans ce point de vue, il faut bien garder à l'esprit que l'action des opérateurs $T(\vec{a}, \vec{\ell})$ ne suffit pas, à elle seule, à donner un système dont les propriétés physiques ont été déplacées.

En fait, tant que le seul potentiel qui agit sur la particule est scalaire, cette distinction est relativement mineure, et il est parfaitement possible de se contenter de modifier seulement le vecteur d'état. Ceci tient à ce que les propriétés instantanées de la particule sont décrites par $|\psi\rangle$, et que U n'intervient que dans l'évolution dans le temps de la particule (donc de $|\psi\rangle$). Or, un déplacement est une opération instantanée (le temps n'intervient pas). On peut donc considérer que tout ce qui précède (définition de l'impulsion à partir de déplacements infinitésimaux) s'applique sans changement au cas où l'on déplace les états d'une particule chargée dans un potentiel scalaire, sans changer le potentiel.

On peut cependant se poser le problème de façon plus générale : étant donné un champ électromagnétique décrit par des potentiels scalaires $U(\vec{r}, t)$ et $\vec{A}(\vec{r}, t)$ [non nul], comment ^(construire) dans l'espace des états & le ket quantique de la particule ayant subi un déplacement donné, sans modifier ni U ni A . Posé sous cette forme le problème n'a en général pas de solution. Ceci tient au fait que la modification de l'espace induite par $\vec{A}(\vec{r}; t)$ est telle qu'elle modifie les états quantiques accessibles à la particule. Cette propriété est purement quantique : en mécanique classique, rien n'empêche de déplacer à loisir position et vitesse d'une particule chargée dans un potentiel vecteur [on peut d'ailleurs rapprocher cette propriété et le fait que le diamagnétisme d'un ensemble de particules chargées est inexplicable classiquement et doit être interprété en termes de modifications des orbites quantiques des particules].

Il est facile de vérifier dans le cas d'une translation par exemple, qu'il n'existe en général pas de fonction d'onde $\psi'(\vec{r})$ telle que les égalités (V-147) soient vérifiées, tout en gardant $\vec{A}'(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r})$. En effet, si θ' est la phase de ψ' , la relation (V-150), reportée dans (V-147), donne :

$$\hbar \vec{\nabla} \theta'(\vec{r}) - q \vec{A}(\vec{r}) = \hbar \vec{\nabla} \theta(\vec{r} - \vec{\ell}) - q \vec{A}(\vec{r} - \vec{\ell}) \quad (V-153)$$

Cette équation, qui donne le gradient de θ' , n'a de solution que si son rotationnel est nul, c'est-à-dire si :

$$\vec{\nabla}_x [\vec{A}(\vec{r}) - \vec{A}(\vec{r} - \vec{\ell})] = 0 \quad (V-154a)$$

En termes du champ magnétique $\vec{B}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r})$, cette équation s'écrit :

$$\vec{B}(\vec{r}) = \vec{B}(\vec{r} - \vec{\ell}) \quad \forall \vec{r} \quad (V-154b)$$

Le problème n'a donc de solution que si la translation $\vec{\ell}$ est transformation de symétrie pour le champ \vec{B} lui-même.

Il est d'ailleurs

clair que, si cette condition est vérifiée, non seulement pour le champ magnétique \vec{B} , mais également pour le champ électrique \vec{E} , on peut obtenir une translation des propriétés physiques de la particule en deux temps : on translate d'abord la fonction d'onde et les potentiels de $\vec{\ell}$ puis, pour revenir aux potentiels initiaux, on effectue un changement de jauge (ce qui est possible puisque \vec{E} et \vec{B} eux-mêmes sont invariants).

Exemple :

On prend un champ \vec{B} uniforme. Voir référence (¹³), exercice 9 du complément L-III et remarque p. 770 du complément E-VI.

Dans ce chapitre, nous allons utiliser les propriétés du groupe $R(3)$ des rotations autour d'un point, ou plutôt celles de ses générateurs infinitésimaux (relations de commutation) pour étudier et construire les opérateurs de rotation, infinitésimaux ou finis, agissant dans l'espace des états d'un système quelconque. Nous commencerons, au paragraphe A, par une étude générale des représentations irréductibles unitaires de $R(3)$ ce qui nous conduira à écrire de façon explicite les matrices correspondantes. Munis de ces résultats, nous pourrions compléter au § B les résultats du § C du chapitre V : nous construirons des espaces des états où des représentations un peu plus complexes du groupe des déplacements sont obtenues. Ces espaces sont associés à des particules de spin non nul ; nous discuterons à cette occasion quelques propriétés des spineurs à deux composantes. Puis, au § C, nous aborderons le problème de la composition des moments cinétiques, c'est-à-dire de la décomposition en représentations irréductibles d'une représentation du groupe $R(3)$ obtenue par produit tensoriel de représentations individuellement irréductibles.

Bien que présentés de façon légèrement différente, un certain nombre des calculs que nous aurons à effectuer au paragraphe A font partie du programme de la maîtrise (certificat C 3) et nous ne les redonnons pas ici explicitement. Le lecteur peu familier avec la théorie élémentaire du moment cinétique pourra consulter le chapitre correspondant de l'un des ouvrages cités dans l'introduction, par exemple le chapitre VI de la référence (13) (nous utilisons d'ailleurs systématiquement les notations de cette référence).

A - REPRESENTATIONS UNITAIRES IRREDUCTIBLES DU GROUPE DES ROTATIONS

Rappelons les relations de commutations, [obtenues en (V-51a)] entre opérateurs J_{x_i} qui correspondent, dans l'espace des états d'un système physique quelconque, aux rotations infinitésimales :

$$[J_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{x_k} \tag{VI-1a}$$

ou encore :

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \tag{VI-1b}$$

(ainsi que les relations obtenues par permutation circulaire des indices x, y et z). Introduisons l'opérateur :

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad (\text{VI-2})$$

On montre facilement que \vec{J}^2 commute avec toute composante de \vec{J} ⁽¹⁾ :

$$[\vec{J}^2, J_{x_i}] = 0 \quad (\text{VI-3})$$

Le problème est maintenant le suivant : à partir des relations de commutation qui viennent d'être écrites (c'est-à-dire des constantes de structure du groupe des rotations), construire les matrices qui donnent de façon explicite l'action des opérateurs J_x , J_y et J_z dans l'espace des états ⁽²⁾ & d'un système quelconque ; en déduire celle des opérateurs de rotations. Comme nous l'avons dit dans l'introduction, ce problème est largement abordé dans le plupart des ouvrages de mécanique quantique élémentaire (même si la discussion n'est pas effectuée en termes de représentation) et nous nous contenterons ici d'énoncer sans démonstration un certain nombre de résultats classiques.

1 - Quelques propriétés utiles

Introduisons les deux opérateurs J_+ et J_- définis par :

$$J_{\pm} = J_x \pm i J_y \quad (\text{VI-4})$$

On a :

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm} \quad (\text{VI-5a})$$

$$J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (\text{VI-5b})$$

$$J_- J_+ = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (\text{VI-5c})$$

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2 \quad (\text{VI-5d})$$

Les propriétés suivantes peuvent alors être établies :

(i) Les valeurs propres de \vec{J}^2 sont réelles, positives ou nulles.

Elles seront notées :

$$j(j + 1) \hbar^2$$

où $j \geq 0$. Quant à celles de J_z , nous les écrivons $m\hbar$ ($m \geq 0$).

⁽¹⁾ Ce résultat est prévisible à partir des résultats du complément III-A : \vec{J}^2 n'est autre (à un facteur $- 1/2$ près) que l'opérateur de Casimir construit au § 2 de ce complément.

⁽²⁾ Les raisonnements que nous allons faire ne sont bien sûr pas limités à la mécanique quantique, et l'espace & peut être un espace de représentation quelconque (espace où agissent les opérateurs associés aux matrices de la représentation). Par exemple, & peut parfaitement être l'espace habituel à 3 dimensions (cf § 5-a).

(ii) Dans l'espace des états, on peut prendre une base ortho-normée de vecteurs propres communs à \vec{J}^2 et J_z . Ces vecteurs seront notés $|k, j, m\rangle$, où l'indice k sert à distinguer entre eux les kets propres relatifs à deux mêmes valeurs de j et de m (k est utile si \vec{J}^2 et J_z ne forment pas un E.C.O.C. à eux seuls).

(iii) On a :

$$-j < m < +j \quad \text{(VI-6a)}$$

Cette égalité peut être montrée à partir du fait que le carré de la norme des kets $J_{\pm} |k, j, m\rangle$ est positif ou nul.

(iv) $J_- |k, j, m\rangle$ est un ket propre (non-nul) commun à \vec{J}^2 , avec la valeur propre $j(j+1)\hbar^2$ (inchangée), et à J_z , avec la valeur propre $(m-1)\hbar$ (diminuée de \hbar), sauf si $m = -j$ (le ket est alors nul).

(v) On a la propriété symétrique pour J_+ où l'on doit remplacer les $-$ par des $+$:

$J_+ |k, j, m\rangle$ est un ket propre (non-nul) commun à \vec{J}^2 , avec la valeur propre $j(j+1)\hbar^2$ (inchangée) et à J_z , avec la valeur propre $(m+1)\hbar$ (augmentée de \hbar), sauf si $m = +j$ (le ket est alors nul).

(vi) L'action répétée de l'opérateur J_+ sur un ket $|k, j, m\rangle$ doit toujours, au bout d'un nombre fini d'opérations, donner un ket nul [sinon, l'inégalité (VI-6a) serait violée]. D'après (v), on en déduit que

$$j - m \text{ est entier.}$$

Le même raisonnement avec J_- montre que

$$j + m \text{ est entier.}$$

(vii) Donc les nombres $2j$ et $2m$ sont entiers. Ou bien :

. j est entier, ainsi que m

. j est "demi-entier" (fraction du type $p/2$, où p est impair),

ainsi que m .

(viii) A tout ket $|k, j, m\rangle$, l'action répétée des opérateurs J_+ et J_- permet d'associer une famille de $(2j+1)$ kets orthogonaux, associés à la même valeur de j et aux $(2j+1)$ valeurs de m :

$$m=j, j-1, j-2, \dots -j+1, -j \quad \text{(VI-6b)}$$

L'action de J_z , J_+ ou J_- sur l'un de ces kets réclame un autre ket de la même famille, à un coefficient de proportionnalité près (qui peut s'annuler pour J_z si $m=0$, J_+ si $m=j$, J_- si $m=-j$). Le sous-espace engendré par cette famille de $(2j+1)$ kets est stable sous l'action de toute composante J_u de l'opérateur \vec{J} .

2 - Représentations irréductibles

Dans l'espace des états \mathfrak{E} , les opérateurs de rotation sont [cf (V-74)] :

$$R_{\vec{u}}(\phi) = \exp \{-i\phi J_u/\hbar\} \tag{VI-7}$$

où :

$$J_u = u_x J_x + u_y J_y + u_z J_z \tag{VI-8}$$

Nous reprenons ici les notations du chapitre précédent, à une exception près : les opérateurs de rotation seront notés pour simplifier $R(\vec{a})$ ou $R_{\vec{u}}(\phi)$ avec $\vec{a} = \vec{u}\phi$, au lieu de $T(\vec{a}, \vec{0})$ [notation utilisé dans l'étude du groupe des déplacements à 6 paramètres]. A chacun de ces opérateurs, on associe une matrice donnant son action dans une base orthonormée $\{|u_p\rangle\}$ de \mathfrak{E} :

$$\left(R_{\vec{u}}(\phi) \right) = \begin{pmatrix} \langle u_1 | e^{-i\phi J_u/\hbar} | u_1 \rangle & \dots & \langle u_1 | e^{-i\phi J_u/\hbar} | u_N \rangle \\ \langle u_2 | e^{-i\phi J_u/\hbar} | u_1 \rangle & & \\ \vdots & & \\ \langle u_N | e^{-i\phi J_u/\hbar} | u_1 \rangle & \dots & \langle u_N | e^{-i\phi J_u/\hbar} | u_N \rangle \end{pmatrix} \tag{VI-9}$$

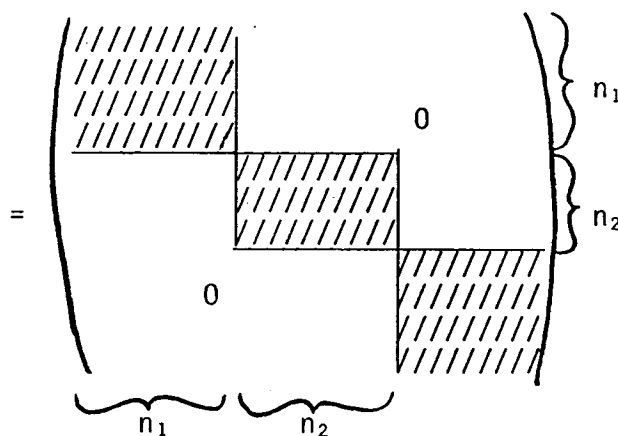
Si la dimension N de l'espace \mathfrak{E} est finie, cette matrice est $N \times N$; en fait, N est en général infini et il en est de même de la matrice associée à $R_{\vec{u}}(\phi)$.

Nous supposons que l'ensemble des matrices (VI-9) donne une représentation, éventuellement projective, du groupe des rotations. Nous avons vu en effet qu'une telle représentation existe dans l'espace des états du système, et que les relations (VI-1) et (VI-7) sont nécessairement vérifiées. Inversement, nous ne savons pas à ce stade si tout ensemble de matrices (VI-9) donne automatiquement une représentation projective du groupe des rotations pourvu que \vec{J} satisfasse aux relations de commutation (VI-1) (conditions nécessaires mais éventuellement non suffisantes). Si, comme nous le ferons aux

§4, l'on part de (VI-1) et (VI-9) pour construire toutes les matrices de rotations a priori possibles, il est ensuite important de vérifier si elles fournissent effectivement une représentation.

Les opérateurs $R_{\vec{u}}(\phi)$ étant unitaires, et la base $\{|u_k\rangle\}$ orthonormée, ces matrices sont unitaires et on dit que la représentation est unitaire. Nous allons chercher à réduire cette représentation en somme de représentations de dimensions inférieures à N . Ceci revient à chercher une nouvelle base, $\{|u'_k\rangle\}$, où les opérateurs $R_{\vec{u}}(\phi)$ soient représentés par des matrices diagonales par blocs :

$$\left(R_{\vec{u}}(\phi)\right)' = \begin{pmatrix} \langle u'_1 | e^{-i\phi J_{\vec{u}}/\hbar} | u'_1 \rangle & \dots & \langle u'_1 | e^{-i\phi J_{\vec{u}}/\hbar} | u'_N \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle u'_N | e^{-i\phi J_{\vec{u}}/\hbar} | u'_1 \rangle & \dots & \langle u'_N | e^{-i\phi J_{\vec{u}}/\hbar} | u'_N \rangle \end{pmatrix}$$



(VI-10)

Remarque :

Nous l'avons déjà noté au chapitre II, le problème n'est pas de diagonaliser une matrice donnée, ce qui est toujours possible pour une matrice unitaire, mais toutes les matrices du groupe en utilisant une base

unique $\{|u'_k\rangle\}$; c'est pourquoi une diagonalisation complète n'est pas en général possible, et il faut s'arrêter à une diagonalisation par blocs.

Dans la matrice du second membre de (VI-10), appelons n_1 le nombre de lignes et de colonnes du premier bloc, n_2 celui du second, etc. Nous désignerons par \mathfrak{E}_{τ_1} le sous-espace de \mathfrak{E} engendré par les n_1 premiers vecteurs de base, par \mathfrak{E}_{τ_2} celui engendré par les n_2 suivants, et ainsi de suite. Dire que la matrice est diagonale par bloc revient à dire que chacun des sous-espaces \mathfrak{E}_{τ_i} est globalement invariant ⁽³⁾ sous l'action de l'ensemble des opérateurs de rotation.

Le problème de trouver les sous-espaces \mathfrak{E}_{τ} invariants se ramène à celui de la recherche des sous-espaces invariants sous l'action de toutes les composantes J_u de \vec{J} ; ceci revient à chercher tous espaces invariants sous l'action soit de J_x, J_y et J_z , soit de J_+, J_- et J_z . En effet, un sous-espace \mathfrak{E}_{τ} satisfait nécessairement cette condition puisqu'il est invariant sous l'action des opérateurs de rotation infinitésimale :

$$R_{\vec{u}}(\delta\phi) = 1 - i \delta\phi J_u/\hbar \quad (\text{VI-11})$$

Inversement, la condition d'invariance de \mathfrak{E}_{τ} sous l'action de J_x, J_y, J_z entraîne celle d'invariance sous l'action d'une composante quelconque J_u de \vec{J} (l'opérateur J_u est une combinaison linéaire de J_x, J_y et J_z), et donc sous l'action de l'opérateur de rotation finie $R_{\vec{u}}(\phi)$ puisque :

$$\begin{aligned} R_{\vec{u}}(\phi) &= \exp \{ - i \phi J_u/\hbar \} \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} \frac{1}{q!} [- i \phi J_u/\hbar]^q \end{aligned} \quad (\text{VI-12})$$

(si \mathfrak{E}_{τ} est invariant sous l'action de J_u , il l'est évidemment sous celle d'une puissance quelconque de J_u).

Ayant décomposé les matrices de rotations en blocs diagonaux comme en (VI-10), on peut tenter d'appliquer à nouveau la même procédure à chaque bloc, c'est-à-dire de le décomposer en blocs plus petits. Cette opération pourra être effectuée jusqu'à ce que l'on arrive à des représentations irréductibles du groupe des rotations (chapitre II, § B-4), pour

⁽³⁾ Un sous-espace \mathfrak{E}_{τ} est globalement invariant sous l'action d'un opérateur R si $|\psi\rangle \in \mathfrak{E}_{\tau}$ entraîne que $R|\psi\rangle \in \mathfrak{E}_{\tau}$, quel que soit $|\psi\rangle$ (ici, les \mathfrak{E}_{τ} sont globalement invariants sous l'action d'un ensemble d'opérateurs). Ceci n'entraîne pas nécessairement une invariance point par point : chaque ket $|\psi\rangle$ de \mathfrak{E}_{τ} , séparément, n'est pas nécessairement invariant, sous l'action de R [on n'a pas $R|\psi\rangle \propto |\psi\rangle$].

lesquelles par définition aucune décomposition ultérieure en somme directe n'est plus possible (toujours, bien sûr, si l'on considère l'ensemble des matrices de rotations). A ce stade, chacun des sous-espaces \mathcal{E}_τ où agissent les blocs ne peut plus contenir de sous-espaces globalement invariants sous l'action des $R_{\vec{U}}(\phi)$: les \mathcal{E}_τ sont alors appelés sous-espaces irréductibles.

Nous n'avons pas précisé plus haut si la nouvelle base $\{|u'_k\rangle\}$, qui permet de diagonaliser les matrices par blocs et de faire apparaître les sous-espaces invariants est nécessairement orthonormée. Cependant, en imposant cette condition, on ne restreint en rien la recherche de sous-espaces invariants. Supposons en effet qu'on ait trouvé, par un changement de base quelconque, un sous-espace \mathcal{E}_τ , qui soit globalement invariant sous l'action des $R_{\vec{U}}(\phi)$. Dans ce sous-espace, on peut choisir une base orthonormée, puis compléter cette base par une base orthonormée dans l'espace total. Si n_1 est la dimension de \mathcal{E}_{τ_1} , les n_1 premiers vecteurs de cette base engendrent \mathcal{E}_{τ_1} , les suivants le sous-espace orthogonal à \mathcal{E}_{τ_1} . Ce dernier sous-espace est d'ailleurs également invariant sous l'action des composantes J_U de \vec{J} et donc des $R_{\vec{U}}(\phi)$: ceci découle immédiatement de l'hermiticité de J_U [si $|\phi\rangle$ appartient à \mathcal{E}_{τ_1} et si $|\phi_1\rangle$ appartient au sous-espace orthogonal, $\langle\phi_1|J_U|\phi\rangle = 0$ entraîne $\langle\phi|J_U|\phi_1\rangle = 0$]. Dans la suite, nous nous limiterons à des changements de base orthonormée (⁴).

Dans ces conditions, comme les matrices initiales (VI-9), les matrices après changement de base écrites en (VI-10) sont unitaires. Nous allons donc dans ce chapitre rechercher les représentations unitaires irréductibles au groupe de rotations autour d'un point. La discussion que nous avons effectuée montre en effet que toute représentation unitaire peut être obtenue par somme directe de représentations irréductibles (avec, éventuellement, application ultérieure d'un changement de base qui rend la réductibilité de la somme moins évidente). Le problème essentiel est donc de trouver les représentations irréductibles.

(⁴) Au § B-4 du chapitre II, nous avons distingué entre deux notions, celle de réduction totale d'une représentation [qui conduit à la forme (VI-10)] ou celle, moins contraignante, de réduction simple [dans (VI-10), seuls les éléments en dessous des blocs de la diagonale doivent être annulés]. Le raisonnement qui vient d'être fait montre que, dans le cas qui nous occupe [opérateurs $R_{\vec{U}}(\phi)$ unitaires], la réduction simple entraîne, si l'on prend une base orthonormée, la réduction totale de la représentation.

Remarque :

On peut se demander dans quelle mesure les sous-espaces \mathfrak{E}_τ et les représentations trouvées par décomposition dépendent de la façon dont la décomposition est effectuée. Ce point sera discuté plus loin [remarque (ii) à la fin du § 3 suivant].

3 - Base standard

Le sous-espace irréductible \mathfrak{E}_τ étant invariant sous l'action de J_u , il l'est également sous celle de \vec{J}^2 . Ceci signifie que l'on peut diagonaliser l'opérateur \vec{J}^2 à l'intérieur de chaque espace \mathfrak{E}_τ et obtenir un certain nombre de valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ où $j = j_1, j_2, \dots$ etc. Montrons que cette valeur propre est en réalité unique. En effet, si l'on avait deux valeurs j_1 et j_2 différentes de j , \mathfrak{E}_τ serait la somme directe de plusieurs sous-espaces orthogonaux associés à des valeurs propres distinctes de l'opérateur \vec{J}^2 . Comme \vec{J}^2 commute avec toute composante de \vec{J} , ni J_u ni aucune fonction de \vec{J} n'aurait d'éléments de matrice non nul entre ces sous-espaces orthogonaux. Ce serait donc le cas des opérateurs $R_u(\phi)$, et la représentation serait réductible.

Donc j a une valeur unique dans \mathfrak{E}_τ . A partir de maintenant, ce sous-espace sera noté $\mathfrak{E}(\tau, j)$.

Soit $|\tau, j, m\rangle$ un ket de $\mathfrak{E}(\tau, j)$, obtenu par diagonalisation de J_z dans le sous-espace invariant, et relatif à la valeur propre $m\hbar$ (on peut par exemple choisir la valeur maximale possible, $m = j$). A ce ket, on peut associer [cf § A-1, propriété (vi)] une famille de $(2j+1)$ kets orthogonaux obtenus par action de J_+ et J_- (J_- seulement si on a choisi $m = j$), qui sont vecteurs propres de J_z avec les valeurs propres $m\hbar$ ($m = j, j-1, j-2, \dots, -j$). Ces kets appartiennent à $\mathfrak{E}(\tau, j)$ [invariant sous l'action de J_\pm] et engendrent un sous-espace de $\mathfrak{E}(\tau, j)$ qui n'est autre que $\mathfrak{E}(\tau, j)$ lui-même. En effet, ce sous-espace est invariant par construction sous l'action de J_z, J_+ et J_- , donc de tout opérateur $R_u(\phi)$. C'est donc un sous-espace invariant de $\mathfrak{E}(\tau, j)$ et, ce dernier étant irréductible, ce ne peut être que $\mathfrak{E}(\tau, j)$ lui-même.

Montrons maintenant que, si $|\tau, j, m\rangle$ est normé, les kets $|\tau, j, m \pm 1\rangle$ associés aux valeurs voisines de m le sont également lorsqu'ils sont définis par :

$$J_\pm |\tau, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |\tau, j, m \pm 1\rangle \text{ (VI-13)}$$

Calculons pour cela la norme des deux membres de cette égalité. Il vient (puisque J_- est l'adjoint de J_+) :

$$\langle \tau, j, m | J_- J_+ | \tau, j, m \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] \langle \tau, j, m \pm 1 | \tau, j, m \pm 1 \rangle \quad (\text{VI-14})$$

Or, d'après (VI-5b) et (VI-5c), le premier membre de cette égalité vaut :

$$[j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \mp m\hbar^2] \langle \tau, j, m | \tau, j, m \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] \quad (\text{VI-15})$$

(puisque $|\tau, j, m\rangle$ est normé par hypothèse). Après simplification par $\hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)]$, on voit donc que $|\tau, j, m \pm 1\rangle$ est également normé. Partant d'un ket $|\tau, j, m\rangle$ quelconque, les relations (VI-13) peuvent donc nous fournir une base orthonormée de $\mathcal{E}(\tau, j)$. Alors, les relations (VI-13) nous permettent de passer d'un ket $|\tau, j, m\rangle$ quelconque de cette base aux kets de valeurs voisines de m ⁽⁵⁾.

En résumé, les propriétés des kets $|\tau, j, m\rangle$ que nous avons définis sont :

$J^2 \tau, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 \tau, j, m\rangle$	(VI-16)
$J_Z \tau, j, m\rangle = m\hbar \tau, j, m\rangle$	
$J_{\pm} \tau, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \tau, j, m \pm 1\rangle$	

On a, de plus, la relation d'orthogonalité :

$\langle \tau, j, m \tau', j', m' \rangle = \delta_{\tau\tau'} \delta_{jj'} \delta_{mm'}$	(VI-17)
---	---------

[le $\delta_{\tau\tau'}$ résulte de ce que les espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$ sont par construction orthogonaux entre eux ; les $\delta_{mm'}$ et $\delta_{jj'}$ résultent de l'orthogonalité de vecteur propres d'opérateurs hermitiques lorsqu'ils sont associés à des valeurs propres différentes] et celle de fermeture :

$\sum_{\tau, j, m} \tau, j, m\rangle \langle \tau, j, m = \mathbb{1}$	(VI-18)
---	---------

[cette relation exprime que la somme des projecteurs sur les espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$ est l'opérateur identité].

⁽⁵⁾ Il faut vérifier que si la relation (VI-13) a été prise pour définir, par action de J_+ le ket $|\tau, j, m+1\rangle$ à partir de $|\tau, j, m\rangle$, elle permet également de revenir de $|\tau, j, m+1\rangle$ à $|\tau, j, m\rangle$ par action de J_- (ou inversement, en renversant les rôles de J_+ et J_-). Cette propriété s'établit facilement en utilisant à nouveau (VI-5b) ou (VI-5c).

L'ensemble des $|\tau, j, m\rangle$ constitue ce que l'on appelle une "base standard" dans l'espace des états du système.

Ce type de base est particulièrement bien adapté à l'étude des propriétés du moment cinétique d'un système physique quelconque. En effet, résumons les résultats obtenus :

. les éléments de matrice de J_x , J_y et J_z sont immédiatement donnés par (VI-16), compte tenu de la définition (VI-4) de J_+ et J_- .

. les espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$ sont obtenus en regroupant entre eux les $(2j + 1)$ kets associés aux mêmes valeurs de τ , et de j , et en prenant le sous-espace qu'ils engendrent. Quelle que soit la nature du système physique considéré, ces espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$ ont toujours les mêmes dimensions $2j + 1$ [où $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ etc] et les mêmes propriétés vis à vis du moment cinétique total \vec{J} : ils sont globalement invariants et les formules (VI-16) donnent les éléments de matrice de toute composante J_u de \vec{J} , éléments qui ne dépendent que de j et m . Par suite, la seule donnée de la valeur de j détermine complètement la représentation obtenue du groupe des rotations.

. une fonction $F(\vec{J})$ quelconque du moment cinétique laisse $\mathcal{E}(\tau, j)$ invariant et est représentée dans chaque $\mathcal{E}(\tau, j)$ par des matrices qui ne dépendent que de F et non du système physique étudié.

La discussion qui suit s'applique donc dans tous les cas où l'on étudie un système physique par la mécanique quantique.

Remarques :

(i) Une autre façon de construire une base standard.

Supposons que l'on dispose d'un ensemble d'observables K_1, K_2, \dots, K_i , formant avec \vec{J}^2 et J_z un E.C.O.C. Nous ferons l'hypothèse supplémentaire que les opérateurs K_i commutent, non seulement entre eux et avec J_z , mais avec les deux autres composantes J_x et J_y (les K_i commutent avec toute composante J_u de \vec{J} : ce sont des opérateurs "scalaires"). Dans ce cas, les kets propres communs :

$$|k_1, k_2, \dots, k_i, \dots ; j, m\rangle$$

à $K_1, K_2, \dots, K_i, \vec{J}^2$ et J_z forment une base standard, à condition de fixer leurs phases relatives par :

$$J_{\pm} |k_1, k_2, \dots, k_i, \dots ; jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |k_1, k_2, \dots, k_i, \dots ; j, m\rangle$$

(VI-19)

On notera que, pour pouvoir écrire cette égalité, il ne suffit pas que $[J_z, K_j] = 0$, mais il faut également que $[J_+, K_j] = 0$. L'opérateur K sera par exemple l'hamiltonien d'un système invariant par rotation.

(ii) Revenons sur le problème de l'influence de la façon dont est effectuée la décomposition de la représentation initiale en représentations irréductibles.

Dans chaque $\mathfrak{E}(\tau, j)$, la valeur propre $j(j+1)\hbar^2$ de \vec{J}^2 est dégénérée $(2j+1)$ fois. Un cas particulièrement simple est celui où, dans l'espace de représentation total, la dégénérescence de chaque valeur propre de \vec{J}^2 n'est pas supérieure à $(2j+1)$. Dans ce cas [où \vec{J}^2 et J_z forment un E.C.O.C. et l'indice τ est inutile], $\mathfrak{E}(\tau, j)$ ne peut être que le sous-espace propre correspondant de \vec{J}^2 et chaque valeur propre $j(j+1)\hbar^2$ fait apparaître une fois et une seule la représentation irréductible correspondante. La façon dont la décomposition est effectuée n'a donc dans ce cas aucune influence, ni sur les espaces $\mathfrak{E}(\tau, j)$ trouvés, ni sur les représentations irréductibles trouvées.

Dans le cas général, les valeurs propres de \vec{J}^2 peuvent avoir une dégénérescence plus élevée. Si une décomposition a donné $q(j)$ espaces orthogonaux $\mathfrak{E}(\tau, j)$ associés à la même valeur de j , la valeur propre $j(j+1)\hbar^2$ est $(2j+1) \times q(j)$ fois dégénérée. Ce degré de dégénérescence ne dépend pas de la façon dont la décomposition a été effectuée, il est clair que $q(j)$ n'en dépend pas non plus. Cependant, les sous-espaces $\mathfrak{E}(\tau, j)$ peuvent, eux, dépendre de cette décomposition. Prenons par exemple deux d'entre eux, $\mathfrak{E}(\tau_1, j)$ et $\mathfrak{E}(\tau_2, j)$, et deux de leurs kets respectifs $|\tau_1, j, m\rangle$ et $|\tau_2, j, m\rangle$. Au lieu de ces deux kets, on peut prendre un ensemble de deux de leurs combinaisons linéaires, également orthonormées (par exemple la somme et la différence, multipliées par $2^{-1/2}$). Par action successive de J_+ et J_- sur ces deux nouveaux kets on voit facilement qu'on engendre deux familles de $(2j+1)$ kets, combinaisons linéaires (avec les mêmes coefficients) de celles qui engendraient $\mathfrak{E}(\tau_1, j)$ et $\mathfrak{E}(\tau_2, j)$; ces deux nouvelles familles engendrent deux sous-espaces $\mathfrak{E}(\tau'_1, j)$ et $\mathfrak{E}(\tau'_2, j)$ qui ont des propriétés identiques aux précédents. Lorsque \vec{J}^2 et J_z ne forment pas un E.C.O.C., les sous-espaces de représentations elles-mêmes, peuvent dépendre de la façon dont est effectuée la décomposition de la représentation.

4 - Construction explicite des matrices de rotation

Construisons explicitement les ensembles irréductibles de matrices de rotation associées aux sous-espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$, c'est-à-dire les matrices à $(2j + 1)$ lignes et $(2j + 1)$ colonnes, qui, dans ces sous-espaces, sont associées aux opérateurs $R_{\vec{u}}(\phi)$. Pour cela, il suffit de choisir une valeur de j , entière ou demi-entière, et d'utiliser les relations (VI-13) et (VI-14) pour construire les matrices $(2j + 1) \times (2j + 1)$ associées à J_x, J_y et J_z . On en déduit facilement celle de J_u , combinaison linéaire des précédentes. Puis, par exponentiation [formule (VI-7)], on obtiendra les matrices associées aux opérateurs $R_{\vec{u}}(\phi)$. Ces matrices seront notées $\left(R_{\vec{u}}^{[j]}(\phi) \right)$, et leurs éléments dans une base standard $R_{\vec{u}}^{[j]}(\phi)_{mm'}$; nous simplifierons souvent ces notations en $\left(R^{[j]} \right)$ et $\left(R^{[j]} \right)_{mm'}$, lorsque la dépendance en \vec{u} et ϕ ne sera pas essentielle :

$$\left(R_{\vec{u}}^{[j]}(\phi) \right) = \left(R^{[j]} \right) = \text{matrice de } R_{\vec{u}}(\phi) \text{ dans } \mathcal{E}(\tau, j) \quad \text{(VI-20a)}$$

$$\left(R^{[j]} \right)_{mm'} = \langle \tau, j, m | \exp \{ -i\phi J_u / \hbar \} | \tau, j, m' \rangle \quad \text{(VI-20b)}$$

Dans ce qui suit, le nombre quantique τ ne joue aucun rôle et peut être omis sans inconvénient.

a) $j = 0$ (moment cinétique nul)

Cette valeur de j nous conduit qu'à la représentation triviale de dimension 1. En effet, m ne peut être que nul [cf (VI-6)] et les formules (VI-13) et (VI-14) donnent :

$$(J_u) = (0) \quad \text{(VI-21)}$$

Pour les opérateurs de rotation, on vérifie immédiatement que :

$$\left(R_{\vec{u}}^{[0]}(\phi) \right) = (1) \quad \text{(VI-22)}$$

quels que soient \vec{u} et ϕ :

b) $j = 1/2$

Les matrices sont alors des matrices 2×2 . On obtient immédiatement ⁽⁶⁾ :

$$(J_z) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{(VI-23)}$$

⁽⁶⁾ Par convention, et quelle que soit la valeur de j , nous rangeons toujours les vecteurs de base par ordre de m décroissant :

$$|\tau, j, j\rangle, |\tau, j, j-1\rangle, |\tau, j, j-2\rangle, \dots, |\tau, j, -j\rangle$$

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-24})$$

Donc, d'après la définition de J_{\pm} :

$$(J_x) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (J_y) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-25})$$

Nous retrouvons donc les trois matrices de Pauli (à un facteur $\hbar/2$ près). Quant à l'opérateur \vec{J}^2 , il est associé à la matrice unité 2×2 , multipliée par $3\hbar^2/4$.

Passons maintenant aux opérateurs de rotation finie. Par exemple, par exponentiation de (VI-23), on trouve sans difficultés :

$$\left(R_z(\phi) \right) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \quad (\text{VI-26})$$

De même, pour une rotation autour de Ou , où l'opérateur infinitésimal est :

$$J_u = u_x J_x + u_y J_y + u_z J_z \quad (\text{VI-27})$$

On peut utiliser les propriétés des matrices de Pauli [$\sigma_u^2 = 1$; cf chapitre III, § B-3] pour obtenir :

$$\begin{aligned} \left(R_{\vec{u}}^{[\phi]}(\phi) \right) &= (e^{-i\phi J_u/\hbar}) = \cos \frac{\phi}{2} - \frac{2i}{\hbar} \sin \frac{\phi}{2} \vec{u} \cdot \vec{J} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} - i u_z \sin \frac{\phi}{2} & (-i u_x - u_y) \sin \frac{\phi}{2} \\ (-i u_x + u_y) \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} + i u_z \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{VI-28})$$

Nous retrouvons donc les matrices de $SU(2)$ déjà introduites au chapitre II, paramétrées de la même façon [il suffit de remplacer dans (VI-28) ϕ par a pour obtenir exactement la matrice écrite en (III-76)]. Nous discuterons au paragraphe 5 suivant dans quelle mesure ces matrices donnent une représentation du groupe des rotations.

Remarque :

En (V-18), nous avons obtenu une relation qui permet d'exprimer une rotation $R(\alpha, \beta, \gamma)$, définie par ses angles d'Euler α , β et γ , en fonction de rotations autour des axes Oy et Oz . Cette relation permet d'exprimer $\left(R^{[\phi]} \right)$ en fonction des angles d'Euler sous la forme :

$$\begin{aligned} \left(R^{[1/2]}(\alpha, \beta, \gamma) \right) &= \left(R^{[1/2]}_{\vec{u}_z}(\alpha) \right) \left(R^{[1/2]}_{\vec{u}_y}(\beta) \right) \left(R^{[1/2]}_{\vec{u}_z}(\gamma) \right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha + \gamma)/2} \cos \beta/2 & -e^{i(\gamma - \alpha)/2} \sin \beta/2 \\ e^{i(\alpha - \gamma)/2} \sin \beta/2 & e^{i(\gamma + \alpha)/2} \cos \beta/2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{VI-29})$$

[dans la mesure où les $R^{[j]}$ fournissent une représentation du groupe des rotations ; cf. complément VI-A]

c) $j = 1$

La dimension de la représentation est 1 dans ce cas et [cf note (6) pour l'ordre des vecteurs de base] :

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad J_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-30})$$

Par un raisonnement analogue à celui qui vient d'être fait dans le cas où $j = 1/2$, on trouve :

$$\left(R^{[1]}_{\vec{u}_z}(\phi) \right) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (\text{VI-31})$$

et, par exemple :

$$\left(R_{\vec{u}_y}(\phi) \right) = \begin{pmatrix} (1 + \cos \phi)/2 & -\sin \phi / \sqrt{2} & (1 - \cos \phi)/2 \\ \sin \phi / \sqrt{2} & \cos \phi & -\sin \phi / \sqrt{2} \\ (1 - \cos \phi)/2 & \sin \phi / \sqrt{2} & (1 + \cos \phi)/2 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-32})$$

Comme en (VI-24), on peut obtenir :

$$\begin{aligned} \left(R^{[1]}(\alpha, \beta, \gamma) \right) &= \left(R^{[1]}_{\vec{u}_z}(\alpha) \right) \left(R^{[1]}_{\vec{u}_y}(\beta) \right) \left(R^{[1]}_{\vec{u}_z}(\gamma) \right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha + \gamma)} \frac{1 + \cos \beta}{2} & -e^{-i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & e^{i(\gamma - \alpha)} \frac{1 - \cos \beta}{\sqrt{2}} \\ e^{-i\gamma} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \cos \beta & -e^{i\gamma} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} \\ e^{i(\alpha - \gamma)} \frac{1 - \cos \beta}{2} & e^{i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & e^{i(\gamma + \alpha)} \frac{1 + \cos \beta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{VI-33})$$

Au paragraphe 5 suivant, nous verrons que les matrices 3×3 ainsi obtenues sont simplement, dans une base différente (représentations équivalentes), les matrices de rotation habituelles.

Nous ne donnerons pas plus de détails concernant les diverses propriétés des matrices de rotation $(R_{\vec{u}}^{[j]}(\phi))$. On trouvera un certain nombre d'entre elles dans l'appendice C-IV du tome II du livre de mécanique quantique de A. Messiah.

5 - Représentations au sens strict et représentations bivaluées

Nous allons maintenant discuter les résultats précédents. En particulier, nous allons examiner une question laissée ouverte au § B-2 du chapitre V : les opérateurs de rotation agissant dans l'espace des états & fournissent-ils une représentation au sens strict (sans facteur de phase) du groupe des rotations $R(3)$, ou une représentation projective ?

La réponse à cette question n'est pas évidente, nous l'avons déjà remarqué au chapitre précédent. La structure du groupe des rotations nous a permis d'éliminer localement les facteurs de phase, mais rien ne prouve que globalement, sur l'ensemble du groupe des rotations, il en soit de même. Dans ce qui précède, nous avons procédé par conditions nécessaires : à partir des relations de commutation entre générateurs infinitésimaux, nous avons calculé des relations, comme (VI-16), qui doivent nécessairement être satisfaites dans tout espace associé à une représentation irréductible de $R(3)$, avec un choix convenable de la base dans cet espace. A aucun moment, nous n'avons vérifié si ces relations sont suffisantes et en toute rigueur, il n'est en rien évident que, pour toute valeur de j entière ou demi-entière, les relations (VI-16) nous conduisent à des représentations de $R(3)$, projectives ou non; nous verrons d'ailleurs qu'il faut distinguer les deux cas (valeur de j entière ou demi-entière). Il nous reste donc à nous en assurer. Nous allons donc reprendre les matrices que nous avons calculées et vérifier si elles fournissent effectivement des représentations du groupe $R(3)$.

Mis à part le cas $j = 0$ (qui donne effectivement une représentation, la représentation triviale de dimension 1), le premier cas qui s'est présenté à nous est celui où $j = 1/2$ (représentation de dimension 2). On remarque tout de suite, sur (VI-28) ou (VI-29) par exemple, que dans les expressions obtenues pour les matrices $(R^{[1/2]})$ figurent des fonctions trigonométriques des angles moitié $\phi/2$, $\alpha/2$, etc. Ceci entraîne qu'à une rotation \mathcal{R} peuvent a priori correspondre (au moins) deux matrices distinctes $(R^{[1/2]})$: en remplaçant ϕ par $\phi + 2\pi$, on ne change rien à la rotation [comme on le vérifie évidemment sur l'expression (V-26) des matrices (\mathcal{R})] mais, dans (VI-28), on obtient la matrice opposée. Nous pressentons donc une

difficulté et, avant de la discuter en détail, nous allons traiter le cas $j = 1$, qui va s'avérer plus simple.

a) Cas où $j = 1$
.....

Nous l'avons déjà dit, les matrices $R^{[1]}$ que nous avons obtenues ne sont autres que les matrices (\mathcal{R}) introduites au § A-2-b au chapitre V mais après un changement de base. Cette affirmation n'est pas difficile à démontrer à ce stade du raisonnement. Il ne peut en effet être autrement : nous avons recherché systématiquement toutes les représentations irréductibles du groupe des rotations, et, pour chaque dimension $(2j + 1)$, n'en avons trouvé qu'une possible [à un changement de base près dans chaque espace de représentation $\mathcal{E}(\tau, j)$, c'est-à-dire à une équivalence près entre représentations]. Or les matrices de rotations elles-mêmes fournissent une représentation irréductible ⁽⁷⁾ de dimension 3. Les deux représentations sont donc nécessairement équivalentes.

On peut bien sûr montrer explicitement qu'un changement de base permet de passer des matrices (\mathcal{R}) de rotation dans l'espace habituel aux matrices $R^{[j = 1]}$. Nous allons effectuer le calcul, à titre de vérification, et surtout parce qu'il nous conduira à introduire une base de vecteurs $|\vec{e}_{+1}\rangle$, $|\vec{e}_0\rangle$ et $|\vec{e}_{-1}\rangle$ dont nous aurons besoin au chapitre suivant. Nous allons donc appliquer dans l'espace habituel la même procédure que celle qui nous a conduit aux expressions (VI-30) à (VI-33) dans un espace $\mathcal{E}(\tau, j = 1)$. Pour prendre des notations habituelles à celles d'un espace des états, appelons $|\vec{e}_x\rangle$, $|\vec{e}_y\rangle$, $|\vec{e}_z\rangle$ les vecteurs de base portés par un trièdre orthonormé Oxyz dans l'espace habituel.

Nous avons déjà obtenu au § A-2-c du chapitre V l'expression des rotations infinitésimales, et en particulier :

$$\mathcal{R}_{\vec{u}_z}(\delta\phi) = 1 + \delta\phi m_z \tag{VI-34}$$

où :

$$m_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{VI-35}$$

(7) Si la représentation était réductible, elle serait décomposable en une somme, soit de deux représentations (de dimensions respectives 1 et 2), soit de trois (de dimension un). Dans les deux cas, il existerait une direction de l'espace (sous-espace de R^3 de dimension 1) invariante sous l'action de toutes les rotations. Or on sait bien que ce n'est pas le cas : il suffit de considérer une rotation d'axe non confondu avec la direction en question et d'angle non nul.

Comme dans un espace $\mathfrak{E}(\tau, j)$, diagonalisons l'opérateur de rotation infinitésimale autour de Oz. Il est facile de diagonaliser (VI-35) et on obtient la base (de vecteur définis à un facteur de phase près) :

$$\begin{cases} |\vec{e}_+ \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\vec{e}_x \rangle + i |\vec{e}_y \rangle \right] \\ |\vec{e}_0 \rangle &= |\vec{e}_z \rangle \\ |\vec{e}_- \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\vec{e}_x \rangle - i |\vec{e}_y \rangle \right] \end{cases} \quad (\text{VI-36})$$

Il nous reste, comme en (VI-13), à définir la phase relative des vecteurs de base. L'opérateur qui correspond ici à J_+ est ici :

$$i\hbar \mathcal{M}_+ = i\hbar (\mathcal{M}_x + i\mathcal{M}_y) \quad (\text{VI-37})$$

où \mathcal{M}_x et \mathcal{M}_y sont les matrices écrites en (V-33), et le $i\hbar$ s'introduit conformément à (V-50). On obtient dans la base initiale $|\vec{e}_x \rangle, |\vec{e}_y \rangle, |\vec{e}_z \rangle$:

$$i\hbar \mathcal{M}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -i \\ 1 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-38})$$

Par suite :

$$\begin{cases} i\hbar \mathcal{M}_+ |\vec{e}_+ \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[|\vec{e}_z \rangle - |\vec{e}_z \rangle \right] = 0 \\ i\hbar \mathcal{M}_+ |\vec{e}_z \rangle &= \hbar \left[-|\vec{e}_x \rangle - i |\vec{e}_y \rangle \right] = -\hbar \sqrt{2} |\vec{e}_+ \rangle \\ i\hbar \mathcal{M}_+ |\vec{e}_- \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[|\vec{e}_z \rangle + |\vec{e}_z \rangle \right] = \hbar \sqrt{2} |\vec{e}_0 \rangle \end{cases} \quad (\text{VI-39})$$

Pour obtenir exactement les relations (VI-13), nous sommes conduits à prendre la base :

$$\begin{aligned} |\vec{e}_{+1} \rangle &= -|\vec{e}_+ \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\vec{e}_x \rangle + i |\vec{e}_y \rangle \right] \\ |\vec{e}_0 \rangle &= |\vec{e}_z \rangle \\ |\vec{e}_{-1} \rangle &= |\vec{e}_- \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\vec{e}_x \rangle - i |\vec{e}_y \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{VI-40})$$

(c'est la même que la précédente, à un changement près de signe du premier vecteur).

Compte tenu de l'expression (V-33), des matrices \mathcal{M} dans la base initiale $|\vec{e}_x \rangle, |\vec{e}_y \rangle, |\vec{e}_z \rangle$, on calcule aisément leur action dans la nouvelle

base $|\vec{e}_{+1}\rangle, |\vec{e}_0\rangle, |\vec{e}_{-1}\rangle$. Par exemple :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_x |\vec{e}_{+1}\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{M}_x [|\vec{e}_x\rangle + i|\vec{e}_y\rangle] = -\frac{i}{\sqrt{2}} |\vec{e}_z\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} |\vec{e}_0\rangle \\ \mathcal{M}_x |\vec{e}_0\rangle &= \mathcal{M}_x |\vec{e}_z\rangle = -|\vec{e}_y\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} [|\vec{e}_{+1}\rangle + |\vec{e}_{-1}\rangle] \\ \mathcal{M}_x |\vec{e}_{-1}\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} \mathcal{M}_x [|\vec{e}_x\rangle - i|\vec{e}_y\rangle] = -\frac{i}{\sqrt{2}} |\vec{e}_0\rangle \end{aligned} \tag{VI-41}$$

de sorte que \mathcal{M}_x devient, dans la nouvelle base :

$$\tilde{\mathcal{M}}_x = -\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{VI-42}$$

Cette expression, multiplié par $i\hbar$, redonne bien la matrice de J_x écrite en (VI-30). Un calcul tout à fait analogue permettrait de vérifier la même propriété pour $\tilde{\mathcal{M}}_y$ et J_y . Pour finir, par exponentiation, on passe des rotations infinitésimales aux rotations finies et on vérifie ainsi que, dans la base $|\vec{e}_{+1}\rangle, |\vec{e}_0\rangle, |\vec{e}_{-1}\rangle$, les matrices de rotation ($R_{\vec{u}}(\phi)$) deviennent identiques aux matrices $R^{[j=1]}_{\vec{u}}(\phi)$.

Dans le cas où $j = 1$, notre construction générale des représentations irréductibles nous a donc fait retrouver tout simplement les matrices de rotation elles-mêmes [groupe $S0(3)$]. Il est alors clair que la représentation est fidèle (biunivocité de la correspondance) et qu'elle l'est au sens propre (non projective) : on produit des matrices (\mathcal{R}) correspond automatiquement le produit des matrices $R^{[j=1]}$. On a donc effectivement dans ce cas une représentation, d'où tous les facteurs de phase ont été éliminés.

b) Cas où $j = 1/2$
.....

D'emblée, nous avons vu plus haut que ce cas est plus délicat. Les matrices obtenues pour la représentation sont écrites en (VI-28). Ce sont des matrices du groupe $SU(2)$, comme le montre immédiatement la comparaison entre (III-76) et (VI-28), où ϕ joue le rôle du paramètre a . Comme le paramètre \vec{a} d'une rotation est effectivement égal à $\vec{u}\phi$, nous sommes conduits à associer à chaque rotation la matrice de $SU(2)$ associée à la même valeur du paramètre \vec{a} tel qu'il a été introduit au §B-3 du chapitre III pour obtenir (III-76). La difficulté qui se présente tient au fait que, pour obtenir le groupe $SU(2)$, \vec{a} doit varier pour chaque direction \vec{u} dans

un intervalle de longueur 4π [cf figure III-11] ; par contre, dans le groupe $R(3)$ des rotations un intervalle de longueur 2π est suffisant pour le paramètre ϕ [toute rotation d'angle 2π est la rotation identité]. Le fait que $SU(2)$ est "deux fois plus grand" que $R(3)$ est d'ailleurs directement visible par comparaison des figures V-3 et III-13. Dans ces conditions, quelle sera de façon précise la correspondance entre éléments de $R(3)$ et de $SU(2)$?

*(α) Un premier point de vue est de contraindre dans (VI-28) ϕ à rester dans un intervalle de longueur 2π (⁸) :

$$-\pi < \phi < +\pi \tag{VI-43}$$

On représente alors l'ensemble des rotations par la moitié de $SU(2)$: celle qui, sur la figure III-13, correspond à la sphère de gauche, centrée autour de la matrice unité. Ce sous-ensemble de $SU(2)$ est celui que nous avons noté $SU(2)_+$ dans le §B-3 du chapitre III. Il est alors impossible d'avoir de cette façon une représentation du groupe $R(3)$, puisque au sens strict, les matrices de représentation ne forment pas un groupe (ensemble non fermé sous l'effet de la multiplication). Prenons par exemple des rotations autour de Oz :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\vec{u}_z}^+(\phi_1) & \quad -\pi < \phi_1 < \pi \\ \mathcal{R}_{\vec{u}_z}^+(\phi_2) & \quad -\pi < \phi_2 < \pi \end{aligned} \tag{VI-44}$$

Elles correspondent respectivement d'après (VI-21) à :

$$\left(\mathcal{R} \left[\frac{1}{2} \right] (\phi_1) \right) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi_1/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi_1/2} \end{pmatrix} \tag{VI-45a}$$

et :

$$\left(\mathcal{R} \left[\frac{1}{2} \right] (\phi_2) \right) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi_2/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi_2/2} \end{pmatrix} \tag{VI-45b}$$

(⁸) Même en restreignant de cette façon le domaine accessible à ϕ , chaque rotation peut être décrite de deux façons : on change ϕ et \vec{u} ou leurs opposés. Ceci est sans conséquence puisque la matrice (VI-28) reste la même dans cette opération.

On a donc :

$$\left(R^{[1/2]}(\phi_1) \right) \left(R^{[1/2]}(\phi_2) \right) = \begin{pmatrix} e^{-i(\phi_1 + \phi_2)/2} & 0 \\ 0 & e^{i(\phi_1 + \phi_2)/2} \end{pmatrix} \quad (\text{VI-46})$$

Si $|\phi_1 + \phi_2| < 2\pi$, on obtient simplement de cette façon la matrice associée à la rotation produit d'angle $\phi_1 + \phi_2$. Par contre, si $|\phi_1 + \phi_2| \geq 2\pi$ [ce qui est parfaitement possible sans violer les inégalités (VI-44)], ce produit n'appartient pas à l'ensemble des matrices choisies. Il n'est donc pas possible que la rotation produit soit associée au produit des matrices $R^{[1/2]}$. En fait la rotation produit a, compte tenu de la convention (VI-37), un angle $\phi_1 + \phi_2 - \pi$; elle correspond donc à la matrice opposée à (VI-46) [matrice de $SU(2)$]. Ce résultat se généralise facilement au cas de deux rotations autour d'un même axe quelconque.

La même situation se présente si l'on compose deux rotations dont les axes sont différents. Lorsque l'on effectue le produit des matrices $R^{[1/2]}$ correspondantes, on peut, soit obtenir une matrice associée à un point de la sphère de gauche de la figure III-13, c'est-à-dire une matrice de l'ensemble $SU(2)_+$ de représentation, soit une matrice de la sphère de droite appartenant à $SU(2)_-$ [rappelons que cette sphère de droite est centrée autour du point associé à la matrice opposée de la matrice unité 2×2 ; de façon générale, les matrices de $SU(2)_+$ sont les opposées en signe celles de $SU(2)_-$]. Alors on montre (voir le complément de ce chapitre) que, dans le premier cas, la matrice $R^{[1/2]}$ ainsi obtenue est celle associée à la rotation produit ; dans le second, c'est son opposée (⁹).

Dans ce premier point de vue, on peut considérer qu'on a une représentation projective où les facteurs de phase $e^{i\xi}$ ne peuvent prendre que les deux valeurs discrètes ± 1 . Il existe un isomorphisme local entre les rotations et les matrices $R^{[1/2]}$: tant que l'une au moins des rotations est d'angle assez petite pour que le produit reste dans l'ensemble de représentation (trace positive), le produit des matrices correspond bien au produit des rotations. Mais, si l'on prend le groupe des rotations dans son ensemble, il est possible que ce soit l'opposé du

(⁹) Rappelons que les matrices de $SU(2)_+$ sont celles de traces positives, celles de $SU(2)_-$ [sphère de droite de la figure III-13] celles de traces négatives.

produit des matrices qui corresponde au produit des rotations.

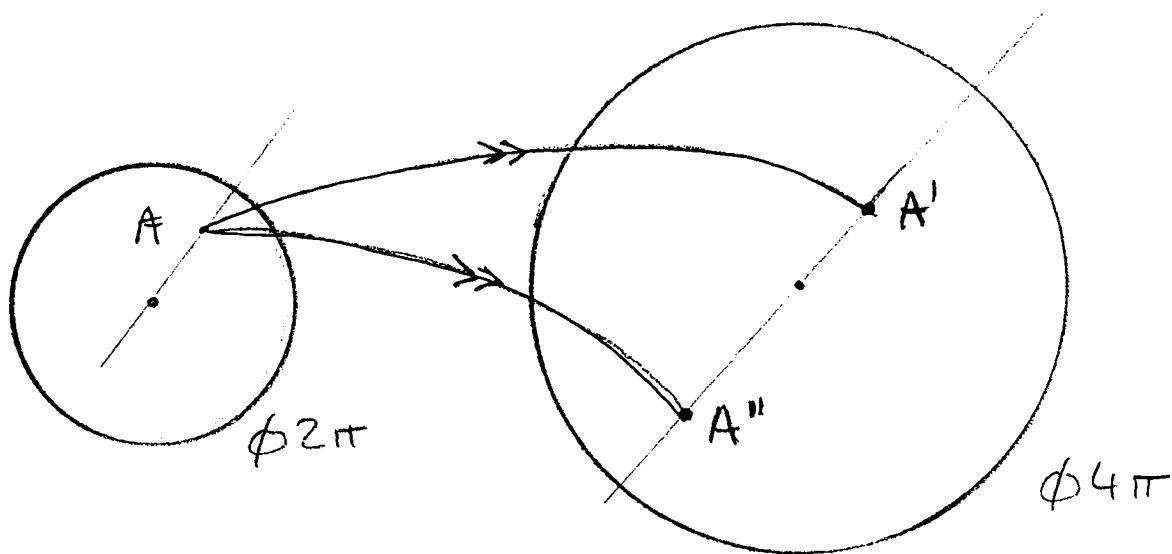
Remarque :

La situation particulière que nous obtenons n'est pas étonnante si l'on considère le raisonnement effectué dans les § 1 à 4. Nous n'avons utilisé que les propriétés de l'algèbre de Lie du groupe R_3 au voisinage d'une rotation donnée. Effectivement, nous aboutirons ainsi à un isomorphisme local entre matrices de représentation et rotations. Par contre, nous avons complètement perdu une propriété globale de R_3 , à savoir que deux rotations de même vecteur \vec{u} et d'angles ϕ qui tendent vers $+\pi$ et $-\pi$ tendent vers la même rotation (si l'on préfère, on a perdu le fait qu'une rotation d'angle 2π est la rotation identité).

*(β) Un second point de vue est d'associer à chaque rotation de R_3 non pas une, mais deux matrices de $SU(2)$: celle du point de vue précédent [matrice de $SU(2)_+$] et la matrice opposée [matrice de $SU(2)_-$]. Ces deux matrices sont obtenues si l'on prend dans (VI-23), l'angle ϕ et l'angle $\phi + 2\pi$. Ce second point de vue est schématisé sur la figure VI-1, où l'on voit qu'un point A (dont la position donne le paramètre \vec{a} associé à une rotation) est associé à deux points A' et A'' (de positions respectives \vec{a} et $\vec{a} \pm 2\pi \vec{a}/a$). On a alors une correspondance bivaluée entre éléments de R_3 et de $SU(2)$ [inversement, cette correspondance définit une "surjection" de $SU(2)$ dans R_3]. De cette façon, l'ensemble de représentation est la totalité du groupe $SU(2)$. De plus, au produit $\mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1$ de deux rotations correspond toujours le couple des deux matrices $\pm U_2 U_1$ obtenues en multipliant les matrices unitaires $\pm U_1$ et $\pm U_2$ associées respectivement à \mathcal{R}_1 et \mathcal{R}_2 . Ce deuxième point de vue est plus commode et c'est celui qui est généralement pris en mécanique quantique (¹⁰).

La possibilité d'une correspondance bivaluée entre les rotations et les matrices du $SU(2)$, tout en préservant localement un homomorphisme local entre les deux groupes, est liée à la topologie plus complexe de R_3 qui est 2-connexe alors que $SU(2)$ est simplement connexe (voir discussion du §A-2-c du chapitre V). Considérons en effet un chemin fermé homotope à zéro (cf chapitre III § A-1b) dans R_3 , partant du point A

(¹⁰) On n'a alors plus de représentation (même projective) de R_3 au sens envisagé jusqu'ici mais on peut, bien sûr, généraliser la notion de représentation à des matrices qui sont des fonctions multivaluées des éléments du groupe.



$R_{(3)} \equiv SO(3)$

Identité des points de la surface diamétralement opposés
 groupe 2-connexe

$SU(2)$

Identité de l'ensemble des points de la surface de la sphère (matrice $-\mathbb{1}$)
 groupe simplement connexe

Fig VI-1

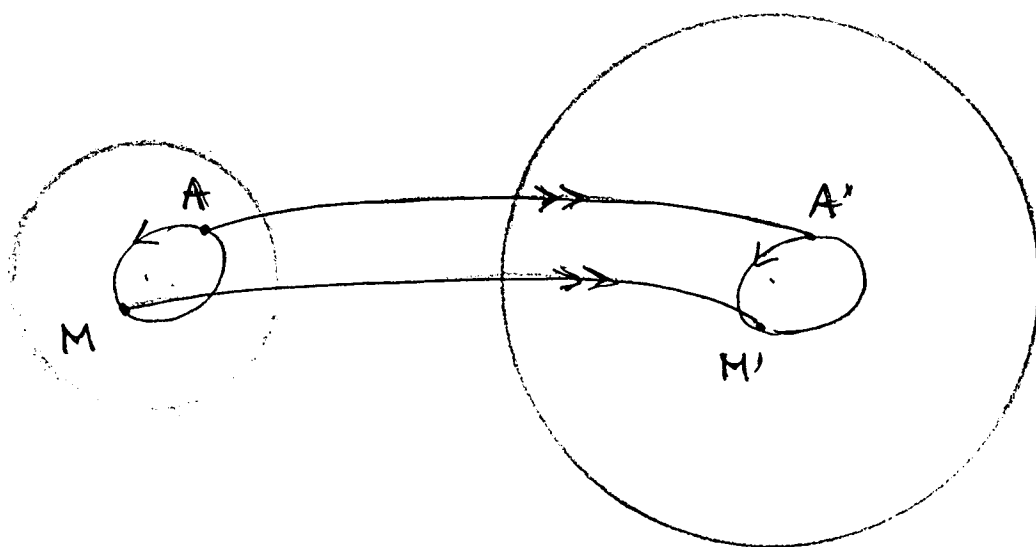
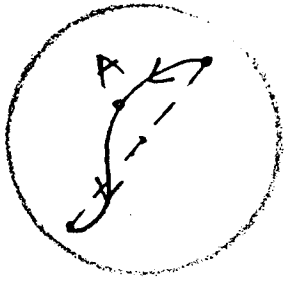
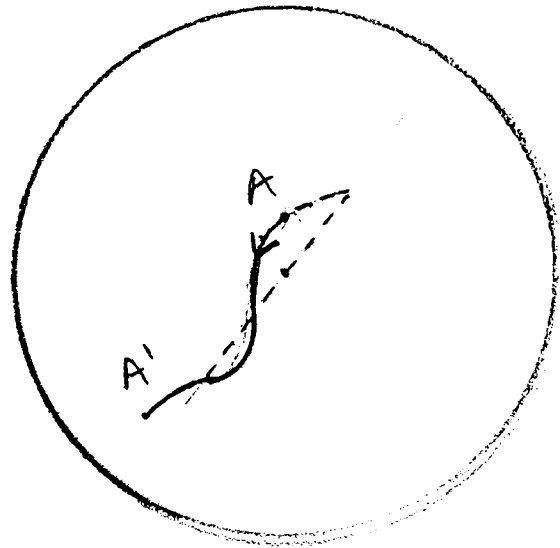


Fig VI-2

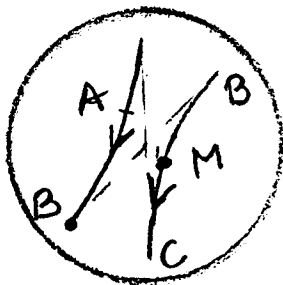


R(3)

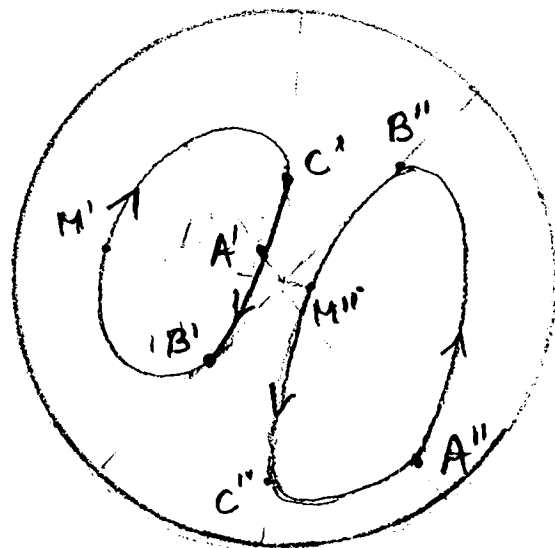


SU(2)

Fig VI-3



R(3)



SU(2)

Fig IV-4

(cf figure VI-2). Choisissons A' par exemple comme image de A et, par continuité, l'image M' de M . Lorsque le chemin se referme, et que M tend vers A , M' tend nécessairement vers A' (et non A'') : par continuité, on revient sur la même matrice de $SU(2)$ tant que le chemin suivi est homotope à zéro. En effet, un tel chemin peut être continûment déformé vers le chemin nul (point M restant constamment en A) et la continuité interdit à la matrice associée à la rotation d'effectuer un saut de la valeur initiale à la valeur opposée.

De façon générale, si l'on prend deux chemins fermés partant et aboutissant à A , et si ces chemins sont homotopes entre eux, on aboutit nécessairement par continuité à la même image de A (soit A' , soit A''). On comprend alors bien comment aboutir en A'' au lieu de A' : il faut prendre, comme sur la figure VI-3, un chemin fermé non homotope à zéro (mais à un ensemble de rotations autour d'un axe où l'angle varie de 2π). L'image du chemin fermé dans R_3 est alors un chemin ouvert dans $SU(2)$. On comprend également que la structure 2-connexe de R_3 nous interdisait a priori des représentations 3, 4, ... -valuées.

Sur la figure VI-4, on montre comment l'image continue d'un chemin dans R_3 homotope à zéro mais plus complexe (passant 4 fois par des rotations d'angle π) est un chemin fermé dans $SU(2)$ [et donc un chemin homotope à zéro, puisque $SU(2)$ est simplement connexe].

Physiquement, pouvons-nous accepter ces représentations bivaluées en mécanique quantique ? Un facteur de phase globale du vecteur d'état ne modifiant pas les propriétés physiques du vecteur d'état, il n'est pas gênant d'associer deux opérateurs opposés à la même opération géométrique. Compte tenu de la discussion topologique précédente, on peut aller un peu plus loin et préciser dans quel cas on prendra comme matrice de rotation la matrice U appartenant à $SU(2)_+$ [angle ϕ compris entre $-\pi$ et $+\pi$ dans (VI-28)], dans quel cas la matrice $-U$ de $SU(2)$. On raisonne par continuité et on part du fait que U est la matrice identité 2×2 si aucune opération n'est effectuée sur le système. Partant d'une position initiale donnée, le système est progressivement tourné pour aboutir à une position finale ; à ce processus est associé un chemin dans R_3 , chemin qui dépend, non seulement des positions initiale et finale, mais aussi des positions intermédiaires (à chaque point du chemin est associé une rotation différente). Supposons pour commencer que le chemin est fermé (le système physique revient à sa position initiale). Si le chemin est homotope à zéro (il est

continûment déformable en un chemin nul) on associe la matrice identité au passage du ket du système dans la position initiale à celui dans sa position finale. Au contraire, si le chemin n'est pas homotope à zéro (par exemple : suite de rotations autour d'un axe dont l'angle croît de 0 à 2π), on associe l'opposée de la matrice identité. De façon générale, on associera une matrice U obtenue en faisant $-\pi < \phi < +\pi$ dans (VI-28) [matrice de $SU(2)_+$] à tous les processus où le système passe d'une position initiale à une position finale par une suite de rotations dont aucune n'a un vecteur \vec{a} de longueur π ; la même matrice sera également prise pour tous les processus associés à des chemins dans $R(3)$ équivalents aux premiers (perçant la sphère de rayon π qui limite le domaine de \vec{a} un nombre pair de couples de points diamétralement opposés). Par contre, pour les processus associés à l'autre classe de chemin de mêmes extrémités (perçant la sphère en un nombre impair de couples), on prendra la matrice opposés [matrice de $SU(2)$].

Pour bien illustrer que le vecteur d'état dépend alors, non seulement des positions initiale et finale du système physique, mais aussi de la façon dont il y est arrivé, prenons le cas très simple d'une rotation autour d'un axe donné. Si l'angle ϕ croît de 0 à 2π , la phase du vecteur d'état est multipliée par -1 ; s'il croît de 0 à 4π , par $+1$; s'il croît de 0 à 6π , par -1 , etc. Un facteur de phase globale du vecteur d'état ne changeant pas les propriétés physiques du système, l'effet qui vient d'être décrit ne joue aucun rôle dans la plupart des expériences. Cependant, il peut parfaitement apparaître dans certaines expériences d'interférences, comme nous allons le voir (§ B-4).

Aucun principe physique fondamental n'est donc violé si l'on accepte les représentations bivaluées obtenues pour $j = 1/2$ et, en particulier, la structure 2-connexes de $R(3)$ fait que $|\psi\rangle$ ne subit bien que des variations continues si l'on fait tourner le système physique. Il se trouve qu'effectivement cette possibilité mathématique du formalisme de la mécanique quantique est utilisée par la Nature. En fait, de nombreuses particules ont un spin $1/2$: électron, proton, neutron, par exemple ⁽¹¹⁾.

⁽¹¹⁾ Historiquement, cette possibilité de moments cinétiques demi-entiers a donné lieu à des controverses amusantes durant les débuts de la mécanique quantique. Lorsque Uhlenbeck et Goudsmit ont avancé l'hypothèse du spin de l'électron pour expliquer certaines particularités du spectre de l'hydrogène, (suite de la remarque page suivante)

c) Cas où j est quelconque

Les résultats que nous avons obtenus en a) et b) se généralisent : les valeurs entières de j conduisent à des "vraies" représentations du groupe des rotations, les valeurs demi-entières à des représentations bivaluées.

En ce qui concerne les valeurs entières de j , on peut s'appuyer sur les propriétés des harmoniques sphériques pour vérifier ce résultat. Dans ce but, on peut revenir à la formule (V-115) qui donne l'expression du moment cinétique d'une particule sans spin et utiliser, au lieu des composantes cartésiennes x, y, z de \vec{r} , des coordonnées sphériques. On obtient alors :

$$L_z \Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (\text{VI-47})$$

et, de la même façon, on voit que les opérateurs L_x et L_y (ou $L_{\pm} = L_x \pm i L_y$) ont des expressions où interviennent les angles θ et ϕ , mais pas r . Lorsqu'on recherche alors les fonctions propres communes à \vec{L}^2 et L_z , on obtient alors les fonctions du type $f(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$, où $f(r)$ est quelconque et $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ désigne l'harmonique sphérique ℓ, m , associée aux valeurs propres $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ de \vec{L}^2 et $m\hbar$ de L_z [voir par exemple le § D du chapitre VI et le complément A-VI de la référence (13) pour une démonstration des propriétés que nous allons énoncées]. Les $(2\ell + 1)$ harmoniques sphériques associées à une même valeur de ℓ et aux valeurs $m = \ell, \ell - 1, \ell - 2, \dots, -\ell$, se transforment les unes dans les autres par rotation et fournissent donc la base d'une représentation du groupe des rotations. Comme les opérateurs L_+ et L_- permettent de passer de Y_{ℓ}^m à Y_{ℓ}^{m-1} et Y_{ℓ}^{m+1} respectivement, cette représentation est irréductible. Par suite, les représentations associées à des valeurs entières de j sont nécessairement ces représentations irréductibles, et ce sont donc des vraies représentations de $R(3)$ (ce sont d'ailleurs les seules, comme nous allons le voir).

(suite de la remarque de la page précédente) :

de très vives réticences ont été exprimées. En effet, la quantification des variables orbitales, toute récente, avait conduit au fait qu'un moment cinétique était nécessairement un multiple entier de \hbar . Si maintenant on ajoutait la valeur $\hbar/2$ on ouvrirait la voie aux valeurs $\hbar/3, \hbar/4, \dots, \hbar/n$, ce qui revenait à faire tendre \hbar vers zéro et renoncer à toute quantification ! On sait aujourd'hui que la structure 2-connexe de $R(3)$ n'autorise pas des fractions de \hbar inférieures à $1/2$.

Pour les représentations associées à des valeurs demi-entières de j , il est facile de vérifier qu'elles ne peuvent être que projectives (ou bivaluées suivant le point de vue adopté). Raisonnons en effet comme nous l'avons fait au début du § b précédent et considérons les rotations d'angle ϕ autour de Oz . Il est facile de voir qu'il leur correspond des matrices diagonales [dans la base $\{|j, m\rangle\}$] où les éléments valent $e^{im\phi}$ avec m demi-entier. Si ϕ est astreint à être compris entre $-\Pi$ et $+\Pi$, on obtient donc des matrices de représentation qui ne forment pas un groupe, et tous les raisonnements faits pour $j = 1/2$ se transposent au cas où j est demi-entier quelconque. Il faudrait bien sûr reprendre ces raisonnements en détail, en particulier pour examiner ce qui se produit pour des rotations d'axes différents, mais nous ne donnerons pas ici la démonstration. En effet, dans la théorie générale du couplage des moments cinétiques, au § C, nous verrons qu'un moment cinétique demi-entier j peut être obtenu par couplage d'un moment $1/2$ et d'un autre $j - 1/2$, entier (c'est-à-dire par produit tensoriel d'une vraie représentation et d'une représentation bivaluée). La propriété annoncée découle alors simplement de celles démontrée au § b précédent.

B - PARTICULES DE SPIN 1/2 ; SPINEURS

Comme nous l'avons dit dans l'introduction de ce chapitre, nous allons dans ce paragraphe prolonger les résultats obtenus au § c du chapitre V : partant de considérations générales sur les transformations géométriques que peut subir un système physique, nous allons construire un espace des états & où le groupe de ces transformations peut être représenté linéairement. Toutefois, au lieu de choisir la possibilité la plus simple possible comme au chapitre V, nous allons envisager le cas qui suit immédiatement dans l'ordre de complexité croissante. Nous obtiendrons ainsi l'espace des états d'une particule de spin $1/2$.

1 - Construction de l'espace des états

Comme au chapitre V, nous supposons qu'il existe un opérateur position \vec{R} du système ; \vec{R} symbolise trois opérateurs hermitiques X, Y et Z . Cependant, ici, nous ne nous limiterons pas au cas où X, Y, Z forment un E.C.O.C. Une base orthonormée de vecteurs propres à ces trois opérateurs sera la base des vecteurs :

$$|x, y, z, \mu\rangle = |\vec{r}, \mu\rangle \quad (\text{VI-48})$$

où μ est un indice qui permet de distinguer entre eux les divers vecteurs propres associés aux mêmes valeurs propres x, y, z . Pour le moment, les valeurs que peut prendre le nombre quantique μ ne sont pas précisées (elles peuvent a priori être discrètes ou continues).

En (V-98) nous avons défini la phase relative des kets $|\vec{r}\rangle$ à partir de l'action des opérateurs de translation $T(\vec{0}, \vec{\ell})$. Nous allons procéder ici de la même façon et définir le ket $|\vec{r}, \mu\rangle$ par :

$$|\vec{r}, \mu\rangle = T(\vec{0}, \vec{\ell} = \vec{r})|\vec{r} = 0, \mu\rangle \quad (\text{VI-49a})$$

qui est la généralisation la plus simple de (V-98). Cette égalité définit, à partir des divers kets $|\vec{r}, \mu\rangle$ associés à $\vec{r} = \vec{0}$, les kets $|\vec{r}, \mu\rangle$ en tout point ; en particulier, elle implique ⁽¹²⁾ que le nombre de valeurs accessibles à μ et les valeurs elles-mêmes sont indépendantes du point \vec{r} considéré (homogénéité de l'espace). De façon analogue à (V-99), on obtient facilement :

$$|\vec{r}, \mu\rangle = T(\vec{0}, \vec{\ell} = \vec{r} - \vec{r}')|\vec{r}', \mu\rangle \quad (\text{VI-49b})$$

de sorte que l'origine $\vec{r} = 0$ ne joue aucun rôle privilégié dans la définition de la base $\{|\vec{r}, \mu\rangle\}$.

On peut alors considérer que l'espace des états \mathcal{E} engendré par cette base est le produit tensoriel d'un espace $\mathcal{E}_{\vec{r}}$, engendré par les kets $\{|\vec{r}\rangle\}$, et d'un espace engendré par les $\{|\mu\rangle\}$ que nous noterons \mathcal{E}_μ :

$$\begin{aligned} |\vec{r}, \mu\rangle &= |\vec{r}\rangle \otimes |\mu\rangle \\ |\vec{r}\rangle &\in \mathcal{E}_{\vec{r}} & |\mu\rangle &\in \mathcal{E}_\mu \\ \mathcal{E} &= \mathcal{E}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{E}_\mu \end{aligned} \quad (\text{VI-50})$$

La relation (VI-49b) implique que l'indice μ est invariant sous l'action de tout opérateur de translation, c'est-à-dire de toute composante de \vec{P} . Donc, par définition, \vec{P} est un opérateur qui n'agit pas dans \mathcal{E}_μ , mais seulement dans $\mathcal{E}_{\vec{r}}$. En d'autres termes, nous avons postulé que, dans \mathcal{E}_μ , on a une représentation du groupe des translations qui est la représentation

⁽¹²⁾ L'unitarité des opérateurs T entraîne que, si les kets $|\vec{r} = \vec{0}, \mu\rangle$ associés aux diverses valeurs de μ sont orthogonaux, il en est de même des kets $|\vec{r}, \mu\rangle$.

triviale (matrice identité $n_i \times n_i$ où n_i est la dimension de \mathfrak{E}_i). Les observables agissant dans \mathfrak{E}_i seulement sont toutes invariantes par translation, et μ apparaît comme un indice relatif à des variables internes du système.

Si nous voulons que les variables internes du système ne soient pas invariantes dans tout déplacement, nous devons prendre pour le groupe $R(3)$ une représentation non triviale. Une représentation quelconque étant décomposable en somme directe de représentations irréductibles nous allons imposer, toujours guidés par un critère de simplicité maximale, à la représentation du groupe $R(3)$ dans \mathfrak{E}_i d'être irréductible. Nous savons alors qu'elle a nécessairement une dimension $(2j + 1)$ où j est entier ou demi-entier (si l'on accepte les représentations bivaluées comme nous avons été conduits à le faire au § A précédent). L'indice μ peut alors prendre $2j + 1$ valeurs discrètes ; nous supposerons que ce sont celles :

$$\mu = j, j - 1, \dots - j \quad (\text{VI-51})$$

qui correspondent aux valeurs de m pour une base standard (un simple changement de base permet toujours de se ramener à ce cas). Si l'opérateur qui engendre les rotations infinitésimales dans \mathfrak{E}_i est noté \vec{S} (nous réservons \vec{J} pour l'opérateur qui engendre ces rotations dans l'espace total \mathfrak{E}), on aura donc dans l'espace \mathfrak{E}_i des variables internes :

$$\begin{aligned} S_z |\mu\rangle &= \mu \hbar |\mu\rangle \\ S_{\pm} |\mu\rangle &= \hbar \sqrt{S(S+1) - \mu(\mu \pm 1)} |\mu \pm 1\rangle \end{aligned} \quad (\text{VI-52a})$$

où S_x, S_y et S_z sont les composantes de \vec{S} et $S_{\pm} = S_x \pm i S_y$ [le nombre quantique j a été remplacé par S , de façon à réserver la notation $j(j+1)\hbar^2$ aux valeurs propres de \vec{J}^2]. Dans l'espace total \mathfrak{E} , les relations deviennent :

$$\begin{aligned} S_z |\vec{r}, \mu\rangle &= \mu \hbar |\vec{r}, \mu\rangle \\ S_{\pm} |\vec{r}, \mu\rangle &= \hbar \sqrt{S(S+1) - \mu(\mu \pm 1)} |\vec{r}, \mu \pm 1\rangle \end{aligned} \quad (\text{VI-52b})$$

puisque, par hypothèse, \vec{S} n'agit pas dans l'espace $\mathfrak{E}_{\vec{r}}$.

A partir de maintenant, nous appellerons variables orbitales (ou externes) du système celles qui agissent dans $\mathfrak{E}_{\vec{r}}$, et variables de spin (ou internes) celles qui agissent dans \mathfrak{E}_i . La dénomination "spin" (de l'anglais, tourner sur soi-même) provient de ce que l'opérateur \vec{S} , que nous appellerons d'ailleurs spin du système, est un opérateur de rotation des variables internes du système. Ce dernier rappelle donc la rotation d'une toupie sur

elle-même dont le spin serait le moment angulaire interne. Cette analogie classique doit cependant être maniée avec prudence, car le spin est de nature quantique (cf § 4 à la fin de ce § B).

2 - Vecteur d'état de la particule

Soit $|\psi\rangle$ le vecteur d'état du système. Il revient au même de se donner $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ ou ses composantes dans la base $\{|\vec{r}, \mu\rangle\}$:

$$\psi_\mu(\vec{r}) = \langle \vec{r}, \mu | \psi \rangle \tag{VI-53}$$

L'état du système est défini, non par la donnée d'une fonction d'onde $\psi(\vec{r})$, mais par celle de $(2s + 1)$ fonctions $\psi_\mu(\vec{r})$ [où $\mu = S, S - 1, \dots - S$].

Nous allons raisonner dans la suite en prenant le cas où $S = 1/2$ (le cas $S = 0$ se ramène immédiatement à celui d'une particule sans spin, déjà étudié). La généralisation à des valeurs plus élevées de S se fait sans difficultés. Le système est alors appelé "particule de spin 1/2" et nous noterons simplement + ou - les valeurs $\mu = + 1/2$ et $- 1/2$ respectivement. On regroupe souvent les deux fonctions d'ordre $\psi_\pm(\vec{r})$ dans une matrice colonne :

$$[\psi(\vec{r})] = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \tag{VI-54}$$

Un tel objet mathématique est appelé "spineur". En tout point de l'espace \vec{r} , un spineur est donc défini par la donnée de deux composantes ψ_+ et ψ_- . Ceci est très analogue à la donnée d'un champ de vecteurs $\vec{V}(\vec{r})$ dans l'espace, à ceci près qu'un vecteur \vec{V} a trois composantes et non deux (voir exercice ci-dessous). Le spineur adjoint sera la matrice ligne :

$$[\psi(\vec{r})]^\dagger = \left(\psi_+^*(\vec{r}) \quad \psi_-^*(\vec{r}) \right) \tag{VI-55}$$

Le produit de matrices ligne et colonne :

$$[\psi(\vec{r})]^\dagger [\psi(\vec{r})] = |\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 \tag{VI-56}$$

donne la densité de probabilité de trouver la particule au point \vec{r} , quel que soit son état de spin.

La base $\{|\vec{r}, \mu\rangle\}$ étant orthonormée, on a :

$$\langle \vec{r}, \mu | \vec{r}', \mu' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\mu\mu'} \tag{VI-57}$$

La relation de fermeture sur cette base s'écrit :

$$\int d^3r \sum_{\mu=+,-} |\vec{r}, \mu\rangle \langle \vec{r}, \mu| = \mathbb{1} \tag{VI-58}$$

De cette dernière égalité on déduit immédiatement que :

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \int d^3r \sum_{\mu=+,-} |\vec{r}, \mu\rangle \langle \vec{r}, \mu | \psi \rangle \\
 &= \int d^3r \{ \psi_+(\vec{r}) |\vec{r}, +\rangle + \psi_-(\vec{r}) |\vec{r}, -\rangle \}
 \end{aligned}
 \tag{VI-59}$$

De même, si l'on considère deux kets $|\phi\rangle$ et $|\psi\rangle$, on obtient facilement :

$$\begin{aligned}
 \langle \phi | \psi \rangle &= \int d^3r \{ \phi_+^*(\vec{r}) \psi_+(\vec{r}) + \phi_-^*(\vec{r}) \psi_-(\vec{r}) \} \\
 &= \int d^3r [\phi(\vec{r})]^\dagger [\psi(\vec{r})]
 \end{aligned}
 \tag{VI-60}$$

3 - Opérateurs

Dans $\mathfrak{E}_{\vec{r}}$, tous les résultats que nous avons obtenus au § C-1 du chapitre V restent valables : l'opérateur \vec{P} agit comme $(\hbar/i)\vec{\nabla}$, l'opérateur moment cinétique dans $\mathfrak{E}_{\vec{r}}$ est :

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}
 \tag{VI-61}$$

etc. Nous pouvons également appliquer les résultats du § C-2 du même chapitre, résultats obtenus en supposant que l'espace des états \mathfrak{E} a une structure de produit tensoriel $\mathfrak{E} = \mathfrak{E}_1 \otimes \mathfrak{E}_2$ [cf (V-135)]. Nous avons alors vu que l'impulsion totale et le moment cinétique total du système sont la somme des opérateurs correspondants dans les espaces \mathfrak{E}_1 et \mathfrak{E}_2 . Ici $\mathfrak{E}_{\vec{r}}$ joue le rôle de \mathfrak{E}_1 et \mathfrak{E}_i celui de \mathfrak{E}_2 ; de plus, nous avons déjà remarqué que les translations sont sans effet dans \mathfrak{E}_i , ce qui revient à considérer que l'opérateur impulsion est nul dans \mathfrak{E}_i . L'impulsion totale sera donc égale à l'opérateur \vec{P} défini dans $\mathfrak{E}_{\vec{r}}$, tandis que le moment cinétique total \vec{J} vaudra :

$$\begin{aligned}
 \vec{J} &= \vec{L} + \vec{S} \\
 &= \vec{R} \times \vec{P} + \vec{S}
 \end{aligned}
 \tag{VI-62}$$

L'opérateur de rotation $R_{\vec{u}}(\phi)$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
 R_{\vec{u}}(\phi) &= e^{-i\phi J_{\vec{u}}/\hbar} \\
 &= e^{-i\phi (L_{\vec{u}} + S_{\vec{u}})/\hbar} \\
 &= e^{-i\phi L_{\vec{u}}/\hbar} e^{-i\phi S_{\vec{u}}/\hbar}
 \end{aligned}
 \tag{VI-63}$$

Or :

$$e^{-i\phi L_{\vec{u}}/\hbar} |\vec{r}\rangle = |\vec{r}'\rangle \quad \text{avec } \vec{r}' = \mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\vec{r}
 \tag{VI-64a}$$

et :

$$\begin{aligned}
 e^{-i\phi S_{\vec{u}}/\hbar} |\mu\rangle &= \sum_{\mu'} \langle \mu' | e^{-i\phi S_{\vec{u}}/\hbar} | \mu \rangle |\mu'\rangle \\
 &= \sum_{\mu'} \left(R_{\vec{u}}^{[1/2]}(\phi) \right)_{\mu'\mu} |\mu'\rangle
 \end{aligned}
 \tag{VI-64b}$$

où les $R_{\vec{u}}^{[1/2]}{}_{\mu'\mu}$ ont été définis en (VI-20b) et (VI-28). En combinant ces égalités, on obtient :

$$R_{\vec{u}}(\phi) |\vec{r}, \mu\rangle = \sum_{\mu'} \left(R_{\vec{u}}^{[1/2]}(\phi) \right)_{\mu'\mu} |\vec{r}', \mu'\rangle \quad (\text{VI-65})$$

La notation $[\psi(\vec{r})]$ nous a permis de condenser une matrice colonne à deux composantes (spineur) représentant un ket ; de même, la notation $[[A]]$ désignera une matrice 2×2 agissant sur les matrices colonne associées aux spineurs. Prenons par exemple le cas où A n'agit que dans \mathcal{E}_i . On a alors :

$$\begin{aligned} A|\psi\rangle &= \int d^3r \{ \psi_+(\vec{r}) A |\vec{r}\rangle |+\rangle + \psi_-(\vec{r}) A |\vec{r}\rangle |-\rangle \} \\ &= \int d^3r |\vec{r}\rangle \{ \psi_+(\vec{r}) [A_{++}|+\rangle + A_{-+}|-\rangle] + \psi_-(\vec{r}) [A_{+-}|+\rangle + A_{--}|-\rangle] \} \end{aligned} \quad (\text{VI-66})$$

et, par suite, si $\psi'_+(\vec{r})$ et $\psi'_-(\vec{r})$ sont les composantes du spineur associé à $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$:

$$\begin{pmatrix} \psi'_+(\vec{r}) \\ \psi'_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{++} & A_{+-} \\ A_{-+} & A_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (\text{VI-67})$$

Ceci revient à écrire :

$$[[A]] = \begin{pmatrix} A_{++} & A_{+-} \\ A_{-+} & A_{--} \end{pmatrix} \quad (\text{VI-68})$$

Le fait que A n'agisse que dans \mathcal{E}_i se traduit par le fait que les éléments de $[[A]]$ n'agissent pas sur la variable \vec{r} . Par contre, si on avait pris un opérateur qui agit dans $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ seulement, comme P_x , on aurait obtenu :

$$P_x = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \partial/\partial x & 0 \\ 0 & \partial/\partial x \end{pmatrix} \quad (\text{VI-69})$$

qui est le produit d'un opérateur agissant sur \vec{r} par la matrice identité 2×2 . On peut aussi considérer des opérateurs mixtes agissant à la fois dans $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ et \mathcal{E}_i ; les opérateurs de rotations $R_{\vec{u}}(\phi)$ en font partie comme le montre (VI-63). On a :

$$|\psi'\rangle = R_{\vec{u}}(\phi) |\psi\rangle = \int d^3r \sum_{\mu=\pm} \psi_{\mu}(\vec{r}) R_{\vec{u}}(\phi) |\vec{r}, \mu\rangle \quad (\text{VI-70})$$

c'est-à-dire d'après (VI-65) :

$$|\psi'\rangle = \int d^3r \sum_{\mu\mu'} \psi_{\mu}(\vec{r}) \left(R_{\vec{u}}^{[1/2]} \right)_{\mu'\mu} |\vec{r}', \mu'\rangle \quad (\text{VI-71a})$$

avec :

$$\vec{r}' = \mathcal{Q}_{\vec{u}}(\phi) \vec{r} \quad (\text{VI-71b})$$

Pour finir, on obtient, en prenant \vec{r}' comme variable d'intégration et remplaçant \vec{r} par $\mathcal{R}^{-1}\vec{r}'$:

$$\begin{pmatrix} \psi'_+(\vec{r}) \\ \psi'_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (R^{1/2})_{++} \\ (R^{1/2})_{-+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (R^{1/2})_{+-} \\ (R^{1/2})_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathcal{R}^{-1}\vec{r}') \\ \psi_-(\mathcal{R}^{-1}\vec{r}') \end{pmatrix} \quad (\text{VI-72})$$

La formule que nous obtenons rappelle celle qui donne la rotation d'un champ de vecteurs : pour tourner le spineur, il faut considérer ses composantes au point $\mathcal{R}^{-1}\vec{r}$, puis effectuer des combinaisons linéaires de ces composantes.

Exercices :

(i) Ecrire les formules de transformation par rotation des composantes d'un champ de vecteur dans l'espace à 3 dimensions. En considérant des rotations infinitésimales, définir des opérateurs \vec{L} et \vec{S} de moment cinétique orbital et de spin. Ecrire explicitement les matrices de S_x , S_y et S_z et calculer $\vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$. Est-on ainsi conduit à une représentation irréductible du groupe des rotations ? Laquelle ? Montrer que l'analogie est parfaite avec une particule de spin $S = 1$.

[Voir Messiah, référence (2) de l'introduction, § 21 du chapitre XIII].

(ii) Pour une particule de spin 1/2, de charge q , soumise à l'action de potentiels vecteur \vec{A} et scalaire U , l'hamiltonien H (hamiltonien de Pauli) s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - q\vec{A}(\vec{R}; t) \right]^2 + qU(\vec{R}, t) - \frac{q}{m} \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{R}, t) \quad (\text{VI-73})$$

Ecrire la matrice $[[H]]$ 2×2 donnant l'action de H sur un spineur.

Montrer que :

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{\sigma} \cdot \left[\vec{p} - q\vec{A}(\vec{R}; t) \right] \right\}^2 + qU(\vec{R}, t) \quad (\text{VI-74})$$

où $\vec{\sigma} = 2 \vec{S}/\hbar$ (matrices de Pauli).

4 - Mise en évidence des propriétés particulières à un spin demi-entier

Au paragraphe A-5, nous avons remarqué et discuté une particularité importante des représentations associées à des moments j demi-entiers : les représentations obtenues sont bivaluées et, suivant la façon dont le système physique est tourné pour atteindre sa position finale, deux

vecteurs d'états différents $\pm |\psi\rangle$ peuvent être obtenus. En particulier, une rotation de 2π conduit à changer le signe de $|\psi\rangle$. Physiquement, deux kets $\pm |\psi\rangle$ conduisent à des résultats de mesure identiques (ils ne diffèrent que par un facteur de phase global) et un examen superficiel pourrait faire croire que cette curiosité mathématique est sans conséquence physique. Ce n'est pas exact, et, pour le comprendre, prenons une analogie avec l'Optique. On sait qu'un détecteur lumineux n'est pas sensible à la phase d'une onde optique : si on l'utilise pour mesurer l'intensité d'une onde qui a traversé un objet de phase d'indice inconnu, on ne peut pas savoir de quelle quantité la phase de l'onde optique a été modifiée par l'objet. On sait également comment on peut tourner cette difficulté, grâce aux expériences d'interférences : on superpose au champ de l'onde qui a traversé l'objet à étudier une onde de référence connue dont les phases relatives en divers points de l'espace sont connues. La figure d'interférence obtenue renseigne alors sur les variations de la phase de l'onde inconnue.

En mécanique quantique, des expériences d'interférences sont également possibles ; elles sont même à la base de cette discipline (principe de superposition linéaire, notion d'amplitude de probabilité, etc). L'idée de l'expérience est donc simple : on construit un interféromètre pour des particules de spin $1/2$ (électrons, protons, neutrons par exemple) et, sur un des bras de l'interféromètre, on impose une rotation des variables internes (spin) de $2n\pi$; après recombinaison des deux ondes, on examine la figure d'interférence en fonction de la valeur de n ⁽¹³⁾. Si la particule a un spin demi-entier et si $n = 1$ (ou, de façon générale, si n est impair), la phase de l'une des ondes qui interfèrent est changée de π (puisque $e^{i\pi} = -1$) et la figure d'interférence est modifiée en conséquence. Par contre, si $n = 2, 4, 6, \dots$, on obtient la même figure que si $n = 0$ (pas de rotation).

L'expérience a été effectuée avec des neutrons, dont la charge est nulle (pas de force de Lorentz, donc pas de déviation magnétique des trajectoires), mais dont le moment magnétique de spin non nul subit la précession de Larmor dans un champ magnétique \vec{B} . Effectivement, il a été

⁽¹³⁾ Si l'on envisage l'opération imposée au spin de la particule d'un point de vue global (modification du spineur en chaque point \vec{r}), on voit qu'elle est plus complexe que celle que donne un opérateur $e^{-i\phi S_u/\hbar}$. En effet, c'est une opération de rotation qui dépend de \vec{r} (position de la particule) et agit donc de façon corrélée sur les variables orbitales et de spin.

vérifié qu'une rotation de 2π change la figure d'interférence comme prévu. Cette spectaculaire expérience démontre qu'en physique, la rotation d'un objet de 2π peut modifier certaines de ses propriétés.

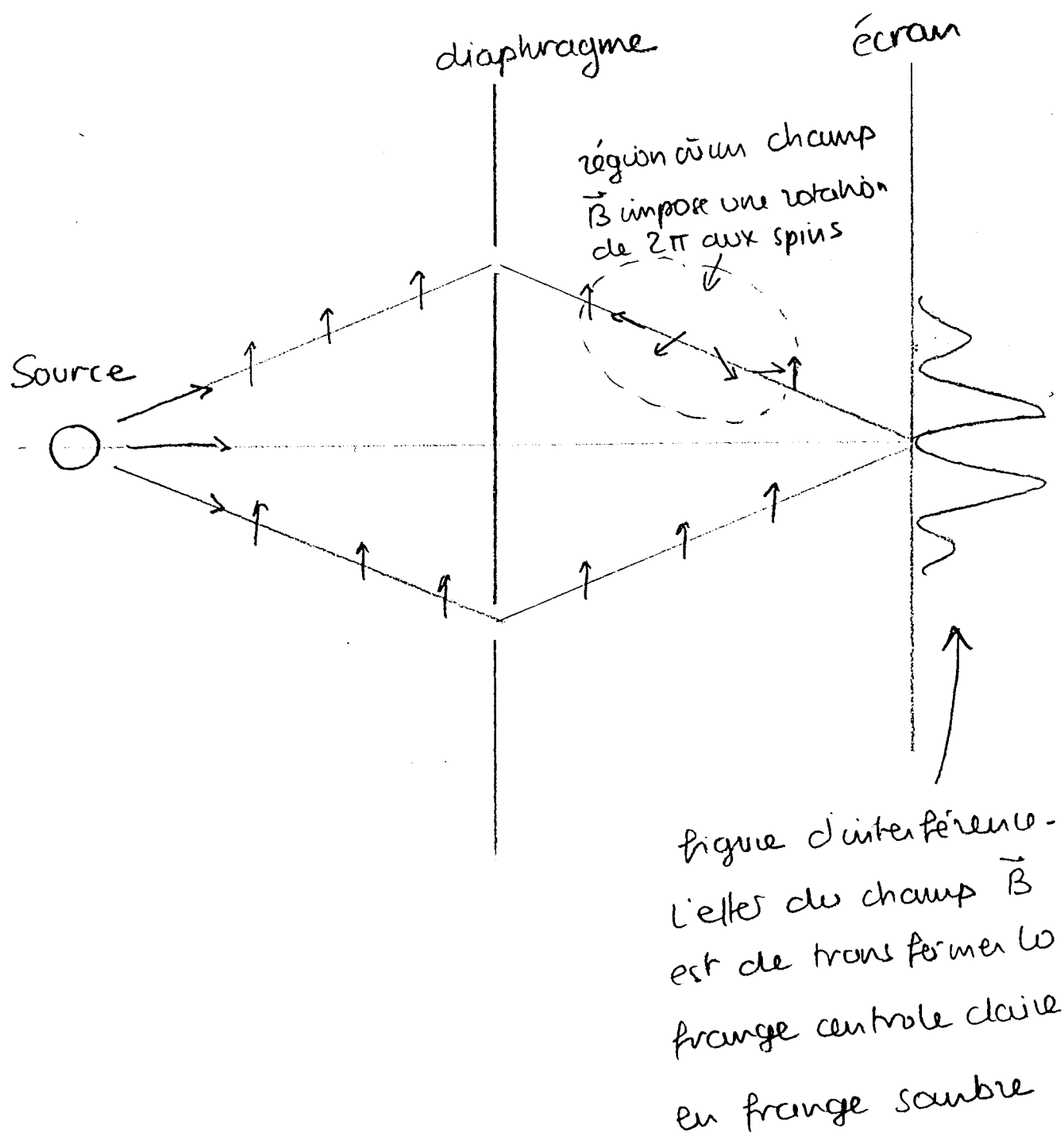


Fig VI-5

Remarques :

(i) Toute la théorie qui a été construite ne l'a été qu'en faisant intervenir les propriétés du groupe des déplacements géométriques, c'est-à-dire les relations de commutation entre 6 générateurs infinitésimaux. Une théorie plus complète devrait inclure les transformations dépendant du temps : changement de référentiel d'inertie, translation dans le temps. On aurait alors 10 générateurs infinitésimaux et il faudrait faire un choix entre les groupes de Galilée et de Poincaré (cf § C du chapitre III).

On verrait alors que la théorie que nous avons développée [utilisation des spineurs à 2 composantes de l'hamiltonien (VI-73)], que l'on désigne souvent par "théorie de Pauli" d'une particule de spin 1/2, ne satisfait pas à la symétrie d'invariance par transformation de Lorentz. Ce ne peut donc être qu'une théorie approchée, valable dans certaines limites. Il existe des façons plus élaborées de tenir compte de l'existence du spin d'une particule en écrivant des équations d'onde pour des spineurs à plusieurs composantes. L'équation de Dirac, où le nombre de composantes est 4, en est un exemple. Cependant, elle décrit à la fois l'électron et son antiparticule, (le positron) et conduit à d'importantes difficultés si on veut l'interpréter comme une équation qui décrit l'évolution d'un nombre fini de particules. Nous n'aborderons pas ces problèmes ici.

(ii) Il est clair que, pour construire comme nous l'avons fait l'espace des états \mathcal{E}_j , nous avons fait un certain nombre de choix arbitraires qui peuvent être remis en cause.

Par exemple, nous avons imposé que, dans \mathcal{E}_j , le groupe des rotations avait une représentation irréductible non triviale. On peut très bien en décider autrement et décider que les μ représentent les valeurs propres d'un opérateur H_j scalaire (invariant par rotation). L'observable H_j sera alors interprété comme l'énergie interne scalaire de la particule, énergie qui peut prendre autant de valeurs que μ a de valeurs différentes (cette fois également, il serait bon d'examiner cette construction dans le cadre, plus large, du groupe de Galilée ou de Lorentz).

On peut aussi prendre un espace \mathcal{E}_j de dimension infinie, par exemple isomorphe à \mathcal{E}_j^+ (dans ce cas, dans \mathcal{E}_j , on peut avoir toutes les représentations de valeurs j entières, comme dans \mathcal{E}_j^+). L'espace \mathcal{E}_j pourra alors être interprété comme celui de la coordonnée relative de deux

particules sans spin, \mathcal{E}_p étant celui du centre de masse. Le système étudié apparaît alors comme composé de deux particules (atome d'hydrogène où on ignore le spin de l'électron et celui du proton). Toutes ces possibilités peuvent être combinées à l'infini pour construire des systèmes aussi complexes qu'on peut le désirer.

C - COMPOSITION DES MOMENTS CINÉTIQUES

Dans le paragraphe B, précédent nous avons déjà rencontré le cas où l'espace des états du système étudié est le produit tensoriel de deux espaces où existent des représentations du groupe des rotations. Ce cas est très fréquent : si par exemple, nous considérons un système constitué de deux particules sans spin, d'espaces des états respectifs \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 , l'espace des états du système total est :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \quad (\text{VI-75})$$

Dans \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 , on peut définir des sous-espaces qui engendrent des représentations irréductibles du groupe des rotations $R(3)$. Par produit, on obtient dans \mathcal{E} des représentations de $R(3)$ qui sont des produits tensoriels des représentations individuelles. On peut se demander quelles sont les caractéristiques de ces nouvelles représentations ?

1 - Position du problème

Considérons donc deux systèmes physiques \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 (ou encore deux types différents de variables \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 d'un même système physique, comme par exemple variables orbitales et variables de spin). Les espaces des états \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 correspondants peuvent être décomposés en somme directe d'espaces irréductibles :

$$\mathcal{E}_1 = \sum_{\tau_1 j_1} \mathcal{E}(\tau_1, j_1) \quad \mathcal{E}_2 = \sum_{\tau_2 j_2} \mathcal{E}(\tau_2, j_2) \quad (\text{VI-76})$$

les bases standard correspondantes sont notées $\{|\tau_1, j_1, m_1\rangle\}$ et $\{|\tau_2, j_2, m_2\rangle\}$. L'espace total \mathcal{E} , obtenu en (VI-75) par produit tensoriel, s'écrit :

$$\mathcal{E} = \sum_{\tau_1 \tau_2 j_1 j_2} \mathcal{E}(\tau_1, \tau_2 ; j_1, j_2) \quad (\text{VI-77a})$$

où :

$$\mathcal{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2) = \mathcal{E}(\tau_1, j_1) \otimes \mathcal{E}(\tau_2, j_2) \quad (\text{VI-77b})$$

Ce sous-espace $\mathcal{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2)$ de \mathcal{E} est engendré par les kets :

$$|\tau_1\tau_2 ; j_1j_2 m_1m_2\rangle = |\tau_1j_1m_1\rangle \otimes |\tau_2j_2m_2\rangle \quad (\text{VI-77c})$$

où τ_1, τ_2, j_1, j_2 sont fixés tandis que chacun des indices m_1 et m_2 a $(2j_1+1)$ et $(2j_2+1)$ valeurs possibles. $\mathcal{E}(\tau_1\tau_2 ; j_1j_2)$ est invariant sous l'action de toute fonction de \vec{J}_1 et \vec{J}_2 , en particulier sous celle du moment cinétique total $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$.

L'opérateur associé à la rotation du système 1 d'un angle ϕ_1 autour de \vec{u}_1 et à celle du système 2 d'un angle ϕ_2 autour de \vec{u}_2 s'écrit :

$$R_{\vec{u}_1}^1(\phi_1) R_{\vec{u}_2}^2(\phi_2) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \phi_1 \vec{J}_1 \cdot \vec{u}_1 \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \phi_2 \vec{J}_2 \cdot \vec{u}_2 \right\} \quad (\text{VI-78a})$$

L'ensemble des opérateurs de ce type constitue un groupe, produit tensoriel de celui des rotations du système 1 autour de 0 par celui des rotations du système 2 autour du même point [les éléments de $R(3) \otimes R(3)$ dépendent de 6 paramètres continus]. Dans le sous-espace $\mathcal{E}(\tau_1, \tau_2 ; j_1, j_2)$, ces opérateurs sont représentés par les matrices d'éléments :

$$\begin{aligned} \langle \tau_1, j_1, m_1 ; \tau_2, j_2, m_2 | e^{-i \phi_1 \vec{J}_1 \cdot \vec{u}_1 / \hbar} e^{-i \phi_2 \vec{J}_2 \cdot \vec{u}_2 / \hbar} | \tau_1 j_1 m'_1 ; \tau_2 j_2 m'_2 \rangle \\ = \left(R^{[j_1]}_{\vec{u}_1}(\phi_1) \right)_{m_1 m'_1} \left(R^{[j_2]}_{\vec{u}_2}(\phi_2) \right)_{m_2 m'_2} \quad (\text{VI-78b}) \end{aligned}$$

On obtient les matrices produits tensoriels des $(R^{[j_1]})$ et $(R^{[j_2]})$ pour représenter le groupe produit.

Cette représentation est irréductible.

En effet, un sous-espace $\mathcal{E}(\tau_1, \tau_2 ; j_1, j_2)$ qui serait globalement invariant sous l'action de tous les opérateurs du groupe produit serait en particulier invariant sous l'influence des opérateurs infinitésimaux (associés à $\delta\phi_1$ et $\delta\phi_2$ quelconques) donc de toute composante de \vec{J}_1 ou \vec{J}_2 . Par suite, un tel sous-espace serait invariant sous l'action de $J_{1\pm}$ et de $J_{2\pm}$. Or, tout ket de la base $|\tau_1\tau_2 ; j_1j_2m_1m_2\rangle$ qui engendre $\mathcal{E}(\tau_1\tau_2 ; j_1j_2)$ peut être obtenu à partir d'un autre ket quelconque de la même base par actions répétées de $J_{1\pm}$ et de $J_{2\pm}$. De façon générale, tout ket $|\psi_{\tau_1\tau_2j_1j_2}\rangle$ de $\mathcal{E}(\tau_1\tau_2 ; j_1j_2)$ peut donner $|\tau_1\tau_2 ; j_1j_2j_1j_2\rangle$ par action des opérateurs J_{1+} et J_{2+} à une certaine puissance, puis par action répétée de J_{1-} et J_{2-} un ket quelconque de base. Donc, $\mathcal{E}(\tau_1\tau_2 ; j_1j_2)$ n'a pas de sous-espace invariant sous l'action du groupe produit tensoriel dont les éléments sont donnés en (VI-78).

Mais le problème qui nous intéresse ici est, non la rotation des deux sous-systèmes \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 de façon totalement indépendante, mais celle du système global constitué de \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 . Nous ne considérons donc que les

opérateurs (VI-78) où :

$$\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u} \quad \text{et} \quad \phi_1 = \phi_2 = \phi \quad (\text{VI-79})$$

ce qui donne les opérateurs :

$$\begin{aligned} R_{\vec{u}}(\phi) &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \phi \vec{J}_1 \cdot \vec{u} \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \phi \vec{J}_2 \cdot \vec{u} \right\} \\ &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \phi \vec{J} \cdot \vec{u} \right\} \end{aligned} \quad (\text{VI-80})$$

où :

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad (\text{VI-81})$$

Nous obtenons ainsi un sous-groupe du groupe produit tensoriel considéré précédemment. Il est clair que les matrices (VI-78a) donnent, lorsqu'on y porte les égalités (VI-79), une représentation du groupe d'opérateurs (VI-80). On a donc directement, dans l'espace $\mathfrak{E}_1 \otimes \mathfrak{E}_2$, de nouvelles représentations du groupe R_3 , de dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$:

$$\begin{aligned} R_{\vec{u}}(\phi) |\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2 m_1 m_2\rangle &= \\ \sum_{m'_1 m'_2} \left(R^{[j_1]}_{\vec{u}}(\phi) \right)_{m'_1 m_1} \left(R^{[j_2]}_{\vec{u}}(\phi) \right)_{m'_2 m_2} |\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2 m'_1 m'_2\rangle \end{aligned} \quad (\text{VI-82})$$

Les éléments de matrice de ces représentations sont données par :

$$\left(T_{\vec{u}}(\phi) \right)_{m'_1 m'_2 ; m_1 m_2} = \left(R^{[j_1]}_{\vec{u}}(\phi) \right)_{m'_1 m_1} \left(R^{[j_2]}_{\vec{u}}(\phi) \right)_{m'_2 m_2} \quad (\text{VI-83})$$

La question qui se pose alors est : cette représentation est-elle irréductible ? La réponse n'est pas évidente car, cette fois, le problème n'est plus de diagonaliser simultanément par blocs tous les opérateurs (VI-78a) [nous avons vu que c'est impossible] mais seulement ceux qui satisfont la relation (VI-79). Si on peut réduire cette représentation, c'est qu'il existe une autre base de $\mathfrak{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2)$ où :

$$\left(R_{\vec{u}}(\phi) \right) = \begin{pmatrix} \text{diagonal blocks} & & & 0 \\ & \text{diagonal blocks} & & \\ & & \text{diagonal blocks} & \\ 0 & & & \text{diagonal blocks} \end{pmatrix} \quad (\text{VI-84})$$

$\mathfrak{E}(\tau, J)$

avec :

$$\mathfrak{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2) = \sum_{\tau, J} \mathfrak{E}(\tau, J) \quad (\text{VI-85})$$

[nous simplifions la notation $\mathfrak{D}(\tau_1\tau_2 ; \tau J)$, qui serait plus complète, en $\mathfrak{D}(\tau, J)$].

Nous allons voir qu'une telle décomposition est effectivement possible. Le problème sera alors de déterminer quelles sont les représentations qui apparaissent (caractérisées par les valeurs de J), de savoir combien de fois chaque valeur de J apparaît, comment faire le changement de base, etc.

2 - Réduction de la représentation produit

Comme nous l'avons déjà fait à plusieurs reprises, nous passerons rapidement sur les démonstrations de ce paragraphe, qui figurent dans les cours de mécanique quantique élémentaire [voir par exemple la référence (13) citée dans l'introduction, chapitre X, § C].

a) Valeurs propres de \vec{J}^2 et kets $|J, M\rangle$

Il apparaît dès l'abord que la représentation produit est en général réductible. En effet, si elle ne l'était pas, on aurait une seule valeur de J possible telle que $2J + 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ et chaque valeur propre M de l'opérateur :

$$J_z = J_{1z} + J_{2z} \quad (\text{VI-86a})$$

serait réalisée une fois et une seule (entre $+J$ et $-J$). Or, (sauf si ou j_1 ou j_2 est nul), on peut trouver des combinaisons différentes de m_1 et m_2 conduisant à la même somme :

$$M = m_1 + m_2 \quad (\text{VI-86b})$$

Le même raisonnement donne facilement les valeurs de J possibles. A toute représentation irréductible dans $\mathfrak{D}(\tau, J)$ est associée une fois et une seule toute valeur de M égale à $J, J - 1, J - 2, \dots, -J$. Par exemple, cette remarque entraîne que la valeur $J = j_1 + j_2$ est réalisée, et une seule fois : ceci provient de l'existence d'un ket et d'un seul tel que $M = m_1 + m_2 = j_1 + j_2$. Pour la valeur $M = j_1 + j_2 - 1$, elle est dégénérée deux fois [$m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2$ ou $m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1$]. La valeur maximale de $J = j_1 + j_2$ donnant lieu à un ket où $M = j_1 + j_2 - 1$, il existe nécessairement la valeur $J = j_1 + j_2 - 1$. Le raisonnement se poursuit de même et on obtient le résultat bien connu. Les valeurs possibles pour J sont :

$$J = \begin{cases} j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 - 1 \\ j_1 + j_2 - 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ |j_1 - j_2| + 1 \\ |j_1 - j_2| \end{cases} \quad (\text{VI-87})$$

Chaque valeur de J n'étant réalisée qu'une seule fois, l'indice τ est en fait inutile ⁽¹⁴⁾. On vérifie que la somme des dimensions des espaces $\mathfrak{E}(J)$ est bien égale à celle de l'espace de départ :

$$\sum_{J=|j_1 - j_2|}^{|j_1 + j_2|} (2J + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (\text{VI-88})$$

Nous voyons donc que J_2 et J_z forment un E.C.O.C. dans $\mathfrak{E}(\tau_1\tau_2 ; j_1j_2)$. Nous avons déjà l'ensemble des deux opérateurs J_{1z} et J_{2z} . Comment passer de la base $|\tau_1\tau_2 ; j_1j_2m_1m_2\rangle$ associée au second E.C.O.C. (à partir de maintenant, nous noterons les kets $|j_1j_2m_1m_2\rangle$, ignorant des indices qui sont devenus inutiles) à celle $|J, M\rangle$ associée au premier ?

Le raisonnement effectué plus haut montre qu'on peut poser :

$$|J = j_1 + j_2, M = m_1 + m_2\rangle = |j_1, j_2, m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle \quad (\text{VI-89})$$

Par action de :

$$J_- = J_{1-} + J_{2-} \quad (\text{VI-90})$$

on construit ensuite tous les autres kets :

$$|J = j_1 + j_2, M\rangle$$

de la même "famille" repérée par la valeur $j_1 + j_2$ de J. On obtient ainsi les $2j_1 + 2j_2 + 1$ premiers kets de la nouvelle base qui donne $\mathfrak{E}(J = j_1 + j_2)$.

On raisonne ensuite dans le supplémentaire de ce sous-espace, où la valeur propre $M = j_1 + j_2 - 1$ est réalisée une seule fois (non dégénérée), au lieu de deux fois dans l'espace initial. Le raisonnement est alors exactement le même, le seul problème qui se pose étant celui

⁽¹⁴⁾ Il se trouve que, dans le cas du groupe des rotations, la décomposition d'une représentation produit tensoriel de représentation irréductible ne fait jamais apparaître plus d'une fois chaque représentation irréductible. Ce n'est pas toujours le cas pour un groupe quelconque.

du choix de la phase d'un des kets de base (l'action de J_{\pm} fixant ensuite celle des autres). Par convention, on pose :

$$\langle j_1 j_2 j_1 - j_1 | J J \rangle \text{ réel } > 0 \quad (\text{VI-91})$$

Il est clair que le raisonnement est récurrent ; de cette façon, on obtient tous les kets $|J, M\rangle$.

Pour résumer les résultats obtenus, nous avons obtenu la décomposition (VI-85) du sous-espace $\mathfrak{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2)$ sous la forme :

$$\mathfrak{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2) = \sum_{J = |j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} \mathfrak{E}(J) \quad (\text{VI-92a})$$

Chaque $\mathfrak{E}(J)$ est engendré par les $2J + 1$ kets $|J, M\rangle$ de la base standard associés à la valeur correspondante de J et à $M = J, J - 1, J - 2, \dots -J$. Le fait que l'indice τ de (VI-85) est inutile tient au fait que, dans la décomposition de la représentation produit tensoriel (VI-83), il se trouve que chaque valeur de J permise apparaît une seule fois. De façon symbolique, on peut écrire :

$$(R^{[j_1]}) \otimes (R^{[j_2]}) = \sum_{J = |j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} (R^{[J]}) \quad (\text{VI-92b})$$

b) Coefficients de Clebsch-Gordan

Les coefficients de Clebsch-Gordan sont, par définition, les produits scalaires :

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M \rangle$$

Ce sont les $[(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)]^2$ coefficients d'une matrice unitaire de changement de base (la matrice est en fait réelle et donc orthogonale).

(i) Par construction, ces coefficients sont totalement indépendants de la nature du système physique considéré, ainsi que de τ_1 et τ_2 : ils traduisent des propriétés du groupe $R(3)$ des rotations.

(ii) Ils sont réels :

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M \rangle = \langle J M | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \quad (\text{VI-93})$$

(cette propriété vient de ce que les coefficients qui apparaissent par action de J_{\pm} , J_Z sont réels).

(iii) Règles de sélection :

$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$ ne peut être non-nul que si :

. $M = m_1 + m_2$

. $|j_1 + j_2| \geq J \geq |j_1 - j_2|$ (règle du triangle cf figure VI-6)

. J est entier si j_1 et j_2 sont tous deux, soit entiers, soit demi-entiers.

. J est demi-entier si un des deux nombres quantiques (seulement) est demi-entier.

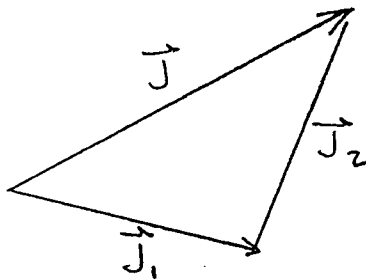


fig VI.6.

(iv) Relations d'orthogonalité :

Le fait que les deux bases $\{|J, M\rangle\}$ et $\{|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\}$ de $\mathcal{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2)$ soient orthonormées entraîne que :

$$\sum_{m_1 + m_2 = M} \langle J M | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (\text{VI-94a})$$

et :

$$\sum_{M = m_1 + m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M \rangle \langle J M | j_1 j_2 m'_1 m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (\text{VI-94b})$$

(v) Lien avec les matrices de rotation. On a :

$$(R^{[j_1]})_{m_1 m'_1} (R^{[j_2]})_{m_2 m'_2} =$$

$$\sum_{\substack{J = j_1 + j_2 \\ J = |j_1 - j_2|}} \sum_{M, M'} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M \rangle \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | J M' \rangle (R^{[J]})_{MM'} \quad (\text{VI-95a})$$

et, inversement :

$$(R^{[J]})_{MM'} = \sum_{m_1 m'_1} \sum_{m_2 m'_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M \rangle \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | J M' \rangle (R^{[j_1]})_{m_1 m'_1} (R^{[j_2]})_{m_2 m'_2} \quad (\text{VI-95b})$$

Exercices :

(i) Calculer l'élément de matrice :

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | e^{-i\phi \vec{J} \cdot \vec{u}/\hbar} | j_1 j_2 m'_1 m'_2 \rangle$$

en introduisant des matrices de rotation et utilisant le fait que $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$. Développer d'autre part les kets $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ et $|j_1 j_2 m'_1 m'_2\rangle$ sur la base $|J, M\rangle$ et démontrer la formule (VI-94a).

Pour démontrer la formule (VI-94b), partir de :

$$\langle J, M | e^{-i\phi \vec{J} \cdot \vec{u}/\hbar} | J, M' \rangle$$

et développer les kets $|J, M\rangle$ sur la base $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$.

(ii) Calculer explicitement les coefficients de Clebsch-Gordan

$$\langle j_1 = 1, j_2 = 1 m_1 m_2 | J M \rangle$$

Remarque :

On montre [voir par exemple référence (13), complément B_x] que :

$$\langle j_1 j_2 j_1 (J - j_1) | J, J \rangle \text{ réel } > 0$$

$$\langle j_1 j_2 j_1 (M - j_1) | J, M \rangle \text{ réel } > 0$$

$$\langle j_2 j_1 m_2 m_1 | J, M \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M \rangle$$

$$\langle j_1 j_2 -m_1 -m_2 | J, -M \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J M \rangle \quad (\text{VI-96})$$

et les relations de récurrence :

$$\sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J, M \pm 1 \rangle =$$

$$\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1 j_2 (m_1 \mp 1) m_2 | J M \rangle$$

$$+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1 j_2 m_1 (m_2 \mp 1) | J, M \rangle \quad (\text{VI-97})$$

De ces relations, on déduit que :

$$\langle j j m - m | 0, 0 \rangle = (-1)^{j - m} / \sqrt{2j + 1} \quad (\text{VI-98})$$

Cette dernière égalité, qui donne les coefficients correspondants à un moment cinétique $J = 0$ (avec $j_1 = j_2 = j$), nous sera utile au paragraphe suivant.

Exercice :

Démontrer les relations (VI-97) et (VI-98).

3 - Composition de plus de deux moments cinétiques

a) Moment cinétique total nul ; coefficients 3j

Considérons un système \mathcal{S}_1 de moment cinétique \vec{J}_1 et appelons \mathcal{E}_1 l'espace (irréductible) engendré par les $(2j_1 + 1)$ kets propres de J_z qui seront notés $|1 : m_1\rangle$. Pour un second système \mathcal{S}_2 , de moment cinétique \vec{J}_2 , \mathcal{E}_2 sera engendré par les $(2j_2 + 1)$ kets $|1 : m_2\rangle$. Dans l'espace $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ de dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$, la valeur minimale du nombre quantique J du moment cinétique total est $|j_1 - j_2|$; elle n'est nulle que si $j_1 = j_2 = j$ (figure VI-7).

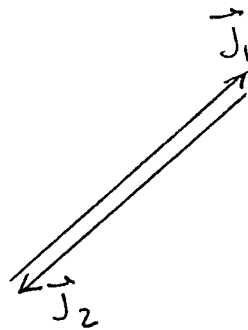


Fig. VI-7

L'état de moment cinétique nul est alors, d'après (VI-97) :

$$|\phi_0\rangle = \sum_{m=j}^{+j} \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}} |1 : m\rangle \otimes |2 : -m\rangle \quad (\text{VI-99})$$

Que se passe-t-il maintenant pour un ensemble de trois systèmes $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ et \mathcal{S}_3 de moments cinétiques \vec{J}_1, \vec{J}_2 et \vec{J}_3 ? Si l'on commence par composer \vec{J}_1 et \vec{J}_2 pour obtenir \vec{J}' :

$$\vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{J}' \quad (\text{VI-100})$$

puis si on compose ensuite \vec{J}' avec \vec{J}_3 pour obtenir le moment cinétique total \vec{J} :

$$\vec{J}' + \vec{J}_3 = \vec{J}$$

on est conduit au tableau suivant :

$$\begin{array}{ccc}
 J' & & J \\
 |j_1 + j_2| & \longrightarrow & \begin{cases} j_1 + j_2 + j_3 \\ j_1 + j_2 + j_3 - 1 \\ \vdots \\ |j_1 + j_2 - j_3| \end{cases} \\
 |j_1 + j_2 - 1| & \longrightarrow & \begin{cases} j_1 + j_2 + j_3 - 1 \\ \vdots \\ |j_1 + j_2 - j_3 - 1| \\ \vdots \\ \vdots \end{cases} \\
 |j_1 - j_2| & \longrightarrow & \begin{cases} |j_1 - j_2| + j_3 \\ |j_1 - j_2| - j_3 \end{cases}
 \end{array}$$

Il est clair qu'en général, chaque valeur de J est réalisée plusieurs fois : J^2 et J_z ne forment pas E.C.O.C. Il faut en plus spécifier la valeur de J' (donc J^2 , J_z et J'^2 forment un E.C.O.C.). Il existe cependant des valeurs de J réalisées une seule fois, par exemple la valeur maximale $J = j_1 + j_2 + j_3$. On ne peut pas affirmer a priori que la valeur minimale n'est réalisée qu'une seule fois ⁽¹⁵⁾. Examinons dans quels cas cette valeur minimale est nulle.

Si l'on veut que $J = 0$, il faut que $J' = j_3$ et donc (règle du tirangle) que :

$$\begin{aligned}
 (j_1 + j_2) &> j_3 > |j_1 - j_2| \\
 j_1 + j_2 + j_3 &\text{ entier} && \text{(VI-101)}
 \end{aligned}$$

On a alors un seul ket possible associé à la valeur $J = 0$ (défini à une phase près s'il est normé). La situation est schématisé sur la figure VI-8.

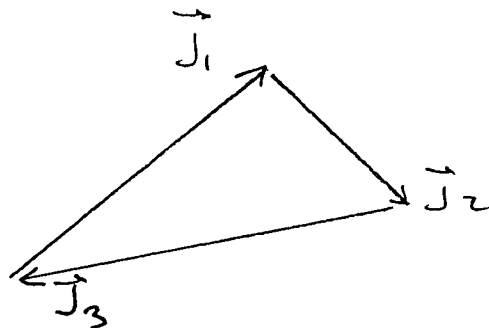


Fig. VI-8

⁽¹⁵⁾ Pour 3 spins 1/2, la valeur minimale est $J = 1/2$, et elle est réalisée deux fois (par l'intermédiaire de $J' = 0$ et $J' = 1$).

Construisons ce ket $|\psi_0\rangle$. Pour cela, commençons par supposer que (VI-101) est réalisée et couplons \vec{J}_1 et \vec{J}_2 pour obtenir les kets :

$$|J' = j_3, M'\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_3 M' \rangle |1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \quad (\text{VI-102})$$

le ket $|\psi_0\rangle$ vaudra alors :

$$|\psi_0\rangle = (-1)^{j_1 - j_2 - j_3} \sum_{M' + m_3 = 0} \langle j_3 j_3 m_3 M' | 0 0 \rangle |J' = j_3, M'\rangle \otimes |3 : m_3\rangle \quad (\text{VI-103})$$

[où le facteur $(-1)^{j_1 - j_2 - j_3}$ est introduit par pure commodité] de sorte que, compte tenu de (VI-98) et (VI-102), on obtient :

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ (m_1 + m_2 + m_3 = 0)}} \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m_3}}{\sqrt{2j_3 + 1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_3 - m_3 \rangle |1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \otimes |3 : m_3\rangle \quad (\text{VI-104})$$

Si donc nous définissons les "coefficients 3j" par :

$$\begin{pmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m_3}}{\sqrt{2j_3 + 1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_3 - m_3 \rangle \quad (\text{VI-105})$$

nous aurons simplement :

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ (m_1 + m_2 + m_3 = 0)}} \begin{pmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} |1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \otimes |3 : m_3\rangle \quad (\text{VI-106})$$

Le choix de phase de $|\psi_0\rangle$ que nous avons fait donne aux coefficients 3j des propriétés de symétrie commode. Un coefficient 3j est en effet :

. invariant par permutation circulaire des colonnes :

$$\begin{pmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 j_3 j_1 \\ m_2 m_3 m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 j_1 j_2 \\ m_3 m_1 m_2 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-107a})$$

. multiplié par $(-1)^{j_1 + j_2 + j_3}$ si l'on intervertit deux colonnes :

$$\begin{pmatrix} j_2 j_1 j_3 \\ m_2 m_1 m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} \quad (\text{VI-107b})$$

En effet, considérons le ket :

$$\begin{aligned} |\psi'_0\rangle &= \sum_{m_1 m_2 m_3} \begin{pmatrix} j_2 j_3 j_1 \\ m_2 m_3 m_1 \end{pmatrix} |1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \otimes |3 : m_3\rangle \\ &= \sum_{m_1 m_2 m_3} \frac{(-1)^{j_2 - j_3 - m_1}}{\sqrt{2j_1 + 1}} \langle j_2 j_3 m_2 m_3 | j_1 - m_1 \rangle |1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \otimes |3 : m_3\rangle \end{aligned} \quad (\text{VI-108})$$

$|\psi'_0\rangle$ correspond au couplage de $\vec{J}_2 \otimes \vec{J}_3$ en \vec{J}'' :

$$\vec{J}_2 + \vec{J}_3 = \vec{J}'' \quad (\text{VI-109})$$

puis de \vec{J}'' avec \vec{J}_1 pour former \vec{J} . Comme la valeur propre $J = 0$ est non-dégénérée, on a nécessairement :

$$|\psi'_0\rangle = \lambda |\psi_0\rangle \quad (\text{VI-110})$$

De plus, le fait que les deux kets soient par construction normés entraîne que $|\lambda| = 1$, celui que leurs coefficients sur les kets de la base initiale sont réels (produits et somme de coefficients de Clebsch-Gordan) que $\lambda = \pm 1$.

Le seul problème qui se pose pour comparer $|\psi_0\rangle$ et $|\psi'_0\rangle$ est donc un problème de signe. Considérons par exemple les coefficients de ces deux kets sur le vecteur de base :

$$|1 : j_1\rangle \otimes |2 : j_3 - j_1\rangle \otimes |3 : j_3\rangle$$

Pour $|\psi_0\rangle$, l'égalité (VI-103) indique que ce coefficient a le signe de $(-1)^{j_1 - j_2 + j_3}$ d'après la convention (VI-91). Pour $|\psi'_0\rangle$, le signe est :

$$(-1)^{j_2 - j_3 - j_1} \text{ signe } \{ \langle j_2 j_3 (j_3 - j_1) - j_1 | j_1 - j_1 \rangle \}$$

Or, les relations (VI-95) permettent de voir facilement que le signe du coefficient de Clebsch-Gordan qui apparaît est positif. Pour finir :

$$|\psi_0\rangle = |\psi'_0\rangle \quad (\text{VI-111})$$

et la relation (VI-107a) est démontrée.

Examinons maintenant ce qui se produit par changement de l'ordre de j_1 et j_2 (permutation de 1 et 2). On est alors conduit au ket :

$$\begin{aligned} |\psi''_0\rangle &= \int_{m_1, m_2, m_3} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{pmatrix} j_2 j_1 j_3 \\ m_2 m_1 m_3 \end{pmatrix} |1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \otimes |3 : m_3\rangle \\ &= \int_{m_1, m_2, m_3} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \frac{(-1)^{j_2 - j_1 - m_3}}{\sqrt{2j_3 + 1}} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_3 - m_3 \rangle \\ &\quad |1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \otimes |3 : m_3\rangle \quad (\text{VI-112}) \end{aligned}$$

Comme plus haut, on sait a priori que $|\psi''_0\rangle = \pm |\psi_0\rangle$. Mais le coefficient de $|\psi''_0\rangle$ sur le ket $|1 : j_1\rangle \otimes |2 : j_3 - j_1\rangle \otimes |3 : -j_3\rangle$ a pour signe :

$$\begin{aligned} &(-1)^{j_2 - j_1 + j_3} \text{ signe } \{ \langle j_2 j_1 j_3 - j_1 j_1 | j_3 j_3 \rangle \} \\ &= (-1)^{j_2 - j_1 + j_3} (-1)^{j_1 + j_2 - j_3} = (-1)^{2j_2} \quad (\text{VI-113}) \end{aligned}$$

[cf référence (13), complément B_x, formule (23)]. On a donc :

$$|\psi''_0\rangle = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} |\psi_0\rangle \quad (\text{VI-114})$$

ce qui établit l'égalité (VI-107b).

Ces relations de symétrie permettent de permuter, soit j_1 et m_1 , soit j_2 et m_2 , avec J et M dans un coefficient de Clebsch-Gordan. On obtient, en utilisant (VI-107a), (VI-107b) et la définition (VI-105) :

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J, M \rangle &= (-1)^{j_1 - J + m_2} \sqrt{\frac{2J + 1}{2j_1 + 1}} \langle J j_2 M - m_2 | j_1 m_1 \rangle \\ &= (-1)^{j_2 - J - m_1} \sqrt{\frac{2J + 1}{2j_2 + 1}} \langle j_1 J - m_1 M | j_2 m_2 \rangle \end{aligned} \quad (\text{VI-115})$$

Les relations d'orthogonalité (VI-93) deviennent pour les coefficients $3j$:

$$\begin{aligned} \sum_{j_3 m_3} (2j_3 + 1) \begin{pmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ m'_1 m'_2 m'_3 \end{pmatrix} &= \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \\ \sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ m_1 m_2 m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 j_2 j'_3 \\ m_1 m_2 m'_3 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2j_3 + 1} \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3} \end{aligned} \quad (\text{VI-116})$$

b) Coefficients $6j$ de Wigner

Pour trois moments cinétiques \vec{J}_1, \vec{J}_2 et \vec{J}_3 , considérons les deux modes de composition :

$$\begin{cases} \vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{G} \\ \vec{G} + \vec{J}_3 = \vec{J} \end{cases} \quad \begin{cases} \vec{J}_2 + \vec{J}_3 = \vec{G}' \\ \vec{J}_1 + \vec{G}' = \vec{J} \end{cases} \quad (\text{VI-117})$$

Ces deux modes sont schématisés sur la figure VI-9.

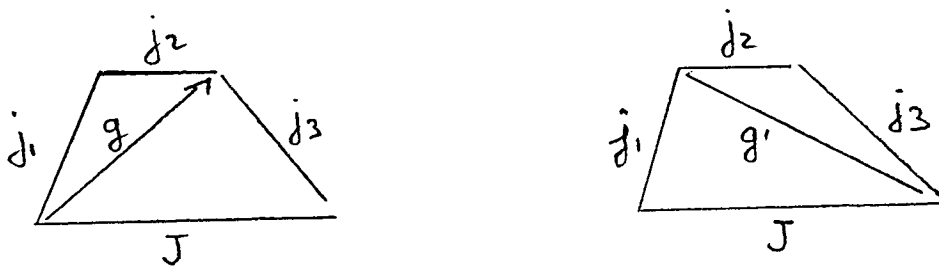


Fig. VI-9

Il leur correspond deux bases de kets notés respectivement :

$$\begin{aligned} |(j_1, j_2) g, j_3 ; J M\rangle &= |\phi^g_{JM}\rangle \\ |j_1, (j_2 j_3) g' ; J' M'\rangle &= |\phi^{g'}_{J'M'}\rangle \end{aligned} \quad (\text{VI-118})$$

Les kets $|\phi_{JM}^g\rangle$ et $|\psi_{J'M'}^{g'}\rangle$ sont nécessairement orthogonaux, sauf si $J = J'$ et $M = M'$ (des vecteurs propres de \vec{J}^2 et J_z de valeurs propres différentes sont orthogonaux). Montrons que leur produit scalaire dépend de J , g et g' , mais pas de M . En effet, si l'on introduit entre le bra $\langle\phi_{JM}^g|$ et le ket $|\psi_{JM}^{g'}\rangle$ la relation (VI-5c) :

$$J_- J_+ = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

et si l'on utilise le fait que, par construction :

$$J_{\pm} |\phi_{JM}^g\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} |\phi_{JM \pm 1}^g\rangle$$

$$[\vec{J}^2 - J_z^2 - J_z] |\phi_{JM}^g\rangle = \hbar^2 [J(J+1) - M^2 - M] |\phi_{JM}^g\rangle \quad (\text{VI-119})$$

(et une relation du même type pour les kets $|\psi_{JM}^{g'}\rangle$). On obtient :

$$\langle\phi_{JM}^g | \psi_{JM}^{g'}\rangle = \langle\phi_{JM \pm 1}^g | \psi_{JM \pm 1}^{g'}\rangle \quad (\text{VI-120})$$

Par définition du coefficient $6j$:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & g \\ j_3 & J & g' \end{matrix} \right\}$$

On pose alors :

$$\langle\phi_{JM}^g | \psi_{J'M'}^{g'}\rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \sqrt{(2g+1)(2g'+1)} (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + J} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & g \\ j_3 & J & g' \end{matrix} \right\} \quad (\text{VI-121})$$

[les $(-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + J}$ et racines carrées sont, ici aussi, introduits pour donner une plus grande symétrie aux coefficient $6j$].

Les propriétés des coefficients $6j$ sont les suivantes :

- (i) ils sont réels
- (ii) ils sont invariants dans une permutation quelconque des colonnes entre elles
- (iii) ils sont invariants si l'on remplace deux éléments de la première ligne par les éléments correspondants de la seconde (et vice-versa)
- (iv) on peut associer à chacun d'entre eux un tétraèdre dans l'espace (figure VI-10). Le coefficient $6j$ ne dépend que des moments cinétiques et de leur position sur le tétraèdre.

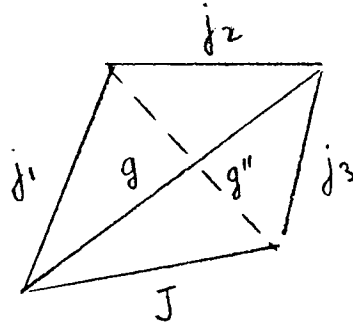


Fig. VI-10

- (v) ils sont nuls sauf si, pour chaque face du tétraèdre :
- . la somme des moments cinétiques est entière
 - . les égalités du triangle sont vérifiées.

Pour démontrer les relations, on développe sur la base

$|1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \otimes |3 : m_3\rangle$ les deux vecteurs (VI-118). Par exemple :

$$|\phi_{JM}^g\rangle = \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ m_{12}}} (-1)^{j_1 - j_2 - j_3 + m_{12} + g + M'} \sqrt{(2g+1)(2J+1)} \begin{pmatrix} j_1 j_2 g \\ m_1 m_2 -m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g j_3 J \\ m_{12} m_3 -M' \end{pmatrix}$$

$$|1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \otimes |3 : m_3\rangle \tag{VI-122}$$

Ensuite, par produit scalaire, on obtient, d'après la définition (VI-121) :

$$\delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3} \frac{1}{2j_3 + 1} \begin{Bmatrix} j_1 j_2 j_3 \\ J_1 J_2 J_3 \end{Bmatrix} = \sum_{\substack{M_1 M_2 M_3 \\ m_1 m_2}} (-1)^{J_1 + J_2 + J_3 + M_1 + M_2 + M_3} \begin{pmatrix} J_1 J_2 j_3 \\ M_1 - M_2 M_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_2 J_3 j_1 \\ M_2 - M_3 m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_3 J_1 j_2 \\ M_3 - M_1 m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 j_2 j'_3 \\ m_1 m_2 m'_3 \end{pmatrix} \tag{VI-123}$$

Cette égalité conduit aux relations de symétrie énoncées plus haut.

En utilisant les diverses propriétés des coefficients $3j$ et $6j$, on peut démontrer un grand nombre de relations utiles, que nous ne donnerons pas. On pourra se reporter à l'appendice C du tome II du livre de A. Messiah [référence (2)], ou encore au livre de A.R. Edmonds, "Angular momentum in quantum mechanics" (Princeton University Press). Signalons qu'il existe des tables numériques des coefficients $3j$ et $6j$ [M. Rotenberg, R. Bivins, N. Metropolis et J.K. Wooten, "The $3j$ and $6j$ symbols", M.I.T. Technology Press ; Crosby Lockwood and Sons, London].

Remarque :

La procédure utilisée peut se généraliser. On est ainsi conduit à des coefficients $9j$, $12j$, etc.

CHAPITRE VII

TRANSFORMATION DES OBSERVABLES PAR ROTATION

INTRODUCTION

A. OPÉRATEURS VECTORIELS.....	p.199
1. Définition	p.199
2. Les observables fondamentales sont vectorielles.....	p.201
a) Impulsion \vec{P}	
b) Position \vec{R}	
c) Spin \vec{S}	
3. Composantes standard.....	p.202
B. OPÉRATEURS TENSORIELS.....	p.206
1. Définition.....	p.206
2. Composantes sphériques.....	p.209
3. Opérateurs tensoriels irréductibles; composantes standard.	p.212
a) Décomposition d'un tenseur $n = 2$	
b) Cas général	
4. Propriétés des opérateurs tensoriels irréductibles.....	p.220
a) Relations de commutation avec \vec{J}	
b) Symétries des $T_Q^{(K)}$. Hermiticité	
c) Produit de deux opérateurs tensoriels	
C. THÉORÈME DE WIGNER-ECKART.....	p.227
1. Démonstration.....	p.228
2. Applications et exemples.....	p.234
a) Opérateurs scalaires	
b) Opérateurs vectoriels	
c) Opérateurs tensoriels $K = 2$	
d) Décomposition de la matrice densité sur les $T_Q^{(K)}$	

INTRODUCTION

Nous avons, dans le chapitre précédent, étudié diverses propriétés des opérateurs $R_{\vec{u}}(\phi)$ qui traduisent l'effet d'une opération de rotation sur le vecteur d'état d'un système physique quelconque. Mais nous avons déjà remarqué (chapitre IV, § C) que les mêmes opérateurs $R_{\vec{u}}(\phi)$ permettent de calculer l'effet des rotations, non seulement sur le système physique lui-même, mais également sur les appareils de mesure associés aux diverses observables A du système (opérateurs hermitiques à spectre complet). En effet, l'opérateur A' associé aux instruments de mesure ayant subi une rotation d'un angle ϕ autour du vecteur unitaire \vec{u} est :

$$A' = R_{\vec{u}}(\phi) A R_{\vec{u}}^{\dagger}(\phi) \quad (\text{VII-1})$$

où, rappelons-le :

$$R_{\vec{u}}(\phi) = \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \phi J_{\vec{u}} \right\} . \quad (\text{VII-2})$$

← En particulier, si la rotation est infinitésimale (angle $\delta\phi$) :

$$A' = A - \frac{i}{\hbar} \delta\phi [J_{\vec{u}}, A] . \quad (\text{VII-3})$$

C'est donc le commutateur de A avec les diverses composantes $J_{\vec{u}}$ du moment cinétique total \vec{J} qui traduit l'effet d'une rotation infinitésimale sur chaque observable.

Dans ce chapitre, nous allons donc étudier la rotation des observables, et non celle des vecteurs d'état comme dans le chapitre précédent.

La principale différence est que, pour effectuer des transformations sur les observables, nous remplacerons les formules du type :

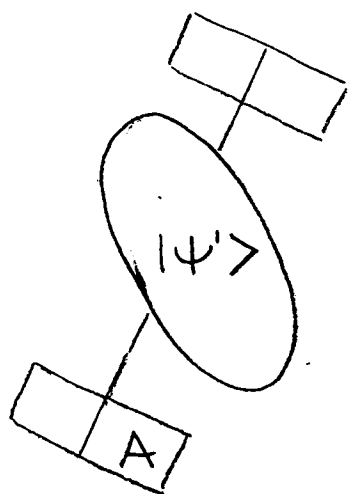
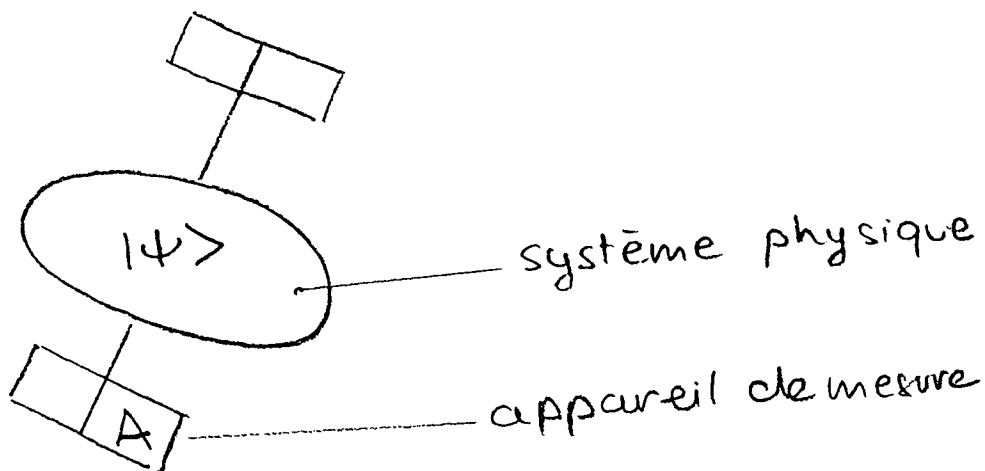
$$|\psi' \rangle = R_{\vec{U}}(\phi)|\psi \rangle \quad (\text{VII-4})$$

par la relation (VII-1), où $R_{\vec{U}}(\phi)$ apparaît deux fois au lieu d'une seule. De façon analogue, pour les rotations infinitésimales, au lieu de faire simplement agir $J_{\vec{U}}$ sur $|\psi \rangle$, nous introduirons le commutateur (VII-3). Pour le reste, nous ne ferons qu'utiliser à nouveau les raisonnements (ainsi que les notations) du chapitre VI.

Ce chapitre VII doit donc être considéré, non comme un exposé où des idées importantes et nouvelles sont introduites, mais plutôt comme un chapitre d'applications où des techniques de calcul sont présentées. Cette étude nous permettra en particulier de dégager la notion d'opérateur vectoriel (§ A) ou tensoriel (voir le complément VII-A pour un rappel élémentaire concernant les tenseurs classiques); elle nous conduira à introduire (§ B) la définition des "opérateurs tensoriels irréductibles". Ces derniers permettent, en mécanique quantique, de simplifier considérablement de nombreux calculs où l'algèbre angulaire et l'invariance par rotation jouent un rôle. La simplification introduite provient principalement du théorème de Wigner-Eckart que nous démontrerons et commenterons ensuite (§ C). Une application importante des méthodes de calcul exposée est donnée par les opérateurs multipolaires électriques ou magnétiques d'un système de charges (voir complément VII-B).

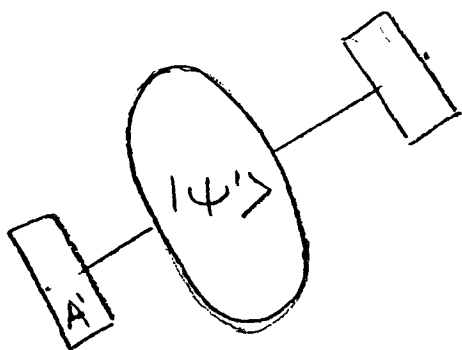
Remarque : Il est important de garder à l'esprit le sens physique de la formule (VII-1) [ou de sa forme infinitésimale (VII-3)]. En effet, si l'on confond les opérations de rotation d'un système physique ou de ses observables, on s'expose à des erreurs de calcul (en particulier des fautes de signe, comme nous allons le voir dans cette remarque).

La figure VII.1, symbolise la façon dont nous avons obtenu (VII-1) [cf. raisonnement des §§ A et C du chapitre IV]. Nous avons construit l'observable A' , transformée de A par rotation, de façon qu'aucun résultat de mesure physique ne soit changé si l'on tourne à la fois le système physique et les instruments de mesure (les résultats possibles de cette dernière ainsi que leurs probabilités ne dépendent que des positions relatives des appareils de mesure et du système mesuré).



Rotation du système physique

$$|\psi'\rangle = R |\psi\rangle$$



Rotation du système physique et des observables

$$|\psi'\rangle = R |\psi\rangle$$

$$A' = R A R^\dagger$$

aucun résultat de mesure n'est changé

Fig VII-1

Pour prendre un exemple concret, considérons une expérience du type Stern et Gerlach. La quantité mesurée est alors la composante du spin d'une particule le long d'une direction \vec{v} donnée, et l'observable A s'écrit $\vec{S} \cdot \vec{v}$ (le vecteur \vec{v} est supposé unitaire). Supposons qu'initialement, le spin soit l'état propre $|+ \rangle_v$ de cette observable (valeur propre $+\hbar/2$); le résultat de la mesure est alors certain : c'est $+\hbar/2$. Si l'on fait subir au système une rotation $R_{\vec{u}}(\phi)$, son état devient $|+ \rangle_{v'}$, état où le spin pointe dans la direction \vec{v} donnée par :

$$\vec{v}' = \mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi) \vec{v} \tag{VII-5}$$

Le ket $|+ \rangle_{v'}$ est ket propre de la composante de \vec{S} sur \vec{v}' (valeur propre $+\hbar/2$), composante qui est précisément l'observable A' transformée de A par rotation des instruments de mesure :

$$\vec{S} \cdot \vec{v}' = (\vec{S} \cdot \vec{v})' = R_{\vec{u}}(\phi) \vec{S} \cdot \vec{v} R_{\vec{u}}^\dagger(\phi) \tag{VII-6}$$

Bien sûr, si l'on tourne à la fois le système physique (spin) et les instruments de mesure (aimants de Stern et Gerlach), rien n'est changé : le résultat de mesure est toujours certain et vaut $+\hbar/2$.

Dans cet exemple, on voit bien l'analogie profonde entre une rotation des appareils de mesure et une rotation des axes en géométrie : on mesure la composante de \vec{S} sur l'axe \vec{v} , puis sur l'axe \vec{v}' . En d'autres termes, les appareils de mesure définissent les axes d'espace par rapport auxquels les propriétés physiques du système sont examinées.

Le risque d'erreur signalé plus haut tient seulement au fait, bien connu en géométrie ordinaire, qu'il n'est pas équivalent d'effectuer une rotation R sur chaque point \vec{r} de l'espace ou d'effectuer une rotation des axes. Dans le premier cas, on écrit :

$$\vec{r}' = \mathcal{R} \vec{r} \tag{VII-7}$$

et la matrice (\mathcal{R}) donne directement la modification des composantes du point par rotation. Par contre, dans le second cas, on écrit que les vecteurs unitaires \vec{e} des axes de coordonnées se transforment suivant :

$$\vec{e}'_i = \mathcal{R} \vec{e}_i \quad (\text{VII-8})$$

et que :

$$\vec{r} = \sum_i x_i \vec{e}_i = \sum_i x'_i \vec{e}'_i \quad x_i = x, y, z \quad (\text{VII-9})$$

(le vecteur \vec{r} est le même, quelle que soit la base à laquelle on le rapporte).
On obtient alors :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = (\mathcal{R}) \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \quad (\text{VII-10})$$

[on passe maintenant par la matrice (\mathcal{R}) des nouvelles coordonnées aux anciennes] , ou encore :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = (\mathcal{R})^{-1} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (\text{VII-11})$$

Tourner les axes revient donc à effectuer sur les coordonnées l'opération exactement inverse de celle où l'on tourne les vecteurs \vec{r} eux-mêmes. Evidemment, si l'on tourne à la fois les vecteurs \vec{r} et les axes, rien n'est changé en ce qui concerne les coordonnées x, y et z .

En mécanique quantique, effectuer l'opération $|\psi' \rangle = R |\psi \rangle$ est donc l'analogie d'effectuer une rotation sur les vecteurs \vec{r} , alors que transformer les observables suivant (VII-1) est l'analogie d'un changement des axes de coordonnées. Si l'on ne distingue pas soigneusement les deux cas, on risque donc de confondre deux opérations inverses. Si l'on préfère, on peut assimiler la rotation du vecteur d'état à une "rotation active", celle des observables à une "rotation passive" (voir discussion de la remarque dans l'introduction du chapitre IV).

A. OPERATEURS VECTORIELS

1. DEFINITION

Un ensemble V_x, V_y, V_z de trois opérateurs constitue les trois composantes d'un opérateur vectoriel si, par rotation, ces opérateurs se transforment comme les composantes d'un vecteur dans l'espace à trois dimensions. Les formules (VII-11) de transformation des composantes d'un vecteur deviennent donc dans ce cas :

$$\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \left(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi) \right)^{-1} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \quad (\text{VII-12})$$

avec :

$$V'_{x_i} = R_{\vec{u}}(\phi) V_{x_i} R_{\vec{u}}^{\dagger}(\phi) \quad (\text{VII-13})$$

Dans la suite, il nous sera plus commode de faire apparaître les matrices (\mathcal{R}) que leurs inverses. En effet, si l'on utilisait directement (VII-12), on devrait par exemple, pour appliquer successivement deux rotations \mathcal{R} et \mathcal{R}' , renverser l'ordre des matrices puisque :

$$(\mathcal{R}'\mathcal{R})^{-1} = (\mathcal{R})^{-1}(\mathcal{R}')^{-1} \quad (\text{VII-14})$$

Pour éviter cet inconvénient, nous tirerons parti du fait que les matrices (\mathcal{R}) sont orthogonales (leur inverse est égale à leur transposée) pour écrire (VII-12) sous la forme équivalente :

$$(V'_x \ V'_y \ V'_z) = (V_x \ V_y \ V_z) \left(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi) \right) \quad (\text{VII-15})$$

Si l'on explicite cette relation, on obtient :

$$R_{x_i} V_{x_i} R^{\dagger} = \sum_{i'} (\mathcal{R})_{i'i} V_{x_{i'}} \quad x_i, x_{i'} = x, y, z \quad (\text{VII-16})$$

qui constitue une première définition d'un opérateur vectoriel.

On peut condenser les trois opérateurs V_x , V_y et V_z dans la notation vectorielle

$$\vec{V} = V_x \vec{e}_x + V_y \vec{e}_y + V_z \vec{e}_z \quad (\text{VII-17})$$

ce qui conduit à écrire (VII-12) sous la forme :

$$\vec{V}' = \mathcal{R}_{\vec{u}}^{-1}(\phi) \vec{V} \quad (\text{VII-18})$$

En particulier, pour une rotation infinitésimale d'angle $\delta\phi$, \vec{V}' devient [cf (V-30)] :

$$\vec{V}' = \vec{V} + \delta\vec{V} = \vec{V} - \delta\phi \vec{u} \times \vec{V} \quad (\text{VII-19})$$

Comme par ailleurs la formule générale (VII-3) devient ici :

$$\delta\vec{V} = -\frac{i}{\hbar} \delta\phi [J_{\vec{u}}, \vec{V}] \quad (\text{VII-20.a})$$

la condition pour que \vec{V} soit un opérateur vectoriel peut s'écrire :

$$[J_{\vec{u}}, \vec{V}] = -i\hbar \vec{u} \times \vec{V} \quad (\text{VII-20.b})$$

Par linéarité, on peut encore obtenir la définition équivalente :

$$[(\vec{J} \cdot \vec{u}), (\vec{V} \cdot \vec{w})] = i\hbar (\vec{u} \times \vec{w}) \cdot \vec{V} \quad (\text{VII-20.c})$$

Une dernière façon de définir un opérateur vectoriel \vec{V} est d'explicitier les composantes de (VII-21), ce qui donne :

$$\begin{aligned} [J_x, V_x] &= 0 \\ [J_x, V_y] &= i\hbar V_z \\ [J_x, V_z] &= -i\hbar V_y \end{aligned} \quad (\text{VII-20.d})$$

(à ces trois relations, on ajoute les 6 autres obtenues par permutation circulaire des indices x, y et z).

2. LES OBSERVABLES FONDAMENTALES SONT VECTORIELLES

Nous appellerons observables fondamentales d'une particule ses opérateurs position \vec{R} , impulsion \vec{P} et spin \vec{S} . A partir de ces observables, on peut construire toutes les autres : le moment angulaire orbital \vec{L} , ou $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, ou encore l'hamiltonien H, etc... Il est donc important de déterminer comment ces observables fondamentales sont modifiées par rotation.

En mécanique classique, on sait que la position \vec{r} d'une particule, son impulsion \vec{p} , ou même son moment angulaire $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ sont des grandeurs vectorielles. Nous allons voir qu'il en est de même en mécanique quantique.

a) Impulsion \vec{P}

Nous avons déjà vu [cf. chap. V, § B-1] que :

$$[J_{x_i}, P_{x_j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} P_{x_k} \quad (\text{VII-21.a})$$

ou encore :

$$[(\vec{u} \cdot \vec{J}), (\vec{v} \cdot \vec{P})] = i\hbar (\vec{u} \times \vec{v}) \cdot \vec{P} \quad (\text{VII-21.b})$$

Ces relations traduisent les relations de commutation entre rotations et translations, aussi bien dans le cadre du groupe de Galilée que celui de Lorentz. L'opérateur \vec{P} est donc vectoriel.

b) Position \vec{R}

L'opérateur position \vec{R} n'est pas le générateur infinitésimal associé à des transformations appartenant au groupe de Lorentz ou de Galilée, bien qu'il soit relié à $X_{\vec{r}}$ [cf. chap. I, formule (I-54) et la remarque à la fin du § C-1 du chapitre III] . Il nous faut donc examiner ces transformations de plus près.

Remarquons tout d'abord que :

$$[\vec{R}, \vec{J}] = [\vec{R}, \vec{L} + \vec{S}] = [\vec{R}, \vec{L}] \quad (\text{VII-22})$$

Cette égalité nous permet de nous contenter de calculer les 9 commutateurs des composantes de \vec{R} avec celles de \vec{L} . Nous ignorerons donc les variables de spin, et raisonnerons dans l'espace des états $\mathfrak{E}_{\vec{r}}$. On a alors :

$$\vec{R} = \int d^3r \vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \quad (\text{VII-23})$$

et, comme

$$R_{\vec{u}}(\phi) |\vec{r}\rangle = |\vec{r}'\rangle \quad (\text{VII-24.a})$$

où

$$\vec{r}' = \mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi) \vec{r} \quad (\text{VII-24.b})$$

il vient :

$$\begin{aligned} \vec{R}' &= R_{\vec{u}}(\phi) \vec{R} R_{\vec{u}}^\dagger(\phi) \\ &= \int d^3r \vec{r} |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}'| \\ &= \int d^3r' [\mathcal{R}_{\vec{u}}^{-1}(\phi) \vec{r}'] |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}'| \\ &= \mathcal{R}_{\vec{u}}^{-1}(\phi) \int d^3r' \vec{r}' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}'| \\ &= \mathcal{R}_{\vec{u}}^{-1}(\phi) \vec{R} \end{aligned} \quad (\text{VII-25})$$

L'opérateur \vec{R} est donc vectoriel.

c) Spin \vec{S}

L'opérateur spin \vec{S} commute avec tous les opérateurs agissant dans $\mathcal{E}_{\vec{r}}$, de sorte que :

$$\begin{aligned} [J_x, S_y] &= [L_x + S_x, S_y] \\ &= [S_x, S_y] = i\hbar S_z \end{aligned} \quad (\text{VII-26})$$

On voit donc facilement que \vec{S} est vectoriel.

Remarque : Les opérateurs \vec{L} et \vec{J} sont également vectoriels.

3. COMPOSANTES STANDARD

Au § 5.a du chapitre VI, nous avons vu que les matrices de rotation ($R^{[j=1]}$) ne sont autres que les matrices habituelles de rotation (\mathcal{R}), mais dans une autre base. Partant en fait de la base \vec{e}_x, \vec{e}_y et \vec{e}_z où agissent les matrices (\mathcal{R}), nous avons introduit les trois vecteurs [cf. (VI-36)]

$$\left\{ \begin{array}{l} |\vec{e}_{+1}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} [|\vec{e}_x\rangle + i|\vec{e}_y\rangle \\ |\vec{e}_0\rangle = |\vec{e}_z\rangle \\ |\vec{e}_{-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\vec{e}_x\rangle - i|\vec{e}_y\rangle \end{array} \right. \quad (\text{VII-27.a})$$

qui donnent la base où les (\mathcal{R}) s'identifient aux $(R^{[j=1]})$. Si l'on introduit la matrice S de changement de base ^(*) :

$$(S) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VII-27.b})$$

On a donc :

$$(S)^{-1} (\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)) (S) = (R_{\vec{u}}^{[j=1]}(\phi)) \quad (\text{VII-28})$$

quelles que soient les valeurs des paramètres \vec{u} et ϕ qui définissent la rotation. Comme la matrice (S) est unitaire, on a $(S)^{-1} = (S)^\dagger$ de sorte que

$$(S)^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VII-29})$$

Si l'on multiplie (VII-28) à droite par $(S)^{-1}$ et à gauche par (S) , on obtient l'égalité inverse :

(*) Rappelons que, par convention, la matrice changement de base est celle qui, dans ses colonnes, contient les composantes des nouveaux vecteurs de base sur les anciens.

$$(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)) = (S) (R_{\vec{u}}^{[j=1]}(\phi)) (S)^{-1} \quad (\text{VII-30})$$

que l'on peut reporter dans (VII-15). Il vient :

$$(V'_x \ V'_y \ V'_z) = (V_x \ V_y \ V_z) (S) (R_{\vec{u}}^{[j=1]}(\phi)) (S)^{-1} \quad (\text{VII-31})$$

ou encore :

$$(V'_x \ V'_y \ V'_z) (S) = (V_x \ V_y \ V_z) (S) \times (R_{\vec{u}}^{[j=1]}(\phi)) \quad (\text{VII-32})$$

Il apparaît donc la matrice :

$$(V_x \ V_y \ V_z) (S) = (V_{+1} \ V_0 \ V_{-1}) \quad (\text{VII-33})$$

où, d'après (VII-27.b) :

$$\begin{cases} V_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (V_x + iV_y) \\ V_0 = V_z \\ V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x - iV_y) \end{cases} \quad (\text{VII-34})$$

L'égalité (VII-32) s'écrit alors simplement :

$$(V'_{+1} \ V'_0 \ V'_{-1}) = (V_{+1} \ V_0 \ V_{-1}) (R_{\vec{u}}^{[j=1]}(\phi)) \quad (\text{VII-35})$$

où V'_{+1} , V'_0 et V'_{-1} désignent les opérateurs transformés de V_{+1} , V_0 et V_{-1} par rotation :

$$V'_m = R_{\vec{u}}(\phi) V_m R_{\vec{u}}^\dagger(\phi) \quad m = +1, 0, -1 \quad (\text{VII-36})$$

Les opérateurs V_m définis en (VII-34) sont appelés "composantes standard" de l'opérateur vectoriel \vec{V} . La relation (VII-35) exprime que ces composantes standard se transforment par rotation comme des kets d'une base standard de moment cinétique $j = 1$. En effet, si l'on explicite cette relation, on obtient :

$$R V_m R = \sum_{m'} (R^{[j=1]})_{m'm} V_{m'} \quad (\text{VII-37.a})$$

(nous sous-entendons à partir de maintenant les paramètres \vec{u} et ϕ),

qui est l'analogue de :

$$R |j=1, m\rangle = \sum_{m'} (R^{[j=1]})_{m'm} |j=1, m'\rangle \quad (\text{VII-37.b})$$

Rappelons la définition (VI-20.b) des $(R^{[j=1]})_{m'm}$:

$$(R^{[j]})_{m'm} = \langle j, m' | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} J_u \right\} |j, m\rangle$$

On conçoit donc l'intérêt d'introduire des composantes standard V_m : elles nous permettent d'appliquer sans changement la théorie du moment cinétique et de la base standard du chapitre précédent. Le passage des composantes cartésiennes V_{x_i} ($x_i = x, y$ ou z) aux composantes standard V_{m_j} ($m_j = 1, 0$ ou -1) est donné par la formule :

$$V_{m_j} = \sum_{i'} (S)_{i'j} V_{x_{i'}} \quad m_1 = 1; m_2 = 0; m_3 = -1 \quad (\text{VII-38.a})$$

[relation équivalente à (VII-33)] et, inversement :

$$V_{x_i} = \sum_{j'} (S^{-1})_{j'i} V_{m_{j'}} = \sum_{j'} (S)_{ij'}^* V_{m_{j'}} \quad (\text{VII-38.b})$$

[car S est unitaire].

Remarque : On peut noter l'analogie entre la formule (VII-27.a) de définition d'une nouvelle base (complexe) dans l'espace habituel et la définition (VII-34) des composantes standard. Il faut cependant prendre garde au fait que :

$$\begin{aligned} \vec{V} &= V_x \vec{e}_x + V_y \vec{e}_y + V_z \vec{e}_z \\ &= V_{-1} \vec{e}_{+1} + V_0 \vec{e}_0 + V_{+1} \vec{e}_{-1} \end{aligned} \quad (\text{VII-39})$$

(V_{+1} est associé à \vec{e}_{-1} , V_{-1} à \vec{e}_{+1}).

B. OPERATEURS TENSORIELS

1. DEFINITION

Nous avons trouvé un certain nombre d'observables, comme \vec{R} , \vec{P} , \vec{L} , etc..., qui sont vectorielles. Il existe cependant des opérateurs dont les lois de transformation par rotation ne sont pas celles de vecteurs. Par exemple, on vérifie aisément que :

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad G = \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (\text{VII-40})$$

sont des opérateurs qui commutent avec \vec{J} et, par suite, sont invariantes par rotation (nous les appellerons "observables scalaires"). D'autres opérateurs comme :

$$T_{xx} = X P_x + P_x X \quad (\text{VII-41})$$

ont des lois de transformations plus compliquées.

Une observable A quelconque sera obtenue comme une fonction F des observables fondamentales

$$A = F(\vec{R}, \vec{P}, \vec{S}) \quad (\text{VII-42})$$

Par exemple, si l'on applique les règles de quantification canoniques à une (ou un ensemble de) particules sans spin, on obtient l'observable quantique par substitution dans la fonction classique de \vec{r} en \vec{R} , \vec{p} en \vec{P} , et éventuellement par une symétrisation convenable (pour tenir compte de la non-commutation entre opérateurs). Quoi qu'il en soit, la fonction F peut être développée en série de Taylor, ce qui fait apparaître des termes du type :

$$C \times V_{x_i} W_{x_j} \dots Z_{x_\ell} \quad (\text{VII-43})$$

Dans cette expression, C est une constante (proportionnelle à une dérivée à l'origine d'ordre n de la fonction F) et $V_{x_i}, W_{x_j}, \dots, Z_{x_\ell}$ sont les composantes cartésiennes de n opérateurs vectoriels ($x_i, x_j, \dots, x_\ell = x, y$ ou z). Les opérateurs $\vec{V}, \vec{W} \dots \vec{Z}$ représentent chacun l'un des trois opérateurs \vec{R}, \vec{P} ou \vec{S} , mais tout ce qui va être dit par la suite reste également valable si ce sont des opérateurs vectoriels différents des observables fondamentales ($\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ par exemple).

Considérons alors tous les termes du type (VII-43) où l'on a effectué un choix donné pour les n opérateurs vectoriels (on spécifie par exemple le nombre de fois où apparaît chaque opérateur \vec{R} , \vec{P} ou \vec{S} et dans quel ordre). Ces termes ne diffèrent que par le choix des composantes x_i , $x_j \dots x_\ell$ et sont donc au nombre de 3^n . On regroupe ces 3^n termes dans un tableau d'opérateurs (en faisant $C = 1$ pour abandonner cette constante) que l'on appelle opérateur tensoriel $T^{(n)}$ d'ordre n. Les composantes de cet opérateur sont :

$$T^{(n)}_{x_i, x_j \dots x_\ell} = V_{x_i} W_{x_j} \dots Z_{x_\ell} \quad x_i, x_j \dots x_\ell = x, y \text{ ou } z \quad (\text{VII-44})$$

et on note :

$$T^{(n)} = \vec{V} \otimes \vec{W} \otimes \dots \otimes \vec{Z} \quad (\text{VII-45})$$

Par exemple, si $n = 1$, on retombe sur le cas déjà étudié d'un opérateur vectoriel, représenté par une matrice ligne à 3 éléments. Si $n = 2$, le tableau est une matrice 3×3 comme :

$$\overline{T}^{(2)} = \begin{pmatrix} J_x^2 & J_x J_y & J_x J_z \\ J_y J_x & J_y^2 & J_y J_z \\ J_z J_x & J_z J_y & J_z^2 \end{pmatrix} \quad (\text{VII-46})$$

(on a pris le cas où $\vec{V} = \vec{W} = \vec{Z}$). De la même façon, si $n = 3$, on est conduit à un tableau cubique $3 \times 3 \times 3$ (ensemble de 3 matrices 3×3), etc... Il est clair que toutes les fonctions F peuvent, par développement de Taylor, s'exprimer comme combinaisons linéaires des composantes de tels tenseurs.

La question qui se pose alors est de déterminer comment se transforment les composantes des opérateurs tensoriels $T^{(n)}$ par rotation. On a :

$$R T^{(n)}_{x_i x_j \dots x_\ell} R^\dagger = R V_{x_i} R^\dagger R W_{x_j} R^\dagger \dots R Z_{x_\ell} R^\dagger \quad (\text{VII-47})$$

Or, comme \vec{V} , \vec{W} , ... \vec{Z} sont vectoriels, on peut utiliser la formule (VII-15) de transformation des composantes cartésiennes de ces opérateurs, de sorte que le second membre de (VII-47) s'écrit :

$$\sum_{i' j' \dots \ell'} (\mathcal{R})_{i' i} (\mathcal{R})_{j' j} \dots (\mathcal{R})_{\ell' \ell} V_{x_{i'}} W_{x_{j'}} \dots Z_{x_{\ell'}}$$

Pour finir, (VII-47) devient :

$$R \begin{matrix} T^{(n)} \\ x_i x_j \dots x_\ell \end{matrix} R^\dagger = \sum_{i' j' \dots \ell'} (\mathcal{R})_{i'i} (\mathcal{R})_{j'j} \dots (\mathcal{R})_{\ell'\ell} T^{(n)}_{x_{i'} x_{j'} \dots x_{\ell'}} \quad (\text{VII-48})$$

De façon plus générale, nous appellerons opérateur tensoriel $T^{(n)}$ tout ensemble de 3^n composantes (opérateurs) se transformant par rotation suivant la loi (VII-48). Il est clair que, non seulement les opérateurs produits tensoriels (VII-47), mais toutes leurs combinaisons linéaires (pour une même valeur de n) donnent des opérateurs $T^{(n)}$. L'ensemble des $T^{(n)}$ pour n fixé constitue un espace vectoriel de dimension infinie (\star) .

Nous avons donc obtenu des lois de transformation linéaire (VII-48) pour les composantes des opérateurs tensoriels. A ces lois de transformation correspond une représentation linéaire du groupe des rotations. En effet, si l'on applique successivement deux rotations R_1 et R_2 dans cet ordre, il faut écrire :

$$\begin{aligned} \left| \begin{aligned} T^{(n)}_{x_i x_j \dots x_\ell} &= R_1 T^{(n)}_{x_i x_j \dots x_\ell} R_1^\dagger \\ &= \sum_{i' j' \dots \ell'} (\mathcal{R}_1)_{i'i} (\mathcal{R}_1)_{j'j} \dots (\mathcal{R}_1)_{\ell'\ell} T^{(n)}_{x_{i'} x_{j'} \dots x_{\ell'}} \end{aligned} \right. \quad (\text{VII-49}) \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} \left| \begin{aligned} T^{(n)}_{x_i x_j \dots x_\ell} &= R_2 T^{(n)}_{x_i x_j \dots x_\ell} R_2^\dagger \\ &= \sum_{i' j' \dots \ell'} (\mathcal{R}_1)_{i'i} (\mathcal{R}_1)_{j'j} \dots (\mathcal{R}_1)_{\ell'\ell} R_2 T^{(n)}_{x_{i'} x_{j'} \dots x_{\ell'}} R_2^\dagger \\ &= \sum_{i' j' \dots \ell'} \sum_{i'' j'' \dots \ell''} (\mathcal{R}_1)_{i'i} (\mathcal{R}_1)_{j'j} \dots (\mathcal{R}_1)_{\ell'\ell} \times (\mathcal{R}_2)_{i''i'} (\mathcal{R}_2)_{j''j'} \dots (\mathcal{R}_2)_{\ell''\ell'} \\ &\quad T^{(n)}_{x_{i''} x_{j''} \dots x_{\ell''}} \\ &= \sum_{i'' j'' \dots \ell''} (\mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1)_{i''i} (\mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1)_{j''j} \dots (\mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1)_{\ell''\ell} T^{(n)}_{x_{i''} x_{j''} \dots x_{\ell''}} \end{aligned} \right. \quad (\text{VII-50}) \end{aligned}$$

(\star) Le nombre d'opérateurs scalaires (ou vectoriels) linéairement indépendants agissant dans un espace des états \mathcal{E} de dimension infinie est, en général, infini (on peut définir de façon indépendante des éléments de matrice réduits dans tous les $\mathcal{E}(\tau, j)$; cf. § C-2).

N.B. : ne pas confondre espace des opérateurs et espace des états \mathcal{E} (où agissent les éléments du premier espace).

← Cette formule est bien celle que l'on obtient en remplaçant, dans la définition (VII-48), \mathcal{R} par $\mathcal{R}_2 \mathcal{P}_1$ et R par $R_2 R_1$.

Il est alors naturel de se demander si cette représentation est réductible ou non. Dans le cas $n = 1$ (opérateurs vectoriels), la représentation est évidemment irréductible, car nous avons vu qu'un changement de base nous a permis d'introduire les composantes standard qui se transforment directement avec les matrices $(R^{[j=1]})$. Dans le cas où $n \geq 2$, ce n'est pas évident a priori. Cette fois encore, nous allons définir de nouvelles composantes de façon à pouvoir directement utiliser les résultats du chapitre VI concernant les représentations irréductibles du groupe des rotations.

2. COMPOSANTES SPHERIQUES

Nous allons introduire ici les "composantes sphériques" (ou, de façon plus explicite, les "composantes sphériques découplées") d'un tenseur $T^{(n)}$. Pour un opérateur vectoriel \vec{V} , ce sont les composantes V_m définies en (VII-38.a) que nous avons alors appelées composantes standard (si $n = 1$, les composantes standard et les composantes sphériques découplées se confondent, mais ce n'est plus le cas dès que $n \geq 2$, comme nous allons le voir). La matrice (S) de changement de base qui apparaît dans (VII-38.a) est donnée en (VII-27.b).

Pour un tenseur $V^{(n)} = \vec{V} \otimes \vec{W} \otimes \dots \otimes \vec{Z}$, les composantes sphériques découplées sont les $T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)}$ définis par le produit :

$$T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)} = V_{m_i} W_{m_j} \dots Z_{m_\ell} \tag{VII-51}$$

On a donc :

$$\begin{aligned} T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)} &= \sum_{i' j' \dots \ell'} (S)_{i' i} (S)_{j' j} \dots (S)_{\ell' \ell} V_{x_{i'}} W_{x_{j'}} \dots Z_{x_{\ell'}} \\ &= \sum_{i' j' \dots \ell'} (S)_{i' i} (S)_{j' j} \dots (S)_{\ell' \ell} T_{x_{i'} x_{j'} \dots x_{\ell'}}^{(n)} \end{aligned}$$

$$m_i, m_j \dots m_\ell = +1, \text{ si } i, j, \dots \ell = 1; 0 \text{ si } i, j \dots \ell = 2; -1 \text{ si } i, j \dots \ell = 3$$

$$x_{i'}, x_{j'} \dots x_{\ell'} = x \text{ si } i', j' \dots \ell' = 1; y \text{ si } i', j' \dots \ell' = 2; z \text{ si } i', j' \dots \ell' = 3$$

(VII-52.a)

Inversement, la matrice (S) étant unitaire, on a :

$$T_{x_i, x_j \dots x_\ell}^{(n)} = \sum_{i' j' \dots \ell'} (S)_{ii'}^* (S)_{jj'}^* \dots (S)_{\ell\ell'}^* T_{m_{i'}, m_{j'}, \dots m_{\ell'}}^{(n)} \quad (\text{VII-52.b})$$

Il est clair que ces deux égalités, introduites à partir d'un tenseur de la forme $\vec{V} \otimes \vec{W} \otimes \dots \otimes \vec{Z}$, sont valables pour un tenseur quelconque (elles sont linéaires en T).

Comment les composantes sphériques se transforment-elles par rotation ? La formule (VII-37.a) permet de calculer l'effet d'une rotation sur chaque composante $V_{m_i}, V_{m_j}, \dots Z_{m_\ell}$ de (VII-51) et on obtient (en intercalant autant de fois que nécessaire $R^\dagger R \equiv 1$ entre les opérateurs V_{m_i}, W_{m_j}, \dots) :

$$R T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)} R^\dagger = \sum_{i' j' \dots \ell'} (R^{[1]})_{m_i' m_i} (R^{[1]})_{m_j' m_j} \dots (R^{[1]})_{m_\ell' m_\ell} V_{m_i'} W_{m_j'} \dots Z_{m_\ell'} \quad (\text{VII-53.a})$$

ou encore :

$$R T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)} R^\dagger = \sum_{i' j' \dots \ell'} (R^{[1]})_{m_i' m_i} (R^{[1]})_{m_j' m_j} \dots (R^{[1]})_{m_\ell' m_\ell} T_{m_i' m_j' \dots m_\ell'}^{(n)} \quad (\text{VII-53.b})$$

Cette fois encore, on peut étendre par linéarité la validité de cette formule, du cas où $T^{(n)}$ est un produit tensoriel $\vec{V} \otimes \vec{W} \otimes \dots \vec{Z}$, au cas général.

Considérons maintenant n systèmes physiques, de moments cinétiques $j = 1$ [la valeur propre du carré de leur moment cinétique est $2\mathcal{K}^2$] : le système \mathcal{S}_1 , d'espace des états \mathcal{E}_1 (à 3 dimensions) engendré par les kets $|1: m_1 \rangle$ ($m_1 = +1, 0$ ou -1); le système \mathcal{S}_2 , d'espace des états \mathcal{E}_2 , engendré par les 3 kets $|2: m_2 \rangle$ ($m_2 = +1, 0$ ou -1), etc... Pour le système \mathcal{S} total obtenu par la réunion de $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots \mathcal{S}_n$, une base de l'espace des états (base "découplée") est donnée par l'ensemble des kets :

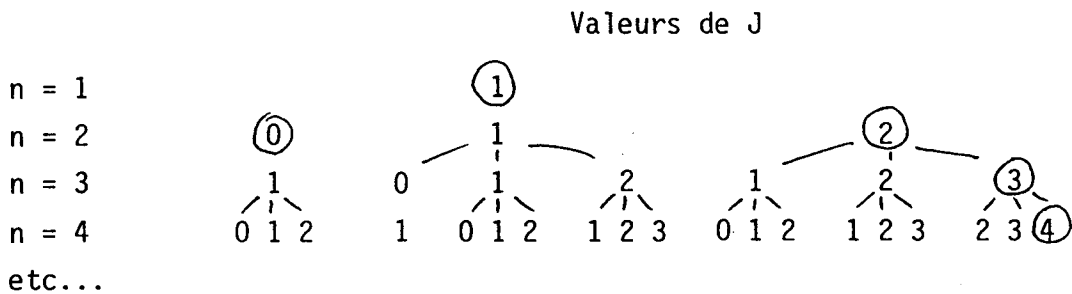
$$|1: m_1 \rangle \otimes |2: m_2 \rangle \otimes \dots \otimes |n: m_n \rangle$$

où tous les m valent +1, 0 ou -1. Par rotation de l'ensemble du système \mathcal{S} , ces kets se transforment selon :

$$\begin{aligned}
 R_{\vec{U}}(\phi) [|1: m_1 \rangle \otimes |2: m_2 \rangle \otimes \dots \otimes |n: m_n \rangle] \\
 &= [e^{-i\phi J_1/\hbar} |1: m_1 \rangle] \otimes [e^{-i\phi J_2/\hbar} |2: m_2 \rangle] \dots \otimes [e^{-i\phi J_n/\hbar} |n: m_n \rangle] \\
 &= \sum_{m'_1 m'_2 \dots m'_n} (R^{[1]})_{m'_1 m_1} (R^{[1]})_{m'_2 m_2} \dots (R^{[1]})_{m'_n m_n} \\
 &\quad |1: m_1 \rangle \otimes |2: m_2 \rangle \otimes \dots \otimes |n: m_n \rangle \tag{VII-54}
 \end{aligned}$$

[dans cette égalité, $\vec{J}_1, \vec{J}_2, \dots$ désignent les opérateurs de moment cinétique associés respectivement à $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots$]. Nous obtenons donc, pour les kets de la base découplée, exactement la même loi de transformation qu'en (VII-53.b) pour les composantes sphériques découplées. En d'autres termes, les $T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)}$ se transforment suivant des matrices obtenues par produit tensoriel de matrices $(R^{[1]})$.

C'est cette propriété qui va maintenant nous permettre d'appliquer la théorie générale du couplage des moments cinétiques (passage des composantes sphériques découplées aux composantes couplées, ou composantes standard). En composant n fois des matrices de rotations $R^{[j]}$ où $j = 1$, nous savons que les valeurs de J obtenues sont :



Nous voyons apparaître des représentations irréductibles du groupe des rotations allant jusqu'à la valeur maximale $J = n$ (valeurs entourées sur le tableau ^(☆)). On remarque que cette valeur maximale n'est obtenue qu'une seule fois (un seul schéma de couplage), contrairement aux autres valeurs. Les opérateurs obtenus après cette opération de couplage des moments cinétiques pour obtenir des représentations irréductibles sont appelés "opérateurs tensoriels irréductibles". Le paragraphe 3 suivant est consacré à leur définition précise et à l'étude de certaines de leurs propriétés.

(☆) La valeur $J = 0$ est également entourée pour $n = 2$ car c'est la première fois qu'elle est obtenue. Elle correspond à un opérateur scalaire (invariant par rotation).

3. OPERATEURS TENSORIELS IRREDUCTIBLES

Avant d'aborder le cas général, nous allons étudier en détail le cas où $n = 2$, qui est la valeur la plus faible de n pour laquelle on n'est pas ramené aux opérateurs vectoriels initiaux ($n = 1$). Ceci nous permettra d'introduire pratiquement toutes les idées et les notations qui apparaissent dans le cas général où n est quelconque.

a. Décomposition d'un tenseur $n = 2$

α) Définition des tenseurs $T^{(K)}$

Dans le cas où $n = 2$, le tenseur $T^{(2)}$ [également noté \bar{T}] possède 9 composantes cartésiennes $\bar{T}_{x_i x_j}$ et 9 composantes sphériques (découplées) $\bar{T}_{m_i m_j}$. Ces dernières se transforment par rotation comme les 9 kets :

$$|1\ 1\ m_i\ m_j\rangle = |1: m_i\rangle \otimes |2: m_j\rangle \quad (\text{VII-55})$$

associés à deux systèmes de moment cinétique 1. Par couplage de ces états, on obtient les kets $|J, M\rangle$ dont l'expression explicite est [cf. exercice (ii) du § C-2.b du chapitre VI] :

$$\left\{ \begin{array}{l} |2, 2\rangle = |1\ 1\ 1\ 1\rangle \\ |2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 1\ 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 0\ 1\rangle \\ |2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |1\ 1\ 1\ -1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}} |1\ 1\ 0\ 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |1\ 1\ -1\ 1\rangle \\ |2, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 0\ -1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ -1\ 0\rangle \\ |2, -2\rangle = |1\ 1\ -1\ -1\rangle \end{array} \right. \quad (\text{VII-56.a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 1\ 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 0\ 1\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 1\ -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ -1\ 1\rangle \\ |1, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 0\ -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ -1\ 0\rangle \end{array} \right. \quad (\text{VII-56.b})$$

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |1\ 1\ 1\ -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |1\ 1\ 0\ 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1\ 1\ -1\ 1\rangle \quad (\text{VII-56.c})$$

Les fractions qui apparaissent dans ces égalités sont les divers coefficients de Clebsch-Gordan $\langle 1 \ 1 \ m_1 \ m_2 \ | \ J \ M \rangle$. De la même façon que ces coefficients permettent de construire les états $|J, M\rangle$ de la base couplée à partir des états $|1 \ 1 \ m_1 \ m_2\rangle$, nous pouvons construire les "composantes standard" (ou composantes sphériques couplées) $T_Q^{(K)}$ de l'opérateur tensoriel \bar{T} par :

$$T_Q^{(K)} = \sum_{m_1 \ m_2} \langle 1 \ 1 \ m_1 \ m_2 \ | \ K \ Q \rangle \bar{T}_{m_1 \ m_2} \quad (\text{VII-57.a})$$

Dans cette formule, K remplace l'indice J du moment cinétique total et vaut 2, 1 ou 0; l'indice Q qui remplace M varie par valeurs entières entre $+K$ et $-K$. Inversement, on a :

$$\bar{T}_{m_1 \ m_2} = \sum_{K, Q} \langle 1 \ 1 \ m_1 \ m_2 \ | \ K \ Q \rangle T_Q^{(K)} \quad (\text{VII-57.b})$$

Alors, de même que :

$$R |J, M\rangle = \sum_{M'} (R^{[J]})_{M'M} |J, M'\rangle \quad (\text{VII-58.a})$$

on a :

$$\boxed{R T_Q^{(K)} R^\dagger = \sum_{Q'} (R^{[K]})_{Q'Q} T_{Q'}^{(K)}} \quad (\text{VII-58.b})$$

Le résultat découle immédiatement de l'identité des formules de transformation des $\bar{T}_{m_1 m_2}$ et de celle des kets $|1 \ 1 \ m_1 \ m_2\rangle$, et du fait que les $T_Q^{(K)}$ sont définis à partir des $\bar{T}_{m_1 m_2}$ exactement de la même façon que les $|J, M\rangle$ à partir des $|1 \ 1 \ m_1 \ m_2\rangle$. Le calcul qui conduit à (VII-58.a) pour des kets donnera automatiquement (VII-58.b) pour des opérateurs [comme nous l'avons dit dans l'introduction de ce chapitre, il suffit de remplacer l'action de R sur un ket par le commutateur pour un opérateur] .

Vérifions-le cependant de façon explicite. Pour cela, écrivons que :

$$|J, M\rangle = \sum_{m_i \ m_j} \langle j_1 \ j_2 \ m_i \ m_j \ | \ J, M \rangle |j_1 \ j_2 \ m_i \ m_j\rangle \quad (\text{VII-59})$$

(dans ce calcul, seules les valeurs $j_1 = j_2 = 1$ nous intéressent; cependant, le calcul est le même lorsque j_1 et j_2 sont quelconques et son résultat nous sera utile dans la suite). On a donc :

$$\begin{aligned}
\langle J, M | R | J', M' \rangle &= \delta_{JJ'} (R^{[J]})_{M'M} \\
&= \sum_{m_i m_j} \sum_{m'_i m'_j} \langle j_1 j_2 m_i m_j | J M \rangle \langle j_1 j_2 m'_i m'_j | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 m_i m_j | R | j_1 j_2 m'_i m'_j \rangle
\end{aligned}
\tag{VII-60}$$

avec :

$$\begin{aligned}
\langle j_1 j_2 m_i m_j | R | j_1 j_2 m'_i m'_j \rangle &= \langle j_1 m'_i | R_1 | j_1 m_i \rangle \langle j_2 m'_j | R_2 | j_2 m_j \rangle \\
&= (R^{[j_1]})_{m'_i m_i} (R^{[j_2]})_{m'_j m_j}
\end{aligned}
\tag{VII-61}$$

Il vient donc :

$$\begin{aligned}
\delta_{JJ'} (R^{[J]})_{M'M} &= \sum_{m_i m_j} \sum_{m'_i m'_j} \langle j_1 j_2 m_i m_j | J M \rangle \langle j_1 j_2 m'_i m'_j | J' M' \rangle \\
&\quad (R^{[j_1]})_{m'_i m_i} (R^{[j_2]})_{m'_j m_j}
\end{aligned}
\tag{VII-62}$$

Considérons alors l'expression :

$$\begin{aligned}
R T_Q^{(K)} R^\dagger &= \sum_{m_i m_j} \langle 1 1 m_i m_j | K Q \rangle R \bar{T}_{m_i m_j} R^\dagger \\
&= \sum_{m_i m_j} \sum_{m'_i m'_j} \langle 1 1 m_i m_j | K Q \rangle (R^{[1]})_{m'_i m_i} (R^{[1]})_{m'_j m_j} \bar{T}_{m'_i m'_j} \\
&= \sum_{m_i m_j} \sum_{m'_i m'_j} \langle 1 1 m_i m_j | K Q \rangle (R^{[1]})_{m'_i m_i} (R^{[1]})_{m'_j m_j} \\
&\quad \times \sum_{K' Q'} \langle 1 1 m'_i m'_j | K' Q' \rangle T_{Q'}^{(K')}
\end{aligned}
\tag{VII-63}$$

[On a utilisé les deux relations (VII-57)]. Compte tenu de (VII-62), où l'on fait $j_1 = j_2 = 1$, on peut effectuer la sommation sur les 4 indices m_i, m_j, m'_i, m'_j en faisant apparaître $\delta_{KK'}$, qui supprime également la sommation sur K' . Pour finir, il reste l'égalité (VII-58.b).

Les $T^{(K)}$ sont appelés "opérateurs tensoriels irréductibles"; chacun d'entre eux a $2K+1$ composantes standard $T_Q^{(K)}$. La formule (VII-57.b) permet d'obtenir les 9 composantes sphériques découplées associées à chaque $T^{(K)}$ [dans cette formule, on effectue la somme sur Q , mais par sur K , de façon à obtenir les $T_{m_1 m_2}$ associés à chaque valeur de K séparément]. L'égalité (VII-52.b) donne ensuite les composantes cartésiennes correspondantes (le calcul explicite sera effectué au § β de ce paragraphe).

Le tenseur de départ $\overline{\overline{T}}$ apparaît comme la somme de 3 contributions venant des valeurs $K = 0, 1, 2$ [somme sur K dans (VII-57.b)] :

$$\overline{\overline{T}}(n) = \overline{\overline{T}}(K=2) + \overline{\overline{T}}(K=1) + \overline{\overline{T}}(K=0) \quad (\text{VII-64})$$

(voir le § β suivant où cette décomposition est effectuée).

Pour une rotation infinitésimale, on sait que :

$$R_{\vec{u}}(\delta\phi) = 1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar} J_{\vec{u}} \quad (\text{VII-65})$$

de sorte que (VII-58.b) devient, au premier ordre en $\delta\phi$:

$$[J_{\vec{u}}, T_Q^{(K)}] = \sum_{Q'} \langle J=K, M=Q' | J_{\vec{u}} | J=K, M=Q \rangle T_{Q'}^{(K)} \quad (\text{VII-66})$$

En prenant \vec{u} parallèle à $0x, 0y, 0z$ successivement, et en combinant linéairement les deux premières inégalités obtenues pour faire apparaître $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$, on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} [J_z, T_Q^{(K)}] = Q \hbar T_Q^{(K)} \\ [J_{\pm}, T_Q^{(K)}] = \hbar \sqrt{K(K+1) - Q(Q\pm 1)} T_{Q\pm 1}^{(K)} \end{array} \right. \quad (\text{VII-67})$$

Ces relations peuvent constituer une autre définition d'un opérateur tensoriel irréductible $T_Q^{(K)}$ [par intégration, il est possible de remonter des égalités (VII-67) qui concernent les transformations des opérateurs dans une rotation infinitésimale à celles qui donnent les transformations dans des rotations finies; on obtient alors (VII-58.b)] .

Remarque : Pour le moment, nous n'avons démontré les égalités (VII-67) ou les précédentes que dans les cas où $K = 2, 1$ ou 0 . Nous verrons cependant qu'elles restent valables lorsque K prend une valeur positive entière quelconque.

β) Calculs explicites

En principe, les formules que nous avons écrites contiennent tous les résultats. Nous allons cependant utiliser les égalités (VII-56) pour les expliciter, de façon à rendre plus évidente la nature des tenseurs obtenus. Nous allons en fait effectuer deux calculs : tout d'abord, nous prendrons le cas simple où $\overline{\overline{T}} = \vec{V} \otimes \vec{W}$ et donnerons les expressions des $T_Q^{(K)}$; puis,

pour un tenseur \overline{T} quelconque, nous écrirons les matrices associées à la décomposition (VII-64), ce qui fera apparaître la façon dont se répartissent les divers éléments de matrice associés à chaque valeur de K.

Supposons donc que :

$$\overline{T} = \vec{V} \otimes \vec{W} \tag{VII-68}$$

et commençons par calculer le tenseur $T^{(K)}$ associé à la valeur minimale de K.

(i) $K = 0$

La formule (VII-56.a) donne :

$$\begin{aligned} T_{(Q=0)}^{(K=0)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} [V_{+1} W_{-1} - V_0 W_0 + V_{-1} W_{+1}] \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} [V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z] \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \vec{V} \cdot \vec{W} \end{aligned} \tag{VII-69}$$

L'opérateur scalaire (invariant par rotation) que nous obtenons est donc simplement proportionnel au produit scalaire $\vec{V} \cdot \vec{W}$.

(ii) $K = 1$

$$\begin{aligned} T_1^{(K=1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{+1} W_0 - V_0 W_{+1}) = -\frac{1}{2} [V_x W_z - V_z W_x + i(V_y W_z - V_z W_y)] \\ T_0^{(K=1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{+1} W_{-1} - V_{-1} W_{+1}) = -\frac{i}{\sqrt{2}} [V_y W_x - V_x W_y] \\ T_{-1}^{(K=1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (V_0 W_{-1} - V_{-1} W_0) = \frac{1}{2} [V_z W_x - V_x W_z - i(V_z W_y - V_y W_z)] \end{aligned} \tag{VII-70}$$

On reconnaît alors les composantes de l'opérateur :

$$\vec{K} = \vec{V} \times \vec{W} \tag{VII-71}$$

et on voit que :

$$\begin{aligned} T_1^{(K=1)} &= \frac{i}{\sqrt{2}} K_{+1} \\ T_0^{(K=1)} &= \frac{i}{\sqrt{2}} K_0 \end{aligned} \tag{VII-72}$$

$$T_{-1}^{(K=1)} = \frac{i}{\sqrt{2}} K_{-1}$$

En d'autres termes :

$$T^{(K=1)} = \frac{i}{\sqrt{2}} \vec{K} = \frac{i}{\sqrt{2}} \vec{V} \times \vec{W} \tag{VII-73}$$

Les relations de commutation de cet opérateur avec le moment cinétique total \vec{J} sont celles d'un opérateur vectoriel.

(iii) $K = 2$

$$\begin{aligned} T_2^{(2)} &= V_{+1} W_{+1} \\ T_1^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{+1} W_0 + V_0 W_{+1}) \\ T_0^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (V_{+1} W_{-1} + 2V_0 W_0 + V_{-1} W_{+1}) \\ T_{-1}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (V_0 W_{-1} + V_{-1} W_0) \\ T_{-2}^{(2)} &= V_{-1} W_{-1} \end{aligned} \quad (\text{VII-74})$$

L'expression de $T_0^{(2)}$ peut être mise sous la forme :

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} [3V_z W_z - \vec{V} \cdot \vec{W}] \quad (\text{VII-75})$$

Ce tenseur ne peut pas être ramené à un tenseur $n < 2$, au contraire des deux précédents. En composantes cartésiennes, il faut donc le décrire par une matrice 3×3 contenant 9 opérateurs. Nous verrons que cette matrice est symétrique et à trace nulle.

Remarque : On réserve parfois le nom d'opérateur tensoriel irréductible aux opérateurs $T^{(K)}$ qui, comme celui-ci, ne peuvent être réduits à des tenseurs d'ordre n inférieur (la valeur de K et la valeur maximale permise $K = n$).

Prenons maintenant un tenseur quelconque [qui n'est pas nécessairement de la forme (VII-68)] et calculons ses composantes cartésiennes $\bar{T}_{x_i x_j}$ en fonction des $T_{m_i m_j}$, puis des $T_Q^{(K)}$. Pour \bar{T}_{xx} par exemple, on obtient :

$$\begin{aligned} \bar{T}_{xx} &= \sum_{i,j} (S)_{i'1}^* (S)_{j'1}^* T_{m_i m_j} \\ &= \frac{1}{2} [T_{11} + T_{-1-1} - T_{1-1} - T_{-11}] \end{aligned} \quad (\text{VII-76})$$

puis, en utilisant les coefficients de Clebsch-Gordan donnés par (VII-56) :

$$\begin{aligned} \bar{T}_{xx} &= \frac{1}{2} [T_{2}^{(2)} + T_{-2}^{(2)} - (\frac{1}{\sqrt{6}} T_{0}^{(2)} + \frac{1}{\sqrt{2}} T_{0}^{(1)} + \frac{1}{\sqrt{3}} T_{0}^{(0)}) \\ &\quad - (\frac{1}{\sqrt{6}} T_{0}^{(2)} - \frac{1}{\sqrt{2}} T_{0}^{(1)} + \frac{1}{\sqrt{3}} T_{0}^{(0)})] \\ &= \frac{1}{2} [T_{2}^{(2)} + T_{-2}^{(2)}] - \frac{1}{\sqrt{6}} T_{0}^{(2)} - \frac{1}{\sqrt{3}} T_{0}^{(0)} \end{aligned} \tag{VII-77}$$

De même :

$$\begin{aligned} T_{xy} &= \frac{i}{2} [-T_{11} + T_{-1-1} + T_{-11} - T_{-11}] \\ &= \frac{i}{2} [T_{-2}^{(2)} - T_{2}^{(2)}] - \frac{i}{\sqrt{2}} T_{0}^{(1)} \end{aligned} \tag{VII-78}$$

Des calculs du même type peuvent être effectués pour les 7 composantes restantes et permettent d'obtenir la contribution de $T^{(0)}$, $T^{(1)}$ et $T^{(2)}$ aux composantes cartésiennes de \bar{T} . Celle de $T^{(0)}$ est :

$$- \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} T_{0}^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & T_{0}^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & T_{0}^{(0)} \end{pmatrix}$$

C'est un tenseur scalaire d'ordre $n = 2$. Les composantes non nulles sont placées sur la diagonale principale, elles sont égales et invariantes dans toute rotation. La contribution de $T^{(1)}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} &\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -T_{0}^{(1)} & \frac{i}{\sqrt{2}} [T_{1}^{(1)} + T_{-1}^{(1)}] \\ T_{0}^{(1)} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} [T_{1}^{(1)} - T_{-1}^{(1)}] \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} [T_{1}^{(1)} + T_{-1}^{(1)}] & -\frac{1}{\sqrt{2}} [T_{1}^{(1)} - T_{-1}^{(1)}] & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -T_z^{(1)} & T_y^{(1)} \\ T_z^{(1)} & 0 & -T_x^{(1)} \\ -T_y^{(1)} & T_x^{(1)} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{VII-79.a}$$

On a posé, comme pour tout opérateur vectoriel :

$$\begin{aligned} T_x^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [T_{-1}^{(1)} - T_1^{(1)}] \\ T_y^{(1)} &= \frac{i}{\sqrt{2}} [T_1^{(1)} + T_{-1}^{(1)}] \\ T_z^{(1)} &= T_0^{(1)} \end{aligned} \quad (\text{VII-79.b})$$

Le tenseur obtenu a une trace nulle et est totalement antisymétrique. Il peut s'écrire :

$$\frac{i}{\sqrt{2}} \vec{T}^{(1)} \times$$

ou encore, si $\vec{T} = \vec{V} \otimes \vec{W}$:

$$\frac{1}{2} (\vec{V} \times \vec{W}) \times$$

Enfin, la contribution de $T^{(k=2)}$ est :

$$\left(\begin{array}{ccc} \frac{1}{2} [T_2^{(2)} + T_{-2}^{(2)}] - \frac{1}{\sqrt{6}} T_0^{(2)} & - \frac{i}{2} [T_2^{(2)} - T_{-2}^{(2)}] & - \frac{1}{2} [T_1^{(2)} - T_{-1}^{(2)}] \\ - \frac{i}{2} [T_2^{(2)} - T_{-2}^{(2)}] & - \frac{1}{2} [T_2^{(2)} + T_{-2}^{(2)}] - \frac{1}{\sqrt{6}} T_0^{(2)} & \frac{i}{2} [T_1^{(2)} + T_{-1}^{(2)}] \\ - \frac{1}{2} [T_1^{(2)} - T_{-1}^{(2)}] & \frac{i}{2} [T_1^{(2)} + T_{-1}^{(2)}] & \frac{2}{\sqrt{6}} T_0^{(2)} \end{array} \right)$$

Nous obtenons, comme annoncé plus haut, une matrice symétrique à trace nulle.

Remarques :

(i) Seul $T^{(0)}$ contribue à la trace de \vec{T} .

(ii) On dit qu'un tenseur $T^{(K)}$ est hermitique si ses composantes cartésiennes le sont [la matrice (S) étant complexe, ceci n'entraîne pas l'hermiticité des composantes sphériques]. Sur la matrice d'opérateur que nous venons d'écrire, on voit que l'hermiticité est réalisée pour $T^{(k=2)}$ et $T^{(k=0)}$ si :

$$[T_Q^{(K)}]^\dagger = (-1)^Q T_{-Q}^{(K)} \quad (\text{VII-80})$$

Pour $T^{(k=1)}$, cette définition assure que les trois opérateurs $T_x^{(1)}$, $T_y^{(1)}$ et $T_z^{(1)}$ définis en (VII-79.b) sont hermitiques au sens habituel (en tant que composantes d'un opérateur vectoriel \vec{T}). Cependant, pour la contribution à un tenseur d'ordre 2, on voit que les opérateurs qui apparaissent sont anti-

hermitiques [à cause du $i/\sqrt{2}$ en facteur dans (VII-79.a)] : l'hermitique conjugué de chaque opérateur est celui qui est symétrique par rapport à la diagonale principale (\star).

b. Cas général

Partant de la base découplée écrite plus haut :

$$|1: m_1 > \otimes |2: m_2 > \otimes \dots \otimes |n: m_n >$$

où chacun des kets est associé à la même valeur $j = 1$, on peut passer à une nouvelle base couplée de vecteurs propres communs à \vec{J}^2 et J_z [l'opérateur \vec{J} désigne le moment cinétique total $\vec{J}_1 + \vec{J}_2 + \dots + \vec{J}_n$]. Par exemple, on choisit de coupler \vec{J}_1 et \vec{J}_2 pour obtenir un nombre quantique J_{12} (on pose $\vec{J}_{12} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$), puis leur somme à \vec{J}_3 ce qui donne le nombre quantique J_{123} (on pose $\vec{J}_{123} = \vec{J}_{12} + \vec{J}_3$), etc... On obtient les états :

$$|J_{12}, J_{123}, \dots; J, M > = \sum_{m_1 + \dots + m_\ell = M} C_{m_1 \dots m_\ell} [J_{12}, J_{123}, \dots, J M]$$

$$|1: m_1 > \otimes |2: m_2 > \dots \otimes |n: m_\ell > \tag{VII-81}$$

Dans cette égalité, les coefficients C sont des constantes obtenues par produits de coefficients de Clebsch-Gordan. Lorsque, dans (VII-81), M varie de +J à -J (les autres nombres quantiques J_{12}, J_{123}, \dots restant constants), on obtient $2J+1$ kets qui engendrent un sous-espace irréductible à $2J+1$ dimensions ($\star\star$). Ces sous-espaces sont spécifiés, non seulement par la valeur de J, mais aussi par celle de J_{12}, J_{123}, \dots (à la différence de ce qui se produisait dans le cas $n = 2$).

On définit donc les "composantes standard" par :

$$T_Q^{(K)} [J_{12}, J_{123}, \dots] = \sum_{m_1 + m_2 + \dots + m_\ell = Q} C_{m_1 m_2 \dots m_\ell} [J_{12}, J_{123}, \dots; K Q] T_{m_1 m_2 \dots m_\ell}^{(n)} \tag{VII-82}$$

(\star) De façon analogue, le complexe conjugué ^{d'un élément} d'une matrice hermitique est l'élément symétrique dans la matrice.

($\star\star$) Les sous-espaces irréductibles obtenus, ainsi que la base standard que l'on peut construire, ne sont évidemment pas les mêmes si l'on change le schéma de couplage des moments cinétiques.

Ces opérateurs se transforment par rotation suivant l'égalité :

$$R T_Q^{(K)} [J_{12}, J_{123}, \dots] R^\dagger = \sum_{Q'} (R^{[J=K]})_{Q',Q} T_{Q'}^{(K)} [J_{12}, J_{123}, \dots] \quad (\text{VII-83})$$

en tous points analogue à (VII-58.b).

Réciproquement, les coefficients C définissent une matrice réelle orthogonale $3^n \times 3^n$; on peut donc écrire, grâce aux mêmes coefficients, les composantes sphériques découplées $T_{m_i m_j \dots m}$ en fonction des composantes tensorielles irréductibles.

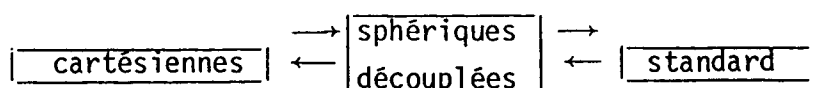
Remarques :

i. Pour exprimer la propriété caractéristique (VII-83) des opérateurs tensoriels irréductibles, on dit parfois que des opérateurs $T_Q^{(K)}$ se transforment par rotation comme les harmoniques sphériques d'ordre $\ell = K$.

ii. Le nombre K est entier, jamais demi-entier, comme on le voit par exemple sur le tableau qui figure à la fin du § B-2 précédent. Pour les opérateurs, contrairement à ce qui se produit pour les vecteurs d'état, seules peuvent intervenir les "vraies" représentations de $R_{(3)}$, pas les représentations "bivaluées" (chap. VI, § 5-b). On peut d'ailleurs remarquer qu'un opérateur d'ordre demi-entier se changerait en son opposé sous l'effet d'une rotation de 2π : ceci entraînerait qu'une rotation globale de l'ensemble des appareils de mesure correspondant changerait tous les résultats possibles en leurs opposés (le changement de signe d'une observable a des conséquences physiques immédiates, ce qui n'est pas le cas pour un vecteur d'état).

iii. La valeur maximale $K=n$ est réalisée une seule fois [$J_{12} = 2$, $J_{123} = 3$, etc...] . On réserve parfois le nom d'opérateur tensoriel irréductible aux opérateurs $T^{(K)}$ où $K = n$ [ils correspondent aux valeurs entourées d'un cercle à droite du tableau donné à la fin du § B-2] . On les note alors simplement $T^{(K)}$ puisque les valeurs de J_{12} , J_{123} , ... n'ont plus à être précisées.

iv. On prendra garde à ne pas confondre les trois types de composantes tensorielles



qui sont toutes différentes sauf si $n = 1$ (opérateur vectoriel). Beaucoup d'auteurs appellent "sphériques" (sans préciser "couplées") les composantes standard.

4. PROPRIETES DES OPERATEURS TENSORIELS IRREDUCTIBLES

a. Relations de commutation avec \vec{J}

Les relations de commutation d'un opérateur tensoriel irréductible $T_Q^{(K)}$ avec le moment cinétique total \vec{J} du système considéré peuvent être obtenues de la même façon qu'au paragraphe 3.a précédent [égalités (VII-65), (VII-66) et (VII-67)]. En considérant une rotation infinitésimale d'opérateur $1 - i\delta\phi J_U/\hbar$, et en identifiant les termes en $\delta\phi$, on obtient les relations :

$$\begin{cases} [J_Z, T_Q^{(K)}] = \hbar Q T_Q^{(K)} \\ [J_{\pm}, T_Q^{(K)}] = \hbar \sqrt{K(K+1) - Q(Q\pm 1)} T_{Q\pm 1}^{(K)} \end{cases} \quad (\text{VII-84})$$

qui sont donc démontrées dans le cas général.

Ces formules donnent une condition nécessaire et suffisante pour que $2K+1$ opérateurs $T_Q^{(K)}$ puissent être considérés comme les composantes d'un opérateur tensoriel irréductible d'ordre K ; elles expriment que les $T_Q^{(K)}$ se transforment par rotation comme des kets $|J = K, M = Q\rangle$;

(elles peuvent servir de définition pour les opérateurs tensoriels irréductibles.

b. Symétries des $T^{(K)}$; hermiticité

Dans tout ce paragraphe b, nous supposons que K a sa valeur maximale :

$$K = n \quad (\text{VII-85})$$

Alors, si l'on revient aux composantes cartésiennes de $T^{(K)}$, on constate que ce tenseur est symétrique et de trace nulle.

Commençons par établir la symétrie du tenseur et, pour cela, commençons par montrer que les composantes sphériques découplées $T_{m_1 m_2 \dots m_\ell}$ sont invariantes par permutation de deux indices, m_i et m_j par exemple.

Cette propriété est évidemment vérifiée si tous les indices m valent $+1$. En effet, comme :

$$|J=K, M=K\rangle = |1: m = 1\rangle \otimes |2: m = 1\rangle \otimes \dots \otimes |n: m = 1\rangle \quad (\text{VII-86.a})$$

on a simplement lorsque $K = n$:

$$T_{Q=K}^{(K)} = T_{1,1,1\dots 1}^{(n)} \quad (\text{VII-86.b})$$

Appliquons J_- à l'égalité (VII-86.a) :

$$J_- = J_{1-} + J_{2-} + \dots + J_{n-} \quad (\text{VII-87})$$

Il vient :

$$|J=K, M=K-1\rangle = [K(K+1) - K(K-1)]^{-1/2} \sqrt{2} \\ \times \left\{ |1: m=0\rangle \otimes |2: m=1\rangle \otimes \dots \otimes |n: m=1\rangle \right. \\ + |1: m=1\rangle \otimes |2: m=0\rangle \otimes \dots \otimes |n: m=1\rangle \\ \left. + \dots + |1: m=1\rangle \otimes |2: m=1\rangle \otimes \dots \otimes |n: m=0\rangle \right\} \quad (\text{VII-88})$$

Donc, si $K = n$:

$$T_{Q=K-1}^{(K)} = \frac{1}{\sqrt{K}} \left[T_{0\ 1\ 1\dots 1}^{(n)} + T_{1\ 0\ 1\dots 1}^{(n)} + \dots + T_{1\ 1\ 1\dots 0}^{(n)} \right] \quad (\text{VII-89.a})$$

et $T_{Q=K-1}^{(K)}$ est encore une fonction symétrique des $T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)}$.

Pour obtenir les composantes sphériques $T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)}$, il faut ensuite inverser les formules précédentes : [on inverse les égalités (VII-82) en supposant que, de tous les tenseurs $T^{(K')}$ qui y apparaissent, seul celui pour lequel $K=n$ est non nul]. De fait, la matrice des coefficients $C_{m_i m_j \dots m_\ell}$ étant orthogonale, aucun calcul n'est nécessaire, et (VII-89.a) donne simplement :

$$T_{0\ 1\ 1\dots 1}^{(n)} = T_{1\ 0\ 1\dots 1}^{(n)} = \dots = T_{1\ 1\ 1\dots 0}^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{K}} T_{Q=K-1}^{(K)} \quad (\text{VII-89.b})$$

qui montre qu'effectivement les composantes $T_{m_i m_j \dots m}^{(n)}$ sont invariantes par permutation de deux de leurs indices (*).

Passons maintenant aux coordonnées cartésiennes. Pour cela, on utilise la formule (VII-52.b), et on constate que la même propriété de symétrie est vérifiée par les composantes cartésiennes [c'est la même matrice (S) qui intervient pour changer chaque indice sphérique en indice cartésien]. La propriété de symétrie annoncée est donc vérifiée.

(*) Si la somme Q des indices m vaut K , ou $K-1$, on voit même que toutes les composantes associées à la même valeur de cette somme sont égales. Cette propriété n'est cependant pas générale quel que soit Q [cf. formules (VII-56.a)], mais reste en fait limitée à $Q = \pm K$, $Q = \pm K-1$ (toujours si $K=n$).

Dans le cas où $K = 2$, on peut effectivement constater la symétrie du tenseur écrit au § B-3.β. Dans le cas où $K = 3$ par exemple, on aura :

$$T_{x \ x \ y}^{(K=3)} = T_{x \ y \ x}^{(K=3)} = \dots$$

relation qui n'est évidemment pas vérifiée pour un opérateur tensoriel quelconque (réductible).

Montrons maintenant que $T^{(K)}$ est un tenseur à trace nulle :

$$\sum_{x_i=x,y,z} T_{x_i \ x_i \ x_j \dots \ x_\ell} = 0 \tag{VII-90}$$

(On a choisi ici de contracter les premiers indices, c'est-à-dire de les prendre égaux et de sommer sur leurs 3 valeurs possibles; on pourrait évidemment faire de même pour deux indices quelconques, consécutifs ou non, et la suite du raisonnement serait pratiquement la même).

La propriété annoncée découle du fait que, si l'on commence par coupler les deux premiers moments cinétiques \vec{J}_1 et \vec{J}_2 pour former $J_{12} = 0$, et si l'on fait ensuite le produit du ket obtenu par des kets absolument quelconque pour les systèmes 3, 4, ..., K, on ne peut obtenir que des états orthogonaux à $|J = K, M\rangle$. Ce résultat provient simplement du fait que, si $J_{12} = 0$, la valeur maximale de J est n-2 (des kets propres de \vec{J}^2 de valeurs propres différentes sont orthogonaux). Le ket associé à ce couplage de \vec{J}_1 et \vec{J}_2 s'écrit [formule (VII-56.c)] :

$$|J_{12} = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|1: m_1 = 1\rangle |2: m_2 = -1\rangle - |1: m_1 = 0\rangle |2: m_2 = 0\rangle + |1: m_1 = -1\rangle |2: m_2 = 1\rangle] \tag{VII-91}$$

Le fait que :

$|J_{12} = 0\rangle \otimes |3: m_3\rangle \otimes |4: m_4\rangle \otimes \dots \otimes |n: m_\ell\rangle$
soit orthogonal à $|J = K, M\rangle$ entraîne alors que :

$$C_{1-1 \ m_3 m_4 \dots \ m_\ell} - C_{00 \ m_3 m_4 \dots \ m_\ell} + C_{-11 \ m_3 m_4 \dots \ m_\ell} = 0 \tag{VII-92.a}$$

[où les C ont été définis en (VII-81)] . Cette égalité a pour conséquence que :

$$T_{1-1 m_3 m_4 \dots m_\ell}^{(K)} - T_{0 0 m_3 m_4 \dots m_\ell}^{(K)} + T_{+11 m_3 m_4 \dots m_\ell}^{(K)} = 0 \quad (\text{VII-92.b})$$

Il ne nous reste plus qu'à passer aux composantes cartésiennes en utilisant autant de fois que nécessaire la matrice (S) de changement de base [formules (VII-52)]. Si l'on commence par transformer les deux premiers indices en indices cartésiens, il vient :

$$T_{xx m_3 m_4 \dots m_\ell}^{(K)} + T_{yy m_3 m_4 \dots m_\ell}^{(K)} + T_{zz m_3 m_4 \dots m_\ell}^{(K)} = 0 \quad (\text{VII-93})$$

[nous retrouvons le résultat du § B-3.a.β : la trace d'un tenseur sur deux indices n'apparaît que dans le tenseur où les moments cinétiques correspondants sont couplés pour donner un moment nul] . On peut, si on le désire, changer également les autres indices sphériques en cartésiens, et l'on obtient l'égalité (VII-90).

Nous avons déjà dit qu'un opérateur tensoriel \overline{T} est considéré comme hermitique si ses composantes cartésiennes sont des opérateurs hermitiques. La condition nécessaire et suffisante pour qu'il en soit ainsi est que :

$$\boxed{[T_Q^{(K)}]^\dagger = (-1)^Q T_{-Q}^{(K)}} \quad (\text{VII-94})$$

Par exemple, si \vec{V} est hermitique ($V_x = V_x^\dagger, \dots$), on a :

$$\begin{cases} [V_{+1}]^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{2}} (V_x - iV_y) = -V_{-1} \\ [V_0]^\dagger = V_0 \\ [V_{-1}]^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x + iV_y) = -V_{+1} \end{cases} \quad (\text{VII-95})$$

et on vérifie bien (VII-94) [voir également la remarque (ii) à la fin du § B-3.a.β précédent] . Ce résultat se généralise grâce à la formule (VII-52.a) et aux propriétés de la matrice (S) donnée en (VII-27.b) : si l'on prend le complexe conjugué d'un élément $(S)_{i,i}$, on obtient l'élément de la même ligne, symétrique par rapport à la deuxième colonne [c'est-à-dire $S_{i,4-i}$] multiplié par -1 si $i = 1$ ou 3, sans changement si $i = 2$. Comme $i = 1, 2$ et 3 correspondent respectivement à $m = +1, 0$ et -1, on obtient, si $\overline{T}^{(n)}$ est hermitique :

$$[T_{m_i m_j \dots m_\ell}^{(n)}]^\dagger = (-1)^{m_i + m_j + \dots + m_\ell} T_{-m_i -m_j \dots -m_\ell} \quad (\text{VII-96})$$

Pour finir, la formule (VII-82), où la somme des coefficients m vaut Q , donne :

$$[T_Q^{(K)}]^\dagger = (-1)^Q \sum_{m_i + m_j + \dots + m_\ell} C_{m_i m_j \dots m_\ell} T_{-m_i -m_j \dots -m_\ell}^{(n)}$$

(nous ignorons les indices J_{12}, J_{123}, \dots qui valent automatiquement 2, 3, etc... puisque $K = n$). En utilisant la dernière des formules (VI-97) où l'on porte $J = j_1 + j_2$ (valeur maximale du moment cinétique), on montre facilement par récurrence que :

$$C_{m_i m_j \dots m_\ell} = C_{-m_i -m_j \dots -m_\ell}$$

et l'on obtient le résultat (VII-94).

c. Produit de deux opérateurs tensoriels

Considérons deux opérateurs tensoriels irréductibles, l'opérateur $T^{(K_1)}$ d'ordre K_1 et l'opérateur $W^{(K_2)}$ d'ordre K_2 . Nous allons nous intéresser aux produits de leurs composantes (\star) :

$$\begin{matrix} T_{Q_1}^{(K_1)} & W_{Q_2}^{(K_2)} & & \\ & & -K_1 \leq Q_1 \leq K_1 & \\ & & -K_2 \leq Q_2 \leq K_2 & \end{matrix} \quad (\text{VII-97})$$

On obtient ainsi un ensemble de $(2K_1+1)(2K_2+1)$ opérateurs se transformant linéairement les uns dans les autres par rotation. En d'autres termes, on a un espace vectoriel d'opérateurs, de dimension $(2K_1+1)(2K_2+1)$, invariant par rotation. Nous allons voir que cet espace n'est en général pas irréductible et peut être décomposé en sous-espaces invariants de dimension inférieure. En effet :

(\star) On peut par exemple considérer le tenseur $T^{(K_1)} \otimes W^{(K_2)}$, obtenu par produit tensoriel de $T^{(K_1)}$ et $W^{(K_2)}$. Si n_1 et n_2 sont les ordres de T et W ($n_1 \geq K_1, n_2 \geq K_2$), c'est un tenseur d'ordre n_1+n_2 dont les composantes cartésiennes sont simplement les produits de celles de T par celles de W ; les n_1 premiers indices cartésiens sont ceux qui proviennent de $T^{(n_1)}$, les n_2 suivants ceux qui proviennent de $W^{(n_2)}$.

$$\begin{aligned}
 R T_{Q_1}^{(K_1)} W_{Q_2}^{(K_2)} R^\dagger &= R T_{Q_1}^{(K_1)} R^\dagger R W_{Q_2}^{(K_2)} R^\dagger \\
 &= \sum_{Q'_1 Q'_2} (R^{[K_1]})_{Q'_1 Q_1} (R^{[K_2]})_{Q'_2 Q_2} T_{Q'_1}^{(K_1)} W_{Q'_2}^{(K_2)} \quad (\text{VII-98})
 \end{aligned}$$

Les opérateurs écrits en (VII-97) se transforment donc par rotation comme des produits tensoriels de kets $|J=K_1, M=Q_1\rangle$ et $|J=K_2, M=Q_2\rangle$. Nous sommes donc ramenés une fois de plus au problème de la composition des moments cinétiques. En conséquence, nous pouvons affirmer que les opérateurs $Z_Q^{(K)}$ définis par (*) :

$$\begin{aligned}
 Z_Q^{(K)} &= \sum_{Q_1+Q_2=Q} \langle K_1 K_2 Q_1 Q_2 | K Q \rangle T_{Q_1}^{(K_1)} W_{Q_2}^{(K_2)} \\
 &\quad K = K_1 + K_2, K_1 + K_2 - 1, \dots, |K_1 - K_2| \\
 &\quad Q = K_1 - K_2, \dots, \dots, -Q \quad (\text{VII-99})
 \end{aligned}$$

se transforment par rotation de façon plus simple, comme les kets de la base couplée $|J=K, M=Q\rangle$. On a donc :

$$R Z_Q^{(K)} R^\dagger = \sum_{Q'} (R^{[K]})_{Q'Q} Z_{Q'}^{(K)} \quad (\text{VII-100})$$

et les $2K+1$ opérateurs $Z_Q^{(K)}$ associés à une même valeur de K donnent un opérateur tensoriel irréductible.

Inversement, les produits (VII-97) s'expriment en fonction des nouveaux opérateurs sous la forme :

$$T_{Q_1}^{(K_1)} W_{Q_2}^{(K_2)} = \sum_{K, Q} \langle K_1 K_2 Q_1 Q_2 | K Q \rangle Z_Q^{(K)} \quad (\text{VII-101})$$

On voit donc apparaître une somme d'opérateurs tensoriels irréductibles dont l'ordre va de $|K_1 - K_2|$ à $K_1 + K_2$.

Nous avons déjà vu plus haut (§ B-3.a) comment, en composant des opérateurs vectoriels ($K_1 = K_2 = 1$), on obtient des opérateurs $K = 0, 1, 2$. Les égalités (VII-99) et (VII-101) permettent de généraliser ces calculs au cas où K_1 et K_2 sont quelconques. En particulier, on voit que, pour obtenir par produit un opérateur scalaire, il faut toujours partir de deux opérateurs ten-

(*) Le tenseur $Z_Q^{(K)}$ est la partie tensorielle irréductible extraite du produit tensoriel $T^{(K_1)} \otimes W^{(K_2)}$ [cf. note précédente]. On pourra noter :

$$Z_Q^{(K)} = [T^{(K_1)} \otimes W^{(K_2)}]_Q^{(K)}$$

soriels irréductibles du même ordre. On utilise alors (VI -99) pour écrire le produit scalaire de deux opérateurs $T^{(K)}$ et $Z^{(K)}$:

$$T^{(K)} \cdot W^{(K)} = \sum_Q (-1)^Q T_Q^{(K)} W_{(-Q)}^{(K)} \quad (\text{VII-102})$$

[La suppression du $(-1)^K (2K+1)^{-1/2}$ de (VI-99) assure que, si $K = 1$, on retrouve le produit scalaire ordinaire de deux vecteurs; cf. (VII-69)] .

Exercice : On considère deux tenseurs $T^{(K=2)}$ et $Z^{(K=2)}$. Ecrire leurs composantes cartésiennes $\bar{T}_{x_i x_j}$ et $\bar{Z}_{x_i x_j}$. Calculer le "produit contracté" $\sum_{ij} \bar{T}_{x_i x_j} \bar{Z}_{x_i x_j}$ et vérifier que l'on retrouve le produit scalaire $T^{(K=2)} \cdot Z^{(K=2)}$.

La règle $K_1 = K_2$ est utile chaque fois que l'on a à construire des opérateurs scalaires à partir d'opérateurs tensoriels. C'est le cas par exemple si l'on construit l'hamiltonien d'un système isolé (invariant par rotation) à partir de produits d'opérateurs agissant dans l'espace des états du système.

Exemples

(i.) Pour une particule libre, des opérateurs comme $\vec{P}^2, \vec{R} \cdot \vec{L}, \vec{P} \cdot \vec{S}$ sont, a priori ^(*) de bons candidats pour l'hamiltonien H [qui doit commuter avec $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$]. Pour une particule dans un potentiel central, on peut prendre $\xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S}$.

(ii.) On considère un ensemble de deux systèmes \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 en interaction, mais isolés dans leur ensemble (pas de potentiel extérieur). L'hamiltonien d'interaction W est donc invariant par rotation simultanée de \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 , mais pas nécessairement de \mathcal{S}_1 ou \mathcal{S}_2 séparément [alors que les hamiltoniens H_1 et H_2 associés à \mathcal{S}_1 et \mathcal{S}_2 lorsqu'ils sont isolés sont toujours invariants]. Par suite, dans W peuvent apparaître des termes qui seraient impossibles dans H_1 et H_2 ^{séparément}: termes en $\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2$ par exemple, en $\vec{J}_1 \cdot \vec{S}_2$ (couplage spin-autre orbite entre les deux électrons de l'atome d'Hélium), en $\delta(r) \vec{J}_1 \cdot \vec{S}_2$ [si $\vec{J}_1 = \vec{I}$, spin nucléaire, et si \vec{S}_2 est le spin d'un électron, on a ainsi le terme de contact $\delta(r) \vec{I} \cdot \vec{S}$ de l'hamiltonien de structure hyperfine]. Un autre ^{terme de ce type} est l'hamiltonien W_{dd} de couplage magnétique dipôle-dipôle entre deux systèmes (électrons par exemple) de positions \vec{R}_1 et \vec{R}_2 , et de spins \vec{S}_1 et \vec{S}_2 ; cet hamiltonien s'écrit :

$$W_{dd} = \frac{\lambda}{R^3} \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - 3 \frac{(\vec{S}_1 \cdot \vec{R})(\vec{S}_2 \cdot \vec{R})}{R^2} \right]$$

où λ est une constante et $\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$.

Exercice

Vérifier que W_{dd} est invariant par rotation. Introduire, dans l'espace des états $S_{\mathbb{E}}(1) \otimes S_{\mathbb{E}}(2)$, associé aux spins des deux particules, un opérateur de spin $S_T(K=2)$ tensoriel irréductible et donner ses composantes. De même, dans l'espace orbital $O_{\mathbb{E}}(1) \otimes O_{\mathbb{E}}(2)$, construire, à partir de l'opérateur position angulaire relative \vec{R}/R (qui est vectoriel), un opérateur tensoriel irréductible $O_T(K=2)$; montrer que $O_T(K=2)_0^{(0)}$ est proportionnel à $3 \cos^2\theta - 1$ (où θ est l'angle de $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ avec un axe Oz fixe). Par produit de $S_T(K=2)$ et de $O_T(K=2)$, construire un opérateur scalaire et vérifier qu'on retrouve ainsi W_{dd} (à un coefficient près).

(*) On notera cependant que $\vec{P} \cdot \vec{S}$ n'est pas invariant par parité (il se change en son opposé par symétrie par rapport à un point) et que $\vec{R} \cdot \vec{L}$ n'est pas invariant par renversement du temps (cf. chapitre VIII).

C. THÉORÈME DE WIGNER-ECKART

Le théorème de Wigner-Eckart donne une relation très utile concernant l'élément de matrice :

$$\langle \tau, J, M | T_Q^{(K)} | \tau', J', M' \rangle$$

d'un opérateur tensoriel irréductible $T_Q^{(K)}$ dans une base standard. Nous allons voir que cet élément de matrice est proportionnel au coefficient de Clebsch-Gordan

$$\langle J M | J' K M' Q \rangle$$

avec un coefficient de proportionnalité indépendant de M, M' et Q . Dans les calculs de mécanique quantique où l'on utilise une base standard (ce qui est fréquemment le cas), ceci entraîne une notable simplification : on peut dire de façon résumée que, quand on connaît un élément de matrice, on en connaît, grâce au théorème de Wigner-Eckart, un grand nombre d'autres. La présence du coefficient de Clebsch-Gordan donné plus haut entraîne l'existence de règles de sélection : par exemple, on doit avoir $M = Q + M'$ pour que ce coefficient soit non nul; la nullité de tous les éléments de matrice ne satisfaisant pas cette égalité en découle immédiatement, sans aucun calcul.

Avant de donner une démonstration précise du théorème, donnons-en la ligne générale. Nous commencerons par remarquer que, lors d'une rotation, le ket :

$$T_Q^{(K)} | \tau', J', M' \rangle$$

devient :

$$R T_Q^{(K)} R^\dagger R | \tau', J', M' \rangle$$

Dans cette expression, $R T_Q^{(K)} R^\dagger$ est connu (transformation d'un opérateur tensoriel irréductible), ainsi que $R | \tau', J', M' \rangle$ (transformation des kets d'une base standard). Par suite, par un raisonnement analogue à celui que nous avons déjà effectué à plusieurs reprises, on voit que la transformation des kets $T_Q^{(K)} | \tau', J', M' \rangle$ se fait comme celle de produits tensoriels

$|J = K, M = Q \rangle \otimes |J', M' \rangle$. Ceci nous conduira à coupler \vec{J}' et \vec{K} pour former $\vec{J}'' = \vec{J}' + \vec{K}$, et faire apparaître des états $|k, J = J'', M'' \rangle$ grâce aux coefficients de Clebsch-Gordan $\langle J' K M' Q | J'' M'' \rangle$. Il ne nous restera alors plus qu'à effectuer un produit scalaire par $\langle \tau, J, M |$. On s'attend à ce qu'il soit nul (comme pour une base standard) sauf si $J = J'', M = M''$; ces égalités, reportées dans le coefficient $\langle J' K M' Q | J'' M'' \rangle$, donnent bien le coefficient annoncé.

1. Démonstration

Précisons maintenant le raisonnement qui vient d'être ébauché. Nous allons procéder en deux étapes. En premier lieu, nous établirons un lemme concernant le produit scalaire $\langle \tau, J, M | k, J'', M'' \rangle$; puis nous démontrerons le théorème lui-même.

a) Lemme

Considérons deux ensembles, de $2J+1$ et $2J''+1$ vecteurs :

$$\begin{array}{ll} |\tau, J, M \rangle & M = J, J-1, \dots, -J \\ |k, J'', M'' \rangle & M'' = J'', J''-1, \dots, -J'' \end{array}$$

Par hypothèse, ces kets satisfont aux propriétés d'une base standard ^(☆) : l'action de J_+, J_-, J_z , et donc de toute composante J_u de \vec{J} , est donnée par les relations (VI-16). Dans ces conditions, nous allons montrer que le produit scalaire $\langle \tau, J, M | k, J'', M'' \rangle$

- est nul sauf si $J = J''$ et $M = M''$
- est indépendant de M (et M'')

La démonstration de ce lemme est très simple :

. deux kets propres de \vec{J}^2 , ou de J_z (qui sont des opérateurs hermitiques) sont orthogonaux s'ils sont associés à des valeurs propres différentes.

. Insérons l'opérateur

$$J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \tag{VII-103}$$

[déjà donnée en (VI-5.b)] entre $\langle \tau, J, M |$ et $|k, J'', M'' \rangle$. Il vient :

(☆) Les notations différentes $|\tau, J, M \rangle$ et $|k, J'', M'' \rangle$ sont utilisées pour insister sur le fait que ces kets n'appartiennent pas nécessairement à une même base standard (la décomposition de $|k, J'', M'' \rangle$ sur les $|\tau, J, M \rangle$ peut faire intervenir plusieurs valeurs de τ).

$$\begin{aligned}
 \langle \tau, J, M | J_+ J_- | k, J, M \rangle & \\
 &= (\langle \tau, J, M | J_+) (J_- | k, J, M \rangle) \\
 &= \hbar^2 [J(J+1) - M(M-1)] \langle \tau, J, M-1 | k, J, M-1 \rangle \quad (\text{VII-104})
 \end{aligned}$$

puisque les $|\tau, J, M\rangle$ et les $|k, J, M\rangle$ satisfont aux relations d'une base standard. D'autre part, l'égalité (VII-103) donne, puisque $|k, J, M\rangle$ est vecteur propre de \vec{J}^2 et J_z :

$$\begin{aligned}
 \langle \tau, J, M | J_+ J_- | k, J, M \rangle & \\
 &= \langle \tau, J, M | k, J, M \rangle \hbar^2 [J(J+1) - M^2 \pm M] \quad (\text{VII-105})
 \end{aligned}$$

La comparaison de (VII-104) et (VII-105) montre que

$$\langle \tau, J, M | k, J, M \rangle = \langle \tau, J, M-1 | k, J, M-1 \rangle \quad (\text{VII-106})$$

et le lemme est démontré.

Remarque : Une autre façon d'établir cette propriété est d'utiliser le "lemme de Schur" [que nous énonçons ici sans démonstration; voir réf. (5) chap. 9, théorèmes 2 et 3; ou réf. (14), chap. 2, § 2-2; ou encore réf. (6), chap. 3, § 3-14] :

Soient $M_1(g)$ et $M_2(g)$ deux ensembles de matrices qui donnent deux représentations irréductibles, de dimensions respectives p_1 et p_2 , d'un même groupe G (d'éléments notés g). S'il existe une matrice F à p_1 colonnes et p_2 lignes telle que (*) :

$$F M_1(g) = M_2(g) F \quad (\text{VII-107})$$

on peut affirmer que :

(*) Soit \mathcal{E}_1 un espace vectoriel, de dimension p_1 , où agissent des opérateurs $M_1(g)$ dont l'action est donnée par les matrices $M_1(g)$ [dans une certaine base de \mathcal{E}_1] ; \mathcal{E}_1 est l'espace de représentation associé à la représentation M_1 . On introduit de même des opérateurs $M_2(g)$ agissant dans un espace de représentation \mathcal{E}_2 de dimension p_2 .

La matrice F définit une application linéaire \mathcal{F} de \mathcal{E}_1 dans \mathcal{E}_2 et la relation (VII-107) s'écrit alors sous forme d'une égalité entre deux autres applications linéaires de \mathcal{E}_1 dans \mathcal{E}_2 :

$$\mathcal{F} M_1(g) = M_2(g) \mathcal{F}$$

Le lemme de Schur indique que l'application \mathcal{F} est identiquement nulle si les deux représentations ne sont pas équivalentes.

. ou bien les représentations $M_1(g)$ et $M_2(g)$ sont équivalentes (ce qui n'est évidemment possible que si $p_1 = p_2$), ou bien F est nulle.

. si les représentations sont, non seulement équivalentes, mais identiques [$M_1(g) \equiv M_2(g)$ pour tout $g \in G$], F est nécessairement une matrice scalaire (c'est-à-dire multiple de la matrice unité).

Pour appliquer ce lemme, considérons les deux espaces \mathcal{E}_J (de dimension $2J+1$) engendré par les $|\tau, J, M\rangle$, et $\mathcal{E}_{J''}$ (de dimension $2J''+1$) engendré par les $|k, J'', M''\rangle$ [ce sont les espaces \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 de la note précédente]. Tous deux sont globalement invariants sous l'action de l'ensemble des opérateurs de rotation et on peut écrire :

$$\begin{aligned}
 & \langle \tau, J, M | R | k, J'', M'' \rangle \\
 &= \sum_{M'} \langle \tau, J, M | R | \tau, J, M' \rangle \langle \tau, J, M' | k, J'', M'' \rangle \\
 &= \sum_{M'} (R^{[J]})_{MM'} (F)_{M'M''} \\
 &= \sum_{M'''} \langle \tau, J, M | k, J'', M''' \rangle \langle k, J'', M''' | R | k, J'', M'' \rangle \\
 &= \sum_{M'''} (F)_{MM'''} (R^{[J'']})_{M'''M''} \tag{VII-108}
 \end{aligned}$$

où $(F)_{MM''}$ est défini par :

$$(F)_{MM''} = \langle \tau, J, M | k, J'', M'' \rangle \tag{VII-109}$$

La matrice (F) est associée à une application linéaire de $\mathcal{E}_{J''}$ dans \mathcal{E}_J , telle que :

$$F | k, J'', M'' \rangle = \sum_M (F)_{MM''} |\tau, J, M\rangle \tag{VII-110}$$

D'autre part, les égalités (VII-108) donnent

$$(R^{[J]}) (F) = (F) (R^{[J'']}) \tag{VII-111}$$

et, si (F) n'est pas identiquement nul, le lemme de Schur impose que (F) est proportionnel à la matrice unité.

Démontrons maintenant le théorème de Wigner-Eckart lui-même. Pour cela, écrivons les lois de transformation des kets $T_Q^{(K)} |\tau', J', M' \rangle$; on obtient [cf. (VII-83)] :

$$\begin{aligned} R T_Q^{(K)} |\tau', J', M' \rangle &= \\ R T_Q^{(K)} R^\dagger R |\tau', J', M' \rangle &= \\ &= \sum_{Q'} \sum_{M''} (R^{[K]})_{Q'Q} (R^{[J']})_{M''M'} T_{Q'}^{(K)} |\tau', J', M'' \rangle \end{aligned} \quad (\text{VII-112})$$

ce qui montre que les kets considérés se transforment de la même façon que des produits tensoriels

$$|J = K, M = Q \rangle \otimes |J', M' \rangle \quad (\text{VII-113})$$

Par suite, on peut utiliser la théorie générale de la composition des moments cinétiques et introduire les kets $|k, J'', M'' \rangle$ donnés par :

$$|k, J'', M'' \rangle = \sum_{Q M'''} \langle J' K M''' Q | J'' M'' \rangle T_Q^{(K)} |\tau', J', M''' \rangle \quad (\text{VII-114})$$

où $\langle J' K M''' Q | J'' M'' \rangle$ est un coefficient de Clebsch-Gordan. Ces kets se transforment simplement comme ceux d'une base standard, c'est-à-dire suivant la relation :

$$R |k, J'', M'' \rangle = \sum_{M'''} (R^{[J'']})_{M'' M'''} |k, J'', M''' \rangle \quad (\text{VII-115})$$

La démonstration est la même que celle de la formule (VII-58.b) à partir de la définition (VII-57.a).

Explicitons cette démonstration à titre d'exercice. On peut écrire, d'après la définition (VII-114) de $|k, J'', M'' \rangle$:

$$R |k, J'', M'' \rangle = \sum_{Q M'''} \langle J' K M''' Q | J'' M'' \rangle R T_Q^{(K)} |\tau', J', M''' \rangle \quad (\text{VII-116})$$

c'est-à-dire, compte tenu de (VII-112), et de la relation inverse de (VII-114) [voir relation (VII-118) ci-dessous] :

$$\begin{aligned} R |k, J'', M'' \rangle &= \sum_{Q Q'} \sum_{M' M'''} \langle J' K M' Q' | J'' M'' \rangle \\ &\quad (R^{[K]})_{Q'Q} (R^{[J']})_{M' M'''} \sum_M \\ &\quad \langle J' K M' Q' | J'' M \rangle |k, J'', M \rangle \end{aligned} \quad (\text{VII-117})$$

La formule (VII-62) [où l'on effectue la substitution $j_1 \Rightarrow J'$, $j_2 \Rightarrow K$; $J, J' \Rightarrow J''$; $M \Rightarrow M''$, $M' \Rightarrow M$; $m_i \Rightarrow M'''$, $m'_i \Rightarrow M'$, $m_j \Rightarrow Q$, $m'_j \Rightarrow Q'$] permet alors d'effectuer la sommation sur Q, Q', M', M'' , et il vient :

$$R|k, J'', M'' \rangle = \sum_M (R^{[J'']})_{MM''} |k, J'', M \rangle$$

qui est bien équivalent à (VII-115).

Si l'on inverse l'égalité (VII-114), on obtient (en tirant parti du fait que les coefficients $\langle J' K M' Q | J'' M'' \rangle$ définissent un changement de base orthogonal)

$$T_Q^{(K)} |\tau', J', M' \rangle = \sum_{J'' M''} \langle J' K M' Q | J'' M'' \rangle |k, J'', M'' \rangle \quad (VII-118)$$

Le fait que les $|k, J'', M'' \rangle$ se transforment comme les kets d'une base standard permet d'appliquer le lemme établi plus haut :

$$\langle \tau, J, M | k, J'', M'' \rangle = \delta_{JJ''} \delta_{MM''} \times [\text{facteur indépendant de } M]$$

On pose :

$$\langle \tau, J, M | k, J'', M'' \rangle = \delta_{JJ''} \delta_{MM''} \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \langle \tau, J || T^{(K)} || \tau', J' \rangle \quad (VII-119)$$

où le $(2J+1)^{-1/2}$ est introduit par pure convention et la quantité $\langle \tau, J || T^{(K)} || \tau', J' \rangle$ ne dépend que des nombres quantiques qui y apparaissent (elle ne dépend ni de M , ni de M' , ni de Q). Alors, en multipliant l'expression (VII-118) par le bra $\langle \tau, J, M |$, il vient :

$$\begin{aligned} \langle \tau, J, M | T_Q^{(K)} | \tau', J', M' \rangle &= \langle J, M | J' K M' Q \rangle \frac{\langle \tau, J || T^{(K)} || \tau', J' \rangle}{\sqrt{2J+1}} \\ &= (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & K & J' \\ -M & Q & M' \end{pmatrix} \langle \tau, J || T^{(K)} || \tau', J' \rangle \end{aligned} \quad (VII-120)$$

Cette égalité constitue le théorème de Wigner-Eckart. Le nombre $\langle \tau J || T^{(K)} || \tau' J' \rangle$ s'appelle "élément de matrice réduit" de $T^{(K)}$ entre les sous-espaces $\mathcal{E}(\tau, J)$ et $\mathcal{E}(\tau', J')$; il ne dépend que de ces sous-espaces et de l'opérateur $T^{(K)}$ envisagé. La donnée de cet élément de matrice réduit détermine,

grâce à l'égalité (VII-120), celle des $(2J+1)(2J'+1)(2K+1)$ valeurs des éléments de matrices des opérateurs $T_Q^{(K)}$, associés aux valeurs possibles pour J, M' et Q .

Remarques :

(i.) La relation $T^{(K)} = [T^{(K)}]^\dagger$, qui assure l'hermiticité de $T^{(K)}$, est équivalente à (\star) :

$$\langle \tau, J || T^{(K)} || \tau', J' \rangle = (-1)^{J-J'} \langle \tau', J' || T^{(K)} || \tau, J \rangle^* \quad (\text{VII-121})$$

En effet, si $T_Q^{(K)\dagger} = (-1)^Q T_{-Q}^{(K)}$ [cf (VII-94)], alors :

$$\begin{aligned} \langle \tau, J, M | T_Q^{(K)\dagger} | \tau', J', M' \rangle \\ = (-1)^Q \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \langle J, M | J' K M' -Q \rangle \langle \tau J || T^{(K)} || \tau' J' \rangle \end{aligned} \quad (\text{VII-122})$$

Par ailleurs, cet élément de matrice vaut (définition d'un opérateur adjoint) :

$$\begin{aligned} \langle \tau', J', M' | T_Q^{(K)} | \tau, J, M \rangle^* \\ = \frac{1}{\sqrt{2J'+1}} \langle J', M' | J K M Q \rangle \langle \tau' J' || T^{(K)} || \tau J \rangle^* \end{aligned} \quad (\text{VII-123})$$

et, comme [cf. chap. VI, relations (VI-116)] :

$$\langle J' M' | J K M Q \rangle = (-1)^{J-J'+Q} \sqrt{\frac{2J'+1}{2J+1}} \langle J M | J' K M' -Q \rangle \quad (\text{VII-124})$$

on obtient bien (VII-121).

(ii.) Le théorème de Wigner-Eckart n'est pas limité au groupe des rotations $R_{(3)}$. Ce dernier cependant possède une propriété qui n'est pas générale : dans la décomposition d'un produit tensoriel de représentations $(R^{[J_1]}) \otimes (R^{[J_2]})$ en représentations irréductibles, chaque représentation $(R^{[J]})$ n'apparaît qu'une seule fois (au plus). Ceci entraîne l'existence d'un seul élément de matrice réduit. Si l'on écrit le théorème de Wigner-Eckart pour d'autres groupes que $R_{(3)}$ [groupes de symétrie dans les cristaux par exemple], il faut introduire dans le second membre de l'égalité correspondant à (VII-20) une somme incluant plusieurs éléments de matrice réduits.

(\star) La simplicité de la relation (VII-121) justifie l'introduction arbitraire du coefficient $\sqrt{2J+1}$ dans (VII-119); on peut aussi évoquer le fait que, dans la deuxième égalité (VII-120), ce coefficient disparaît.

2. Applications et exemples

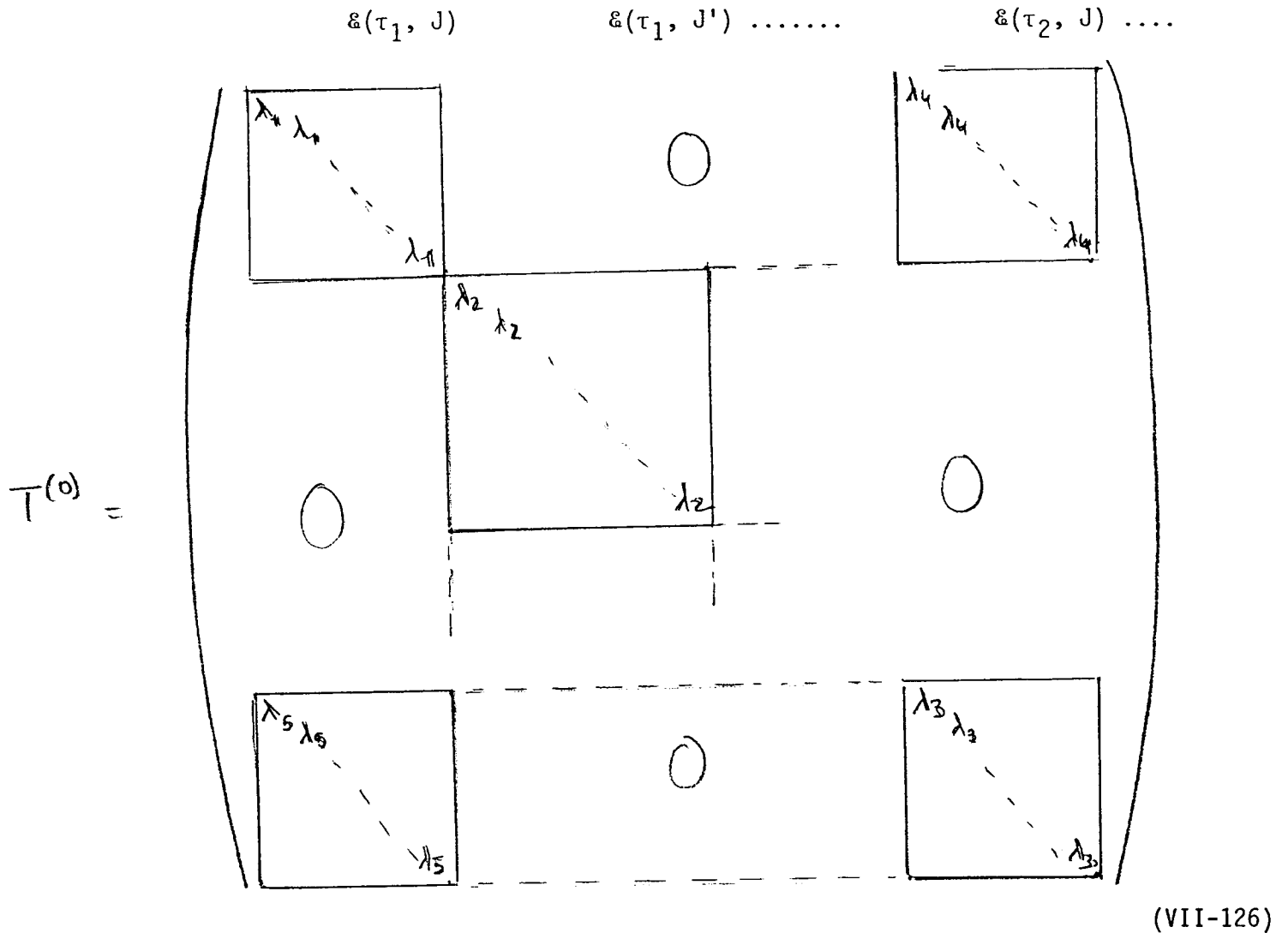
a) Opérateurs scalaires

Lorsque $K = 0$, on dit que l'opérateur $T^{(K)}$ est scalaire. Les formules (VII-83) ou (VII-84) indiquent que c'est un opérateur invariant par rotation qui commute avec toutes les composantes du moment cinétique total J . Le coefficient de Clebsch-Gordan qui apparaît dans l'expression (VII-120) du théorème de Wigner-Eckart s'écrit ici :

$$\langle J M | J' 0 M' 0 \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (\text{VII-125})$$

Donc, les seuls éléments de matrice non-nuls d'un opérateur scalaire sont ceux associés à des mêmes valeurs des nombres J , et des mêmes valeurs de M pour le bra et le ket. En particulier, à l'intérieur d'un sous-espace $\&(\tau, J)$, ce sont les éléments diagonaux. Cette propriété peut d'ailleurs être démontrée directement et de façon élémentaire en utilisant la commutation de $T^{(K=0)}$ avec J_z et J_{\pm} , sans faire intervenir le théorème de Wigner-Eckart.

Comment écrire la matrice qui représente un opérateur $T^{(K=0)}$ dans une base standard ? Nous avons déjà remarqué que, dans chaque $\&(\tau, J)$, $T^{(0)}$ donne une matrice diagonale dont tous les éléments sont égaux (matrice scalaire) : ce résultat découle du fait que toute la dépendance en M (et M') d'un élément de matrice d'un opérateur $T^{(0)}$ est contenue dans le coefficient (VII-125). Il n'est pas impossible que $T^{(0)}$ ait également des éléments non-diagonaux différents de zéro, mais toujours entre bras et kets associés à la même valeur de J et de M (seule la valeur de τ est différente). En d'autres termes, entre deux espaces $\&(\tau, J)$ et $\&(\tau', J)$ différents on a, comme à l'intérieur de ces sous-espaces, des matrices carrées scalaires :



Considérons maintenant deux opérateurs scalaires $T_a^{(0)}$ et $T_b^{(0)}$.
 A l'intérieur de chaque (τ, J) , ils sont représentés par des matrices
 scalaires $\lambda_a(\tau) \times (\mathbb{1})$ et $\lambda_b(\tau) \times (\mathbb{1})$, de sorte que, si l'on pose :

$$c_{ab}(\tau) = \lambda_a(\tau) / \lambda_b(\tau) \tag{VII-127}$$

il vient :

$$T_a^{(0)} = c_{ab}(\tau) T_b^{(0)} \tag{VII-128.a}$$

Donc, $T_a^{(0)}$ et $T_b^{(0)}$ sont proportionnels [tous leurs éléments de matrice
 dans $\mathfrak{E}(\tau, J)$ sont dans un même rapport $c_{ab}(\tau)$] ; quel que soit l'état $|\psi_\tau\rangle$
 du système physique appartenant à $\mathfrak{E}(\tau, J)$, on a :

$$\begin{aligned} \langle T_a^{(0)} \rangle &= \langle \psi_\tau | T_a^{(0)} | \psi_\tau \rangle \\ &= c_{ab}(\tau) \langle T_b^{(0)} \rangle \end{aligned} \tag{VII-128.b}$$

Il faut cependant prendre garde à ne pas mal utiliser les égalités qui viennent d'être écrites : si l'on oublie qu'elles sont uniquement valides à l'intérieur d'un sous-espace $\mathfrak{E}(\tau, J)$ donné, on s'expose à des erreurs [cf. remarque (i) ci-dessous] . Il est en général inexact de dire que $T_a^{(0)}$ et $T_b^{(0)}$ sont proportionnels dans l'espace des états \mathfrak{E} total [somme directe de tous les $\mathfrak{E}(\tau, J)$] ; d'ailleurs, le coefficient de proportionnalité $\lambda_a(\tau) / \lambda_b(\tau)$ dépend du sous-espace $\mathfrak{E}(\tau, J)$ considéré.

Remarques :

(i) Une façon d'éviter tout risque d'erreur est de ne jamais écrire de relation du type (VII-128.a) et de la remplacer par :

$$P(\tau, J) T_a^{(0)} P(\tau, J) = c_{ab}(\tau) P(\tau, J) T_b^{(0)} P(\tau, J) \quad (\text{VII-128.c})$$

où $P(\tau, J)$ est le projecteur orthogonal sur le sous-espace $\mathfrak{E}(\tau, J)$. Cette façon d'écrire a l'avantage d'être plus correcte; elle est cependant plus lourde.

(ii) Donnons un exemple d'une erreur possible si l'on oublie que, dans l'espace total, deux opérateurs scalaires ne sont pas nécessairement proportionnels. Supposons que l'on connaisse le coefficient de proportionnalité $c_{ab}(\tau)$ et que l'on s'intéresse à l'opérateur produit :

$$T_a^{(0)} T_b^{(0)}$$

Il est facile de vérifier que cet opérateur est aussi scalaire. On peut être tenté d'écrire que, dans $\mathfrak{E}(\tau, J)$, cet opérateur est proportionnel à :

$$c_{ab}(\tau) [T_b^{(0)}]^2$$

Cette égalité semblerait découler directement de (VII-128.a); elle est cependant fausse. En réalité, il faut écrire :

$$\begin{aligned} < \tau, J, M | T_a^{(0)} T_b^{(0)} | \tau, J, M > \\ &= \sum_{\tau'} < \tau, J, M | T_a^{(0)} | \tau', J, M > < \tau', J, M | T_b^{(0)} | \tau, J, M > \quad (\text{VII-129}) \end{aligned}$$

[dans la relation de fermeture que l'on a insérée, le caractère scalaire des opérateurs permet d'éliminer les sommations sur J et M]. On voit alors clairement que les éléments de matrice de $T_a^{(0)}$ et $T_b^{(0)}$ entre espaces $\mathfrak{E}(\tau, J)$ différents interviennent explicitement [sauf s'il se trouve que la somme sur τ'

se réduit à $\tau' = \tau$; c'est le cas par exemple si l'on a choisi $T_a^{(0)} = \vec{J}^2$.

(iii) Les éléments de matrice de deux opérateurs scalaires $T_a^{(0)}$ et $T_b^{(0)}$ entre deux sous-espaces $\mathcal{E}(\tau, J)$ et $\mathcal{E}(\tau', J)$ différents sont également proportionnels. Ces coefficients de proportionnalité dépendent alors de τ , τ' et J .

Même si l'on reporte ces coefficients de proportionnalité dans le second membre de (VII-129), leur dépendance en τ' empêche en général de faire apparaître une relation de fermeture sur la base $\{ |\tau', J, M\rangle \}$ et par suite l'opérateur $T_b^{(0)}$.

b) Opérateurs vectoriels

Un opérateur vectoriel est associé à la valeur $K = 1$ et aux trois valeurs possibles de Q qui sont $+1$, 0 et -1 . On peut, grâce aux formules (VII-79.b), revenir aux composantes cartésiennes $T_x^{(K=1)}$, $T_y^{(K=1)}$ et $T_z^{(K=1)}$ de l'opérateur. Quoi qu'il en soit, les trois valeurs de Q et de l'indice cartésien x_i correspondent à trois matrices, dont les éléments obéissent aux règles de sélection du coefficient de Clebsch-Gordan :

$$\langle J' \ 1 \ M' \ Q \ | \ J \ M \rangle .$$

On a donc, pour les éléments de matrice $\langle \tau, J, M | T_Q^{(K=1)} | \tau', J', M' \rangle$, les règles de sélection suivantes :

$$M' = M + Q \quad \text{(VII-130.a)}$$

$$J' = J+1, J, J-1 \quad \text{(VII-130.b)}$$

(si ces deux égalités ne sont pas vérifiées simultanément, l'élément de matrice est nul). Pour l'élément de matrice $\langle \tau, J, M | T_{x_i}^{(K=1)} | \tau', J', M' \rangle$, il obéit encore à la règle de sélection (VII-130.b); la règle (VII-130.a) doit être remplacée par :

$$M' = M \pm 1 \quad \text{si } x_i = x \text{ ou } y \quad (i = 1, 2)$$

$$M' = M \quad \text{si } x_i = z \quad (i = 3) \quad \text{(VII-130.c)}$$

A l'intérieur d'un sous-espace $\mathcal{E}(\tau, J)$ donné, tous les éléments de matrice de l'opérateur $T^{(K=1)}$, que nous noterons plus commodément \vec{V} , dépendent d'un seul paramètre : l'élément de matrice réduit

$$\langle \tau, J | \vec{V} | \tau, J \rangle$$

C'est un nombre réel si \vec{V} est hermitique [cf. § B-4.b].

Les règles de sélection (VII-130.c) montrent que la matrice représentant V_z dans $\mathfrak{E}(\tau, J)$ est toujours diagonale; ses éléments sont proportionnels à la valeur de M (valeur propre de J_z) apparaissant dans le bra et le ket (on peut vérifier cette propriété, soit directement sur le coefficient $\langle J \ 1 \ M \ 0 \ | \ J \ M \rangle$, soit en utilisant le théorème de projection démontré ci-dessous). Quant aux éléments de matrice de V_{+1} , ils seront situés directement au-dessus de la diagonale principale ^(*), ceux de V_{-1} directement au-dessous. Pour ceux de V_x et V_y , les deux types d'éléments précédents sont possibles; si V est hermitique, les éléments de V_x sont réels, ceux de V_y imaginaires purs.

Considérons maintenant deux opérateurs vectoriels V_a et V_b ; le rapport entre les divers éléments de matrice à l'intérieur de chaque $\mathfrak{E}(\tau, J)$ est, pour chacune de leurs composantes (cartésiennes ou standard), toujours égal au rapport de leurs éléments de matrices réduits. Si l'on pose :

$$\alpha_{ab}(\tau) = \frac{\langle \tau, J | | \vec{V}_a | | \tau, J \rangle}{\langle \tau, J | | \vec{V}_b | | \tau, J \rangle} \tag{VII-131}$$

on peut écrire, à l'intérieur de $\mathfrak{E}(\tau, J)$:

$$\vec{V}_a = \alpha_{ab}(\tau) \vec{V}_b \tag{VII-132.a}$$

Cette égalité est à prendre avec les mêmes précautions que (VII-128.a) : elle ne concerne que l'action de \vec{V}_a et \vec{V}_b restreinte à un sous-espace $\mathfrak{E}(\tau, J)$ et il est plus correct d'écrire :

$$P(\tau, J) \vec{V}_a P(\tau, J) = \alpha_{ab}(\tau) P(\tau, J) \vec{V}_b P(\tau, J) \tag{VII-132.b}$$

[rappelons que $P(\tau, J)$ désigne le projecteur orthogonal sur $\mathfrak{E}(\tau, J)$].

On peut choisir pour \vec{V}_b l'opérateur moment cinétique total \vec{J} lui-même, qui commute avec $P(\tau, J)$. La relation (VII-132.b) devient alors pour un opérateur vectoriel \vec{V} quelconque :

$$P(\tau, J) \vec{V} P(\tau, J) = \alpha_V(\tau) P(\tau, J) \vec{J} \tag{VII-132.c}$$

(*) On suppose les vecteurs de la base standard rangés par valeurs décroissantes de M .

Pour calculer la constante $\alpha_V(\tau)$, on peut multiplier scalairement cette égalité en utilisant à nouveau la commutation de $P(\tau, J)$ et de \vec{J} :

$$P(\tau, J) \vec{J} \cdot \vec{V} P(\tau, J) = \alpha_V(\tau) P(\tau, J) \vec{J}^2 \tag{VII-133}$$

Dans cette équation, les deux membres sont des opérateurs scalaires (obtenus par produit de deux opérateurs vectoriels). Le second s'écrit simplement :

$$\alpha_V(\tau) J(J+1) \hbar^2 P(\tau, J)$$

puisque $\mathcal{E}(\tau, J)$ est un sous-espace propre de \vec{J} de valeur propre $J(J+1) \hbar^2$; nous noterons le premier :

$$\langle \vec{J} \cdot \vec{V} \rangle_{\tau, J} P(\tau, J)$$

où la constante $\langle \vec{J} \cdot \vec{V} \rangle_{\tau, J}$ désigne la valeur commune de tous les éléments diagonaux dans $\mathcal{E}(\tau, J)$ de l'opérateur $\vec{J} \cdot \vec{V}$ [en d'autres termes, quel que soit le ket normé $|\psi\rangle$ appartenant à $\mathcal{E}(\tau, J)$, la valeur moyenne $\langle \psi | \vec{J} \cdot \vec{V} | \psi \rangle$ est égale à la constante $\langle \vec{J} \cdot \vec{V} \rangle_{\tau, J}$]. Pour finir, l'égalité (VII-133) donne :

$$\alpha_V(\tau) = \frac{\langle \vec{J} \cdot \vec{V} \rangle_{\tau, J}}{J(J+1) \hbar^2} \tag{VII-134}$$

Le coefficient de proportionnalité entre \vec{J} et \vec{V} est donc donné par le rapport entre le produit scalaire de \vec{J} et \vec{V} et $\sqrt{\text{carré du module de } \vec{J}}$. Ce résultat est souvent désigné sous le nom de "théorème de projection". On peut l'interpréter classiquement en remarquant que, lors de la précession d'un vecteur quelconque \vec{v} autour du moment cinétique total \vec{J} (constant) d'un système physique, seule subsiste en valeur moyenne dans le temps la projection :

$$\vec{v}_{//} = \vec{J} \times \frac{\vec{v} \cdot \vec{J}}{J^2} \tag{VII-135}$$

de \vec{v} sur \vec{J} [cf. fig. VII.2] ; la projection \vec{v}_{\perp} de \vec{v} sur le plan perpendiculaire à \vec{J} est en effet moyennée à zéro au bout d'un grand nombre de précessions du système autour de \vec{J} (*).

(*) Il ne faut pas prendre trop au pied de la lettre cette analogie classique du théorème de projection en mécanique quantique. Ce théorème donne une propriété instantanée des opérateurs et le temps n'y joue aucun rôle, alors que \vec{v} ne se moyenne à $\vec{v}_{//}$ qu'au bout d'un temps suffisamment long.

Cette fois encore, il faut se garder d'utiliser le résultat obtenu hors de ses limites de validité; l'égalité (VII-134) ne permet par exemple pas d'obtenir le coefficient de proportionnalité $\alpha_{ab}(\tau)$ entre deux opérateurs vectoriels \vec{V}_a et \vec{V}_b quelconques sous la forme :

$$\frac{\langle \vec{V}_a \cdot \vec{V}_b \rangle_{\tau, J}}{\langle \vec{V}_b^2 \rangle_{\tau, J}}$$

En effet, dans la démonstration de (VII-134), nous avons commuté $P(\tau, J)$ et \vec{J} , et $\alpha_{ab}(\tau)$ n'est en général pas égal à l'expression ci-dessus [sauf bien sûr si \vec{V}_b commute avec $P(\tau, J)$] .

Entre deux sous-espaces $\mathcal{E}(\tau, J)$ différents, le théorème de Wigner-Eckart permet également, par l'intermédiaire des relations (VII-130), de réduire considérablement les éléments de matrice non nuls possibles pour un opérateur vectoriel \vec{V} . Prenons par exemple la composante V_z de cet opérateur; la matrice qui le représente a une allure rappelant celle écrite en (VII-126), mais avec en plus des éléments de matrice non-nuls entre sous-espaces $\mathcal{E}(\tau, J)$ et $\mathcal{E}(\tau, J \pm 1)$; les règles de sélection sont un peu moins strictes pour un opérateur vectoriel que scalaire.

Exemple d'application : Supposons que l'on s'intéresse au problème suivant : un atome se trouve, à l'instant initial $t = 0$, dans l'un des sous-niveaux Zeeman [états $|J_e, M_e\rangle$] d'un niveau atomique excité de moment cinétique J_e ; par émission spontanée d'un photon de polarisation \vec{e}_λ , il peut tomber dans l'un des sous-niveaux Zeeman [états $|J_f, M_f\rangle$] de son niveau fondamental. Comment évaluer la probabilité des différents processus et l'intensité des raies émises en fonction du sous-niveau M_e de départ ou M_f d'arrivée, et de la polarisation considérée \vec{e}_λ ?

Nous allons supposer que l'atome n'est soumis à l'action d'aucun champ magnétique extérieur, ou que ce champ est suffisamment faible pour être négligé ^(*). Tous les sous-niveaux $|J_e, M_e\rangle$, ainsi que tous les sous-niveaux $|J_f, M_f\rangle$, ont alors la même énergie. On les représente souvent, comme

(*) En pratique, il faut des champs magnétiques de l'ordre de 0,1 Tesla (1000 Gauss) pour modifier notablement les caractéristiques des raies Zeeman émises par les atomes d'une vapeur.

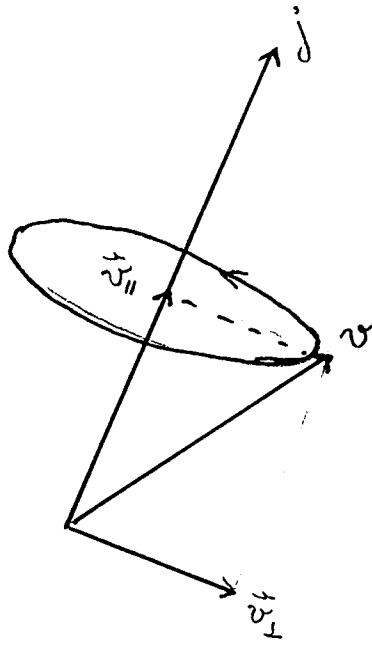


Fig VII-2

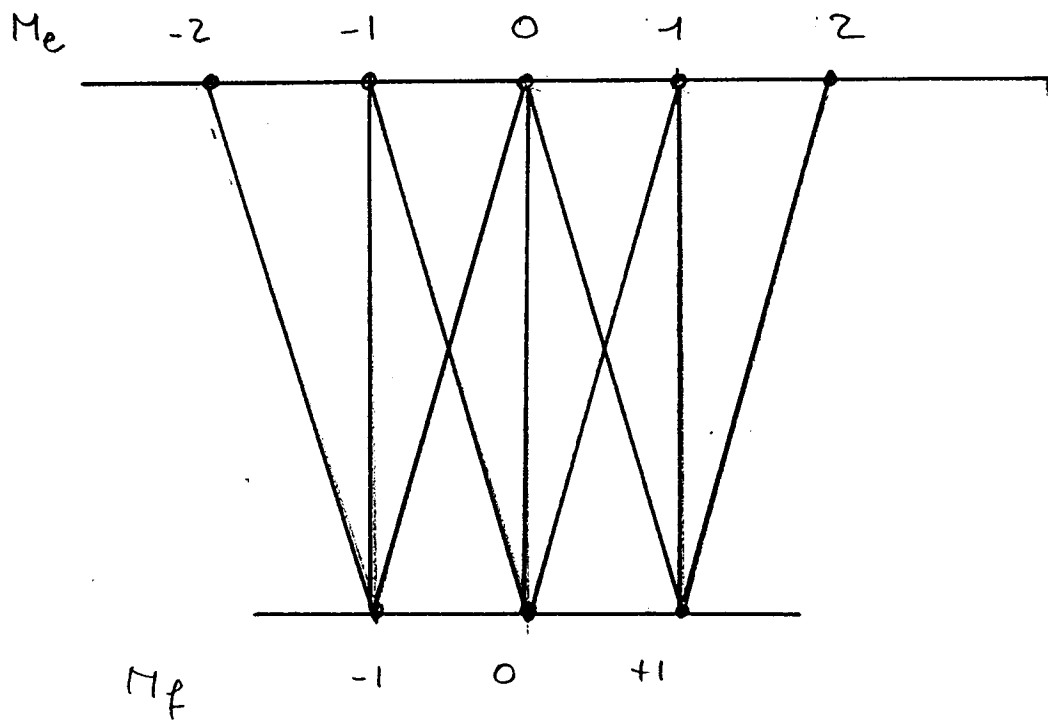


Fig VII-3

sur la figure VII-3, par un diagramme où l'on range par ordre croissant les valeurs de M , et où l'on représente par des segments de droite verticaux ou obliques les transitions atomiques entre sous-niveaux excités et fondamentaux. Le problème est alors d'évaluer les probabilités relatives des processus

associés à toutes les façons de joindre un sous-niveau M_e à un sous-niveau M_f , et de comprendre comment intervient la polarisation \vec{e}_λ .

Pour cela, on peut utiliser la règle d'or de Fermi (ou la théorie de Wigner-Weisskopf de l'émission spontanée) qui dit que la probabilité par unité de temps d'émission d'un photon d'impulsion $\hbar\vec{k}$, de polarisation \vec{e}_λ , par passage du sous-niveau M_e au sous-niveau M_f est :

$$\Gamma(\vec{k}, \vec{e}_\lambda)_{M_e \rightarrow M_f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle J_e, M_e; 0 | H_i | J_f, M_f; k, \vec{e}_\lambda \rangle|^2 \rho(E_f) \quad (\text{VII-136})$$

Dans cette expression, $|J_e, M_e; 0\rangle$ désigne l'état du système global (atome + rayonnement) où l'atome est dans l'état $|J_e, M_e\rangle$ et le rayonnement dans son état fondamental (vide de photons); $|J_f, M_f; k, \lambda\rangle$ l'état du système global où l'atome se trouve décrit par $|J_f, M_f\rangle$ tandis que, pour le rayonnement, le mode \vec{k}, \vec{e}_λ est dans l'état d'excitation $n = 1$ (un photon). La densité d'états finals est notée $\rho(E_f)$; la conservation de l'énergie impose que $\hbar ck = E_e - E_f$. Enfin, H_i désigne l'hamiltonien d'interaction :

$$H_i = c \sum_q \vec{P}_q \cdot \vec{A}(\vec{R}_q) \quad (\text{VII-137})$$

où c est une constante, \vec{p}_q et \vec{R}_q sont l'impulsion et la position du $q^{\text{ième}}$ électron de l'atome, et \vec{A} est le potentiel vecteur du champ électromagnétique. Ce dernier s'exprime en fonction des opérateurs $a_{\vec{k},\lambda}$ de destruction d'un quantum dans le mode \vec{k} , \vec{e}_λ sous la forme :

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} \vec{e}_\lambda e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \text{hermitique conjugué} \quad (\text{VII-138})$$

Nous allons faire l'approximation dipolaire électrique qui consiste à négliger les dimensions de l'atome, dont l'ordre de grandeur est le rayon de Bohr a_0 , devant la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$ des photons émis; cette approximation est bien fondée dans le domaine optique ($a_0/\lambda \lesssim 10^{-3}$). Si le noyau de l'atome est situé à l'origine des axes, on peut alors, dans (VII-138), remplacer les exponentielles $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ par un et il vient :

$$H_i = c \sum_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} \vec{e}_\lambda \cdot \vec{P} \quad (\text{VII-139})$$

où \vec{P} est l'impulsion totale :

$$\vec{P} = \sum_q \vec{p}_q \quad (\text{VII-140})$$

de tous les électrons. Dans (VII-139), on peut aussi bien remplacer \vec{P} par \vec{R} , opérateur position du centre de masse des électrons. En effet, dans l'égalité (VII-136), nous ne ferons intervenir que l'élément de matrice entre des états atomiques $|J_e, M_e\rangle$ et $|J_f, M_f\rangle$, états appartenant à une base standard; le théorème de Wigner-Eckart permet alors d'affirmer que tous les éléments de matrice de \vec{P} sont proportionnels à ceux de \vec{R} . Pour finir, compte tenu de (VII-136) et (VII-139), on est conduit à écrire :

$$\Gamma(\vec{k}, \vec{e}_\lambda)_{M_e \rightarrow M_f} = a | \langle J_e, M_e | \vec{e}_\lambda \cdot \vec{R} | J_f, M_f \rangle |^2 \quad (\text{VII-141})$$

où a est une constante indépendante de M_e , M_f et \vec{e}_λ .

Si l'on choisit $\vec{e}_\lambda = \vec{e}_z$, on obtient le calcul de la probabilité d'émission d'un photon polarisé linéairement le long de Oz (ce cas correspond à ce que l'on appelle "polarisation π "); c'est l'élément de matrice de la composante $Q = 0$ de l'opérateur vectoriel qui intervient :

$$\vec{e}_\lambda = \vec{e}_0 = \vec{e}_z \text{ (polarisation } \pi) \Leftrightarrow Q = 0 \quad (\text{VII-142.a})$$

Si, maintenant, on prend $\vec{e}_\lambda = -(\vec{e}_x + i\vec{e}_y)/\sqrt{2}$, on obtient une polarisation circulaire, dite σ^+ , et la composante $Q = 1$

$$\vec{e}_\lambda = \vec{e}_{+1} = -\frac{\vec{e}_x + i\vec{e}_y}{\sqrt{2}} \quad (\text{polarisation } \sigma^+) \Leftrightarrow Q = +1 \quad (\text{VII-142.b})$$

Lorsque $\vec{e}_\lambda = (\vec{e}_x - i\vec{e}_y) / \sqrt{2}$, on obtient une polarisation circulaire de sens opposé, appelée σ^- , et la composante $Q = -1$:

$$\vec{e}_\lambda = \vec{e}_{-1} = \frac{\vec{e}_x - i\vec{e}_y}{\sqrt{2}} \quad (\text{polarisation } \sigma^-) \Leftrightarrow Q = -1 \quad (\text{VII-142.c})$$

Enfin, par une polarisation \vec{e}_λ quelconque, on décompose \vec{e}_λ sur \vec{e}_{+1} , \vec{e}_0 et \vec{e}_{-1} et on obtient une combinaison linéaire des 3 composantes standard $Q = +1, 0$ et -1 de \vec{R} . Nous nous contenterons donc de raisonner dans les trois cas simples où la polarisation est σ^+ , σ^- ou π . Le théorème de Wigner-Eckart dit alors que la probabilité de transition est proportionnelle à :

$$|\langle J_e, M_e | J_f \ 1 \ M_f \ Q \rangle|^2$$

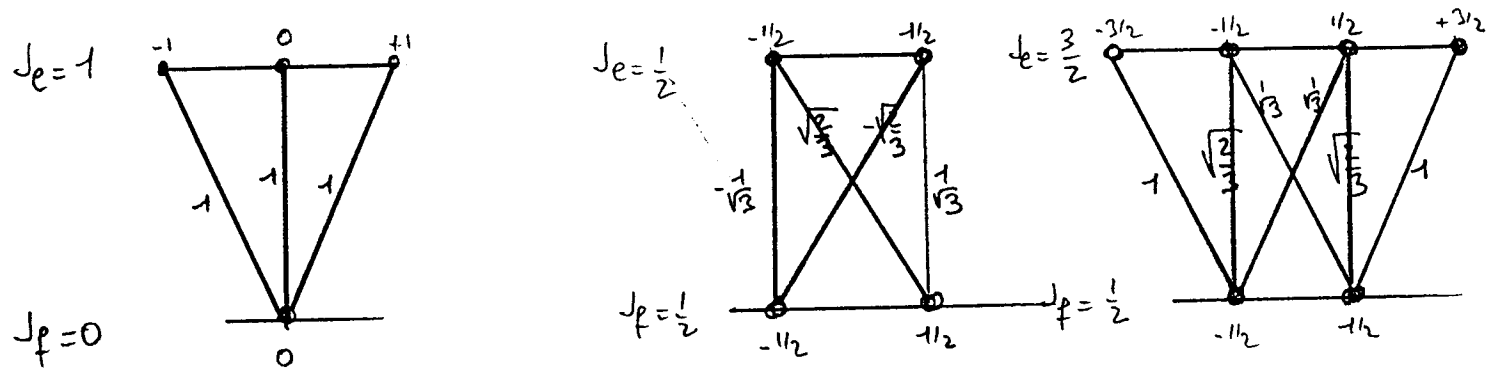
Le carré d'un coefficient de Clebsch-Gordan permet donc d'évaluer les intensités relatives de toutes les transitions verticales de la figure VII.2. Les règles de sélection suivantes sont obtenues :

$$\begin{aligned} |J_e - J_f| &\leq 1 \\ |M_e - M_f| &\leq 1 \end{aligned} \quad (\text{règles dipolaires}) \quad (\text{VII-143.a})$$

et

$$\begin{aligned} M_e &= M_f && \text{polarisation } \pi \\ M_e &= M_f + 1 && \text{polarisation } \sigma^+ \\ M_e &= M_f - 1 && \text{polarisation } \sigma^- \end{aligned} \quad (\text{conservation du moment cinétique}) \quad (\text{VII-143.b})$$

On reporte souvent sur les figures du type (VII.3) les valeurs des coefficients de Clebsch-Gordan $\langle J_e, M_e | J_f \ 1 \ M_f \ Q \rangle$ [leur valeur absolue suffit pour évaluer la probabilité de transition si $\vec{e}_\lambda = \vec{e}_{+1}, \vec{e}_0$ ou \vec{e}_{-1} mais, pour une polarisation \vec{e}_λ quelconque qui est combinaison linéaire de ces vecteurs, il est également utile d'avoir leur signe]. Les figures VII.4 donnent quelques exemples des schémas ainsi obtenus : dans tous les cas, une polarisation π correspond à une transition verticale, σ^+ à une transition inclinée vers la



diagrammes de polarisation

Fig. VII.4

droite, σ^- à une transition inclinée vers la gauche. Ces diagrammes sont quelquefois appelés "diagrammes de polarisation".

Remarque :

• Le fait que \vec{R} n'agisse que sur les variables orbitales des électrons donne les règles de sélection suivantes pour un atome en couplage LS (on pose $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ où \vec{L} et \vec{S} sont les moments orbitaux de l'ensemble des électrons) :

$$\Delta L = 0, \pm 1$$

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta J = 0, \pm 1$$

où ΔL , ΔS et ΔJ désignent les différences entre les nombres quantiques associés au niveau excité et au niveau fondamental. De même, si l'on considère un atome de spin nucléaire non-nul I , et si l'on pose $F = \vec{I} + \vec{J}$, on obtient :

$$\Delta F = 0, \pm 1 \tag{VII-145}$$

c) Opérateurs tensoriels K = 2

Pour des opérateurs tensoriels d'ordre $K = 2$ (ou plus), on peut faire le même type de raisonnement qu'aux paragraphes a et b précédents. Par exemple, dans un sous-espace $\mathcal{E}(\tau, J)$ donné, tous les opérateurs tensoriels irréductibles d'ordre K donné sont proportionnels entre eux.

A partir de l'opérateur vectoriel \vec{J} , on peut construire, grâce aux coefficients de Clebsch-Gordan (VII- 56) [ou les formules (VII- 74)] l'opérateur hermitique $\overline{J}^{(K=2)}$ de composantes standard :

$$\begin{aligned} \overline{J}_{\pm 2}^{(2)} &= (J_{\pm 1})^2 = (J_{\pm})^2 / 2 \\ \overline{J}_{\pm 1}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (J_{\pm 1} J_0 + J_0 J_{\pm 1}) = \mp (J_{\pm} J_z + J_z J_{\pm}) / \sqrt{2} \\ \overline{J}_0^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (J_{+1} J_{-1} + 2J_0^2 + J_{-1} J_{+1}) = (3J_z^2 - \vec{J}^2) / \sqrt{6} \end{aligned} \tag{VII-146}$$

Tous les tenseurs $T^{(K=2)}$ seront proportionnels à ce tenseur $\overline{J}^{(K=2)}$, dans $\mathcal{E}(\tau, J)$. La valeur moyenne $\langle \overline{J}^{(2)} \rangle$ de ce tenseur [c'est-à-dire les 5 valeurs moyennes des composantes $\overline{J}_Q^{(2)}$] sera appelée "alignement" du système physique (par opposition à "orientation" qui désigne la valeur moyenne de \vec{J}). Le coefficient de Clebsch-Gordan $\langle J 2 M'Q | J M \rangle$ qui apparaît grâce au théorème de Wigner-Eckart montre que l'alignement ne peut être non nul que dans un espace $\mathcal{E}(\tau, J)$ où $J \geq 1$ (règle du triangle).

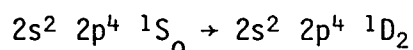
Un exemple important d'opérateur $T^{(K=2)}$ est l'opérateur quadrupolaire électrique associé en mécanique quantique à un ensemble de charges [complément VII-B] .

Remarques

(i) Un tenseur \overline{T} ($n=2$) n'est pas nécessairement proportionnel à $\overline{J}^{(K=2)}$ dans $\mathfrak{E}(\tau, J)$. Ce n'est en effet exact que pour sa partie irréductible $K = 2$ c'est-à-dire la partie symétrique à trace nulle. La partie antisymétrique est proportionnelle à l'opérateur $\overline{J} \times$, c'est-à-dire un opérateur $K = 1$ (avec un coefficient totalement indépendant en général de celui pour $K = 2$). Quant à la trace, elle est proportionnelle (avec un troisième coefficient indépendant) à \overline{J}^2 , c'est-à-dire à $(\mathbb{1})$.

(ii) En développant l'exponentielle $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ de (VII-138) en puissance de a_0/λ , on fait apparaître, à la suite des transitions dipolaires électriques, des transitions multipolaires d'ordre plus élevé (\star) . Des opérateurs tensoriels irréductibles d'ordre $K = 2$, ou plus, peuvent entrer en ligne de compte, ce qui modifie le coefficient de Clebsch-Gordan écrit plus haut et, en conséquence, les règles de sélection que nous avons écrites.

Un exemple bien connu est la raie quadrupolaire verte de l'oxygène atomique ($\lambda = 5.577 \text{ \AA}$, durée de vie correspondante $\tau \approx 1 \text{ s}$), correspondant à la transition :



Il est clair qu'une telle transition où $\Delta J = 2$ (et, de plus, ΔL vaut également 2) est interdite par les règles de sélection dipolaires; c'est ce qui explique la nécessité d'émettre lors de la désexcitation un photon quadrupolaire (le fait que l'effet soit d'un ordre supérieur en a_0/λ explique la longue durée de vie correspondante; le niveau est métastable).

d) Décomposition de la matrice densité d'un système sur les opérateurs tensoriels irréductibles

Nous allons étudier dans ce paragraphe un système physique de moment cinétique J donné [on considère que l'espace des états est restreint à un espace irréductible $\mathfrak{E}(\tau, J)$ donné] ; les $2J+1$ kets $|J, M\rangle$ associés aux valeurs $M = J, J-1, J-2, \dots, -J+1, -J$, forment alors une base de l'espace des états \mathfrak{E} .

(\star) Voir par exemple la réf. $(^{13})$ citée dans l'introduction, complément A_{XIII} .

α. Espace de Liouville

Soit maintenant \mathcal{L} l'ensemble des opérateurs agissant dans \mathfrak{E} ; dans une base donnée de \mathfrak{E} , ces opérateurs sont représentés par des matrices $(2J+1) \times (2J+1)$. On se convainc facilement que l'ensemble \mathcal{L} est un espace vectoriel, de dimension $(2J+1)^2$, défini sur le corps des complexes ^(*). \mathcal{L} est dit "espace de Liouville". Une base possible pour \mathcal{L} est l'ensemble des opérateurs $|J, M \rangle \langle J, M'|$ (opérateurs "dyadiques"), où M et M' prennent chacun $(2J+1)$ valeurs; lorsque ces opérateurs seront considérés comme des vecteurs de l'espace de Liouville. Nous les noterons :

$$|M, M' \rangle \langle J, M \rangle \langle J, M'| \tag{VII-147}$$

De même, à tout opérateur A nous ferons correspondre l'élément de \mathcal{L} noté $|A \rangle \langle$. On peut introduire un produit scalaire dans l'espace de Liouville entre deux éléments $|A \rangle \langle$ et $|B \rangle \langle$ quelconques par :

$$\langle\langle B|A \rangle\rangle = \text{Tr} \{ B^\dagger A \} \tag{VII-148}$$

(où la trace du second membre est prise comme habituellement dans l'espace des états \mathfrak{E}). On vérifie facilement (invariance de la trace par permutation circulaire) que :

$$\langle\langle B|A \rangle\rangle = \langle\langle A|B \rangle\rangle^* \tag{VII-149.a}$$

et que ^(**) :

$$\langle\langle A|A \rangle\rangle \geq 0 \tag{VII-149.b}$$

[la nullité n'étant réalisée que si A est identiquement nul]. Les propriétés de définition d'une norme (définie positive) et d'un produit scalaire sont donc bien satisfaites.

^(*) ce serait le corps des réels si l'on se restreignait aux opérateurs hermitiques.

^(**) $\langle\langle A|A \rangle\rangle$ est réel puisque $\text{Tr} \{ C^\dagger \} = [\text{Tr} \{ C \}]^*$ et que $(A^\dagger A)^\dagger = A^\dagger A$. D'autre part, tout opérateur A peut s'écrire $A = A_R + iA_I$, où A_R et A_I sont les deux opérateurs hermitiques (donc diagonalisables) :

$$A_R = \frac{1}{2} (A + A^\dagger) \quad A_I = \frac{1}{2i} (A - A^\dagger)$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \langle\langle A|A \rangle\rangle &= \text{Tr} \{ A_R^\dagger A_R \} + \text{Tr} \{ A_I^\dagger A_I \} + i \text{Tr} \{ A_R^\dagger A_I - A_I^\dagger A_R \} \\ &= \text{Tr} \{ A_R^2 \} + \text{Tr} \{ A_I^2 \} \end{aligned}$$

Si $\langle\langle A|A \rangle\rangle$ est nul, la somme des carrés des valeurs propres de A_R (et de A_I) est nulle; A_R et A_I , et par suite A , sont donc nuls.

Comme

$$\begin{aligned} \langle\langle M, M' | M'', M''' \rangle\rangle &= \text{Tr} \left\{ |J, M'\rangle\langle J, M' | J, M'' \rangle\langle J, M''' | \right\} \\ &= \delta_{M, M''} \delta_{M', M'''} \end{aligned} \quad (\text{VII-150})$$

la base $|M, M'\rangle\rangle$ est orthonormée. On peut donc décomposer tout opérateur A sous la forme :

$$\begin{aligned} A &= \sum_{M, M'=-J}^{+J} \langle\langle M, M' | A \rangle\rangle |M, M'\rangle\rangle \\ &= \sum_{M, M'} \text{Tr} \left\{ |J, M'\rangle\langle J, M | A \right\} |J, M\rangle\langle J, M'| \end{aligned} \quad (\text{VII-151})$$

Comme

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ |J, M'\rangle\langle J, M | A \right\} &= \sum_{M''=-J}^{+J} \langle J, M'' | J, M'\rangle\langle J, M | A | J, M'' \rangle \\ &= \langle J, M | A | J, M'\rangle \end{aligned} \quad (\text{VII-152})$$

on vérifie facilement que la décomposition (VII-151) est simplement équivalente à l'introduction de deux relations de fermeture sur la base $\{|J, M\rangle\rangle\}$. On peut, en particulier, décomposer la matrice densité ρ du système sous la forme :

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{MM'=-J}^{+J} \rho_{MM'} |M, M'\rangle\rangle \\ &= \sum_{MM'} \rho_{MM'} |J, M\rangle\langle J, M'| \end{aligned} \quad (\text{VII-153.a})$$

où :

$$\rho_{MM'} = \langle J, M | \rho | J, M'\rangle \quad (\text{VII-153.b})$$

L'hermiticité de ρ entraîne que :

$$\rho_{M'M} = (\rho_{MM'})^* \quad (\text{VII-153.c})$$

B. Transformation par rotation

On peut se demander comment se transforment par rotation les éléments $|A\rangle\rangle$ de l'espace de Liouville. L'opérateur A devenant RAR^\dagger lors d'une rotation, il est naturel de poser :

$$|A'\rangle\rangle = |RAR^\dagger\rangle\rangle \quad (\text{VII-154.a})$$

où :

$$|A'\rangle\rangle = \mathcal{R} |A\rangle\rangle \quad (\text{VII-154.b})$$

est le transformé de $|A\rangle\rangle$ par rotation, et \mathcal{R} l'opérateur qui décrit cette rotation dans l'espace de Liouville.

Examinons en particulier comment se transforme la base $|M, M' \gg$ introduite plus haut. On a :

$$R|J, M \gg = \sum_{M''=-J}^{+J} (R^{[J]})_{M''M} |J, M'' \gg \quad (\text{VII-155.a})$$

et donc :

$$\langle J, M' | R^\dagger = \sum_{M'''=-J}^{+J} (R^{[J]})_{M'''M'}^* \langle J, M''' | \quad (\text{VII-155.b})$$

Par suite :

$$R|J, M \gg \langle J, M' | R^\dagger = \sum_{M''} \sum_{M'''} (R^{[J]})_{M''M} (R^{[J]})_{M'''M'}^* |J, M'' \gg \langle J, M''' | \quad (\text{VII-156.a})$$

ou encore :

$$\mathcal{L}\mathcal{R}|M, M' \gg = \sum_{M''M'''} (R^{[J]})_{M''M} (R^{[J]})_{M'''M'}^* |M'', M''' \gg \quad (\text{VII-156.b})$$

Les transformations par rotation des $|M, M' \gg$ ne se font donc pas de façon particulièrement simple (deux matrices de rotation interviennent)

γ. Base des opérateurs $T_Q^{(K)}$

Dans l'espace des états \mathcal{E} de départ, on connaît l'action d'un opérateur vectoriel, le moment cinétique \vec{J} lui-même. A cet opérateur $T^{(K=1)}$ correspondent 3 éléments notés $|K, Q \gg$ ($K = 1, Q = 1, 0, -1$) de \mathcal{L} .

Par produit tensoriel de \vec{J} par lui-même, on peut construire, comme nous l'avons fait au § B-3-a, deux opérateurs $K = 0$ (opérateur scalaire proportionnel à \vec{J}^2) et $K = 2$ [alignement; cf. (VII-146)] ; nous ne gardons pas l'opérateur $K = 1$ puisque'il est proportionnel à \vec{J} d'après le théorème de Wigner-Eckart [c'est en fait l'opérateur $\vec{J} \times \vec{J}$ qui est nul]. Nous avons ainsi introduit un nouvel élément $|K = 0, Q = 0 \gg$, et 5 éléments de \mathcal{L} , $|K = 2, Q \gg$ où Q varie entre +2 et -2. On peut continuer de la même façon et multiplier tensoriellement l'opérateur $T^{(K=2)}$ par \vec{J} pour obtenir $T^{(K=3)}$, etc... Il est clair que cette procédure ne peut se répéter indéfiniment : dès que $K \geq 2J+1$, les opérateurs obtenus sont nuls [puisque $\langle J K M Q | J M' \gg$ est nul d'après la règle de sélection du triangle] .

En tout, nous avons ainsi défini $2J+1$ opérateurs tensoriels $K = 0, 1, 2, \dots, 2J$, ayant chacun $2K+1$ composantes. Comme :

$$\sum_{K=0}^{2J} (2K+1) = 2 \frac{2J(2J+1)}{2} + 2J+1 = (2J+1)^2 \quad (\text{VII-157})$$

le nombre de ces opérateurs est exactement égal à celui de la dimension de l'espace de Liouville \mathcal{L} . A priori, les $|K, Q \rangle\rangle$ peuvent donc former une base; il nous faut cependant vérifier qu'ils sont indépendants.

Pour cela, commençons par calculer la trace de chaque opérateur $T_Q^{(K)}$ que nous avons introduit. Si $K = Q = 0$, on peut, par multiplication par un facteur convenable, convenir de poser :

$$T_0^{(K=0)} = \frac{1}{2J+1} \mathbf{1} \quad (\text{VII-158})$$

de sorte que :

$$\text{Tr} \left\{ T_0^{(K=0)} \right\} = 1 \quad (\text{VII-159})$$

Pour les traces de tous les autres opérateurs $T_Q^{(K)}$, elles sont nécessairement nulles. En effet, la première des relations (VII-84) donne :

$$\forall Q \text{ Tr} \left\{ T_Q^{(K)} \right\} = \text{Tr} \left\{ \left[J_z, T_Q^{(K)} \right] \right\} = 0 \quad (\text{VII-160})$$

(la trace d'un commutateur est nulle). Donc, si $Q \neq 0$, la trace de $T_Q^{(K)}$ est nulle. Si Q n'est pas nul, on utilise la deuxième des égalités (VII-84) pour écrire :

$$\text{Tr} \left\{ T_{Q\pm 1}^{(K)} \right\} \propto \text{Tr} \left\{ \left[J_{\pm}, T_Q^{(K)} \right] \right\} = 0 \quad (\text{VII-161})$$

où le coefficient de proportionnalité n'est nul que si $K = 0$. Pour finir :

$$\text{Tr} \left\{ T_Q^{(K)} \right\} = \delta_{K0} \delta_{Q0} \quad (\text{VII-162})$$

Calculons maintenant le produit scalaire de deux éléments $|K, Q \rangle\rangle$ de \mathcal{L} :

$$\langle\langle K, Q | K', Q' \rangle\rangle = \text{Tr} \left\{ T_Q^{(K)\dagger} T_{Q'}^{(K')} \right\} \quad (\text{VII-163.a})$$

Grâce à une multiplication par une constante convenable, on peut rendre chaque $T^{(K)}$ hermitique. Alors [cf. (VII.94)] :

$$\langle\langle K, Q | K', Q' \rangle\rangle = (-1)^Q \text{Tr} \left\{ T_{-Q}^{(K)} T_{Q'}^{(K')} \right\} \quad (\text{VII-163.b})$$

Pour évaluer cette trace, décomposons comme au § B-4-c le produit $T_{-Q}^{(K)} T_{Q'}^{(K')}$ en opérateur tensoriels irréductibles $Z_{Q''}^{(K'')}$:

$$T_{-Q}^{(K)} T_{Q'}^{(K')} = \sum_{K''Q''} \langle K K' -Q Q' | K'' Q'' \rangle Z_{Q''}^{(K'')} \quad (\text{VII-164})$$

Chaque opérateur $Z_{Q''}^{(K'')}$ est proportionnel à l'opérateur $T_{Q''}^{(K'')}$ de même ordre; d'après (VII-162), il a donc une trace nulle sauf si $K'' = Q'' = 0$. Par suite :

$$\langle\langle K, Q | K', Q' \rangle\rangle = (-1)^Q \langle K K' -Q Q' | 0 0 \rangle \times \beta \quad (\text{VII-165})$$

où β est une constante. D'après les règles de sélection sur les coefficients de Clebsch-Gordan, cette expression est nulle sauf si $K = K', Q = Q'$; elle est alors indépendante de Q [cf. égalité (VI-49)]. Les $|K, Q\rangle$ sont donc orthogonaux entre eux; la multiplication de chaque $T^{(K)}$ par une constante réelle suffit alors pour obtenir une base orthonormée. Pour finir :

$$\begin{aligned} \langle\langle K, Q | K', Q' \rangle\rangle &= \text{Tr} \left\{ T_Q^{(K)\dagger} T_{Q'}^{(K')} \right\} \\ &= \delta_{KK'} \delta_{QQ'} \end{aligned} \quad (\text{VII-166})$$

Nous avons ainsi construit une nouvelle base orthonormée dans l'espace de Liouville. Par rotation, les vecteurs de cette base se transforment de façon simple puisque l'égalité (VII-83) entraîne que :

$$\mathcal{L}_{\mathcal{R}} |K, Q\rangle = \sum_{Q'} (R^{[K]})_{Q'Q} |K, Q'\rangle \quad (\text{VII-167})$$

qui est plus pratique à manier que (VII-156.b)

Tout opérateur A , c'est-à-dire tout élément $|A\rangle\rangle$ de \mathcal{L} , peut être décomposé sur cette nouvelle base. En particulier, pour la matrice densité ρ , il vient :

$$|\rho\rangle\rangle = \sum_{K=0}^{2J} \sum_{Q=-K}^{+K} \rho_Q^{(K)} |K, Q\rangle\rangle \quad (\text{VII-168.a})$$

ou encore :

$$\rho = \sum_K \sum_Q \rho_Q^{(K)} T_Q^{(K)} \quad (\text{VII-168.b})$$

$$\begin{aligned} \text{où } \rho_Q^{(K)} &= \langle\langle K, Q | \rho \rangle\rangle = \text{Tr} \left\{ T_Q^{(K)\dagger} \rho \right\} \\ &= (-1)^Q \text{Tr} \left\{ T_{-Q}^{(K)} \rho \right\} \end{aligned} \quad (\text{VII-169})$$

Cette décomposition de ρ sur ses "composantes tensorielles" s'avère très souvent commode. La quantité $\rho_0^{(0)}$ est une constante, la trace de ρ (on l'appelle parfois la "population totale" des niveaux, lorsqu'on n'impose pas à cette trace de valoir 1). Les trois composantes $\rho_Q^{(1)}$ donnent l'orientation du niveau, les cinq de $\rho_Q^{(2)}$ son alignement, etc...

Si $J = 1/2$, la donnée des 3 composantes de l'orientation (et éventuellement de la population totale) suffit entièrement à déterminer ρ , et donc l'état du système; d'après le théorème de Wigner-Eckart, tous les moments d'ordre 2, 3, ... sont toujours strictement nuls.

Si $J = 1$, il faut ajouter la donnée des cinq $\rho_Q^{(2)}$ (alignement) aux $\rho_Q^{(1)}$ pour complètement déterminer l'état du système. Le raisonnement se prolonge de la même façon et, plus le moment cinétique d'un système est élevé, plus il faut donner de $\rho_Q^{(K)}$ pour spécifier sa matrice densité.

δ. Invariance par rotation dans l'évolution d'un système physique

L'évolution dans le temps de la matrice densité $\rho(t)$ peut dans de nombreux cas être écrite sous la forme :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\rho(t)\rangle\rangle = \mathcal{L}(t) |\rho(t)\rangle\rangle \quad (\text{VII-170})$$

où $\mathcal{L}(t)$ est un opérateur linéaire agissant dans \mathcal{L} , que nous appellerons "liouvillien". Si le système considéré est isolé, son hamiltonien H est indépendant du temps, et on a simplement (équation de Schrödinger) :

$$\mathcal{L}(t) |\rho(t)\rangle\rangle = | [H, \rho] \rangle\rangle \quad (\text{VII-171})$$

Cependant, l'équation (VII-170), que nous appellerons "équation pilote", est bien plus générale; elle inclut par exemple la possibilité d'interaction du système avec l'extérieur (compte tenu d'hypothèses souvent réalisées dans des cas physiques intéressants), de caractère aléatoire pour l'hamiltonien (théorie de la relaxation), etc... C'est donc sur elle que nous raisonnerons.

L'analogie de (VII-170) avec l'équation de Schrödinger est frappante. On peut, dans ce cas également, introduire l'opérateur d'évolution $u(t, t_0)$ qui permet d'écrire la solution de (VII-170) sous la forme :

$$|\rho(t) \gg = u(t, t_0) |\rho(t_0) \gg \tag{VII-172}$$

Cet opérateur doit satisfaire à :

$$i\hbar \frac{d}{dt} u(t, t_0) = \mathcal{G}(t) u(t, t_0) \tag{VII-173.a}$$

et

$$u(t_0, t_0) = \mathbb{1} \tag{VII-173.b}$$

Si, par exemple, il existe un opérateur $u(t, t_0)$ agissant dans l'espace des états qui donne l'évolution de ρ sous la forme :

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0) \tag{VII-174}$$

on a :

$$u(t, t_0) |\rho \gg = |U \rho U^\dagger \gg \tag{VII-175}$$

mais, cette fois encore, la forme (VII-172) est plus générale.

Supposons maintenant qu'une opération de rotation quelconque soit transformation de symétrie pour l'évolution du système physique considéré (on étudie par exemple un atome subissant de la part de ses voisins des collisions dans toutes les directions de l'espace avec la même probabilité). Si l'on revient au schéma général de la figure I-5, on est conduit à écrire, de façon tout à fait analogue à (I-103) :

$$\mathcal{L}_R u(t, t_0) = u(t, t_0) \mathcal{L}_R \tag{VII-176.a}$$

c'est-à-dire :

$$[\mathcal{L}_R, u(t, t_0)] = 0 \tag{VII-176.b}$$

(où il faut comprendre que le commutateur est calculé dans l'espace de Liouville \mathcal{L}). Les opérateurs $u(t, t_0)$ et $\mathcal{G}(t)$ sont donc des opérateurs scalaires en tant qu'opérateurs agissant dans \mathcal{L} . D'autre part, il est clair sur (VII-167) que les $|K, Q \gg$ satisfont, dans cet espace, aux relations de définition d'une base standard. Par suite, le théorème de Wigner-Eckart (appliqué cette fois

dans \mathcal{L} et non dans \mathcal{E} , mais le raisonnement reste le même) entraîne pour \mathcal{U} et \mathcal{C} des propriétés analogues à celles qu'entraîne la présence du coefficient de Clebsch-Gordan (VII-125) pour un opérateur $T^{(0)}$. On a donc :

$$\langle\langle K, Q | \mathcal{U}(t, t_0) | K', Q' \rangle\rangle = \delta_{KK'} \delta_{QQ'} C_K(t, t_0) \quad (\text{VII-177})$$

où C est un nombre indépendant de Q et Q' . Par suite, la relation (VII-171) donne :

$$\rho_Q^{(K)}(t) = \rho_Q^{(K)}(t_0) \times C_K(t, t_0) \quad (\text{VII-178})$$

Nous obtenons donc le résultat important suivant, exact chaque fois que l'invariance par rotation est préservée dans l'évolution du système physique considéré: Les différentes composantes tensorielles $\rho_Q^{(K)}$ de la matrice densité évoluent de façon totalement indépendante; La façon dont elles évoluent dépend de K , mais pas de Q . On conçoit l'importance pratique que peut prendre cette propriété dans beaucoup de problèmes physiques où l'invariance par rotation joue un rôle.

Exemple : On rencontre souvent le cas où :

$$C_K(t, t_0) = e^{-(t-t_0)/T_K} \quad (\text{VII-179})$$

où T_K est une constante positive, le temps de relaxation des observables tensorielles d'ordre K .

Remarques :

(i) Si l'on est dans le cas où la relation (VII-171) donne l'évolution de ρ , l'invariance par rotation impose donc à l'hamiltonien H d'être scalaire. L'opérateur H est donc proportionnel à l'opérateur $T_0^{(K=0)}$ écrit en (VII-158), qui commute avec tout opérateur dans \mathcal{E} [rappelons que \mathcal{E} a été restreint à un seul sous-espace $\mathcal{E}(\tau, J)$]. En d'autres termes, le système physique n'évolue pas, et les égalités (VII-178) en découlent de façon triviale.

(ii) Dans l'espace de Liouville \mathcal{L} , on définit facilement l'action d'un opérateur moment cinétique \vec{J} . Il suffit pour cela de considérer une rotation infinitésimale de vecteur $\delta \vec{a} = \vec{u} \delta \phi$ et de poser :

$$\mathcal{L}_R = 1 - i \delta \phi \vec{u} \cdot \vec{J} \quad (\text{VII-180})$$

Compte tenu de (VII-154), on voit que ceci revient à définir l'action de la composante $J_u = \vec{u} \cdot \vec{J}$ de \vec{J} par :

$$J_u |A\rangle\rangle = | [J_u, A] \rangle\rangle \quad (\text{VII-181})$$

Il est clair, sur la définition même des opérateurs tensoriels irréductibles, que :

$$J_z |K, Q \rangle = Q \hbar |K, Q \rangle \quad (\text{VII-182.a})$$

et

$$J_{\pm} |K, Q \rangle = \hbar \sqrt{K(K+1) - Q(Q \pm 1)} |K, Q \pm 1 \rangle \quad (\text{VII-182.b})$$

[où $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$]. Les $|K, Q \rangle$ satisfont donc exactement aux relations d'une base standard dans \mathcal{L} . L'espace de Liouville peut donc être décomposé comme la somme directe de $2J+1$ sous-espaces invariants irréductibles sous l'action de l'ensemble des opérateurs de rotation : l'espace (de dimension 1) engendré par $|K=0, Q=0 \rangle$, celui (de dimension 2) engendré par les kets $|K=1, Q \rangle$, celui (de dimension 5) engendré par les $|K=2, Q \rangle$, etc... [rappelons que $K \leq 2J$]. Chacun de ces sous-espaces est sous-espace propre de l'opérateur :

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \\ &= \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2 \end{aligned} \quad (\text{VII-183})$$

avec la valeur propre $K(K+1) \hbar^2$:

$$\vec{J}^2 |K, Q \rangle = K(K+1) \hbar^2 |K, Q \rangle \quad (\text{VII-184})$$

Dans l'espace de Liouville \mathcal{L} , un opérateur scalaire (invariant par rotation) sera un opérateur qui commute avec tout opérateur de rotation \mathcal{R} , c'est-à-dire avec toute composante de \vec{J} . L'égalité (VII-175) indique que $u(t, t_0)$ est scalaire. Le fait que $u(t, t_0)$ commute avec les opérateurs J_z et \vec{J}^2 implique alors que ses éléments de matrice entre vecteurs propres de valeurs propres différentes sont toujours nuls; la relation (VII-171) en découle alors immédiatement (sans faire intervenir le théorème de Wigner-Eckart dans l'espace de Liouville).

Si maintenant l'évolution du système physique étudié n'est invariante que par rotation autour de l'axe Oz , l'opérateur u commute toujours avec J_z mais plus nécessairement avec \vec{J}^2 . Dans ces conditions, les évolutions des $\rho_Q^{(K)}$ associées à des valeurs de Q différentes sont toujours découplées, mais par celles entre valeurs différentes de K pour la même valeur de Q [couplage entre composantes $Q = 0$ de l'orientation, l'alignement, etc...]

CHAPITRE VIII

LE RENVERSEMENT DU TEMPS

A. RENVERSEMENT DU TEMPS EN MÉCANIQUE CLASSIQUE.....	p.258
B. RENVERSEMENT DU TEMPS EN MÉCANIQUE QUANTIQUE.....	p.264
1. OPÉRATEURS ANTILINÉAIRES.....	p.264
2. CONDITIONS IMPOSÉES À L'OPÉRATEUR RENVERSEMENT DU TEMPS	p.273
C. FORME EXPLICITE DE L'OPÉRATEUR RENVERSEMENT DU TEMPS	p.277
1. PARTICULE SANS SPIN	p.277
2. PARTICULE DE SPIN 1/2	p.278
3. PARTICULE DE SPIN QUELCONQUE.....	p.280
4. ENSEMBLE DE PLUSIEURS PARTICULES.....	p.282
D. APPLICATIONS	p.282
1. INVARIANCE PAR RENVERSEMENT DU SENS DU TEMPS DE L'ÉVOLUTION DU SYSTÈME... p.282	
a) Généralités	
b) Postulat de mircoréversibilité	
c) Théorème de Kramers	
2. OBSERVABLES PAIRES ET IMPAIRES PAR RENVERSEMENT DU TEMPS..... p.291	
a) Définition, propriétés	
b) Propriétés des éléments de matrices d'observables paires ou impaires	
c) Théorème de Van Vleck	
d) Nullité du moment dipolaire électrique d'un système de moment cinétique donné et invariant par renversement du temps.	

Dans ce chapitre VIII, nous allons envisager une opération de symétrie nouvelle : le renversement du temps. Il s'agit là d'une opération discrète, qui forme avec l'identité un groupe à deux éléments (de façon analogue à la parité d'espace); il n'existe donc ni groupe de Lie ni générateur infinitésimal associé. Nous allons voir que, si l'on cherche à construire en mécanique quantique un opérateur linéaire correspondant au renversement du temps, on aboutit à des contradictions; il faut en fait prendre un opérateur antilinéaire. C'est pourquoi, après un examen rapide de la façon dont se présente le renversement du temps en mécanique classique (§ A), nous rappellerons un certain nombre de propriétés des opérateurs antilinéaires (§ B). Nous construirons ensuite explicitement l'opérateur quantique de renversement du temps (§ C). Enfin, nous discuterons certaines applications, comme le théorème de Kramers et le théorème de Van Vleck (§ D).

A. RENVERSEMENT DU TEMPS EN MÉCANIQUE CLASSIQUE

Qu'appelle-t-on renversement du temps en mécanique classique ? C'est l'opération \mathcal{T} qui, à tout mouvement d'un système physique décrit par les fonctions $q_i(t)$, associe un autre mouvement, décrit par les fonctions $q_i(-t)$. En d'autres termes, à tout instant t , les valeurs des coordonnées généralisées après opération de renversement du temps sont celles qu'avaient les mêmes coordonnées à l'instant $-t$ pour le mouvement initial :

$$q_i(t) = f_i(t) \xrightarrow{\mathcal{T}} q_i(t) = f_i(-t) \quad (\text{VIII-1})$$

Il est clair que les dérivées \dot{q}_i se transforment suivant :

$$\dot{q}_i(t) = \frac{d}{dt} f_i(t) \xrightarrow{\mathcal{T}} \dot{q}_i(t) = -\frac{d}{dt} f_i(-t) \quad (\text{VIII-2})$$

Pour définir le renversement du temps de façon imagée , on dit parfois qu'on filme le mouvement initial, et que l'on projette ensuite le film à l'envers (en commençant par la fin du film); on obtient ainsi une image du mouvement après action de \mathcal{C} (fig. VIII.1).

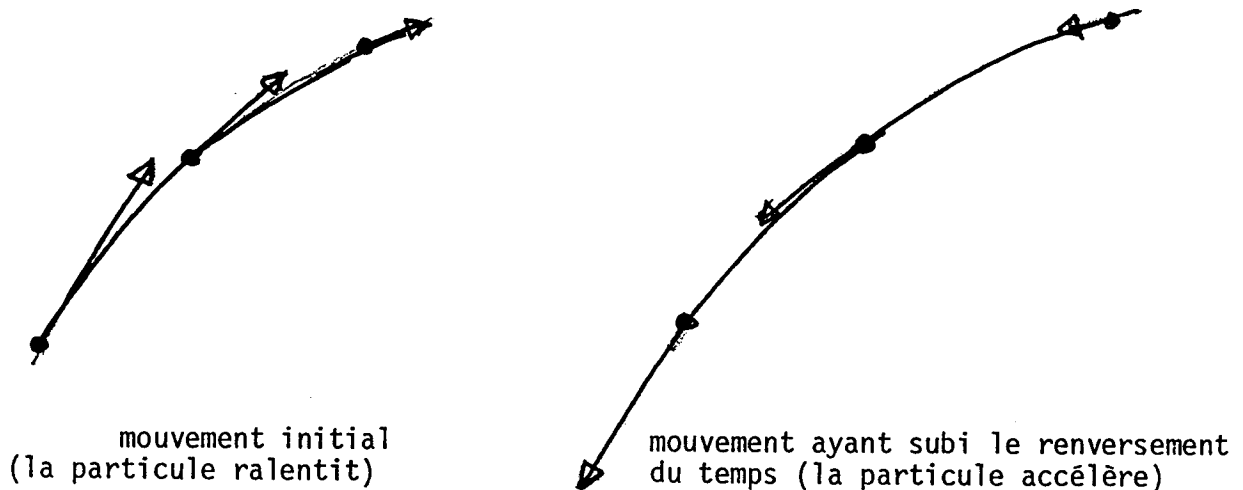


Fig. VIII.1

Suivant la définition générale donnée au chapitre I, l'opération \mathcal{C} sera dite opération de symétrie si, à un mouvement possible quelconque, correspond après action de \mathcal{C} un autre mouvement possible (avec les mêmes lois d'évolution pour le système). Le schéma correspondant à la fig. I.1 est donc ici celui de la figure VIII.2.

Exemple : Considérons une particule de position \vec{r} , soumise à l'action d'une force \vec{F} qui dépend de \vec{r} , $\dot{\vec{r}}$ (vitesse) et du temps t . L'équation du mouvement initial est :

$$m \ddot{\vec{r}} = \vec{F}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}; t) \tag{VIII-3}$$

(où m est la masse de la particule). Dans l'opération de renversement du temps, chaque mouvement décrit par une fonction $\vec{r}(t)$ devient :

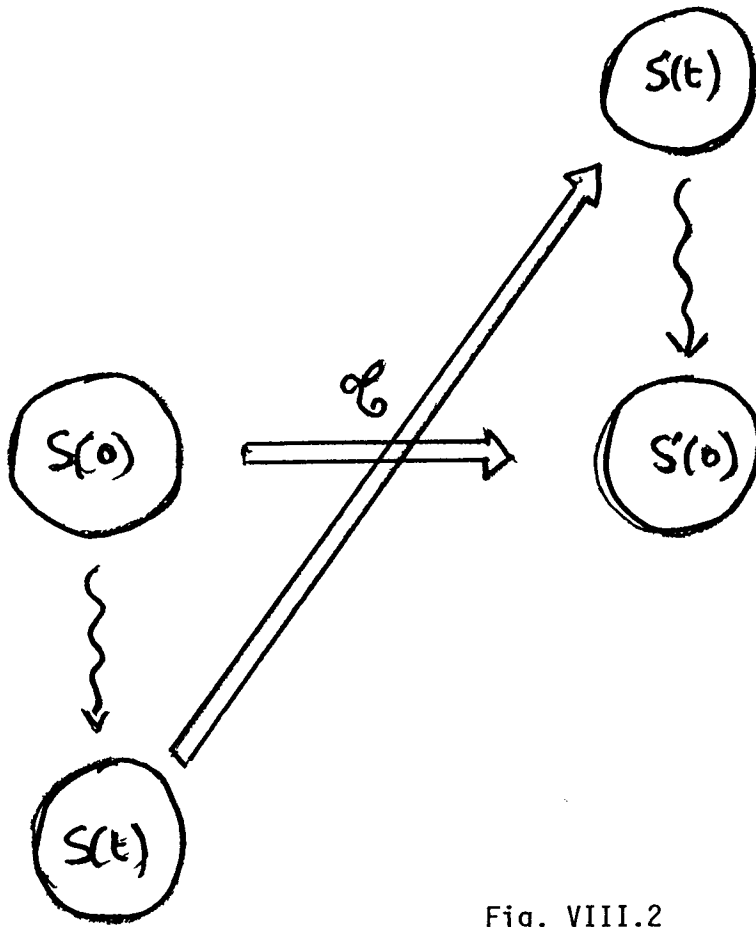
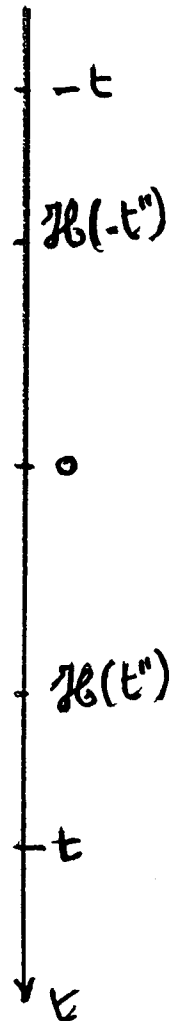


Fig. VIII.2



$$\begin{matrix} \vec{r}(t) & \vec{r}(-t) \\ \dot{\vec{r}}(t) & -\dot{\vec{r}}(-t) \\ \ddot{\vec{r}}(t) & \ddot{\vec{r}}(-t) \end{matrix} \xrightarrow{\mathcal{E}}$$
(VIII-4)

Donc l'opération \mathcal{E} sera opération de symétrie si :

$$m \ddot{\vec{r}}(-t) = \vec{F}(\vec{r}, -\dot{\vec{r}}; -t)$$
(VIII-5)

c'est-à-dire :

$$\vec{F}(\vec{r}, -\dot{\vec{r}}; -t) = \vec{F}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}; t)$$
(VIII-6)

quels que soient \vec{r} , $\dot{\vec{r}}$ et t . En particulier, si \vec{F} dérive d'un potentiel $V(\vec{r})$ ne dépendant que de \vec{r} , il est clair que \mathcal{E} est toujours opération de symétrie. C'est le cas par exemple pour une particule chargée soumise à l'action d'un potentiel électrostatique (électron tournant autour d'un proton immobile, satellite tournant autour de la terre, etc...; cf. fig. VIII-3).

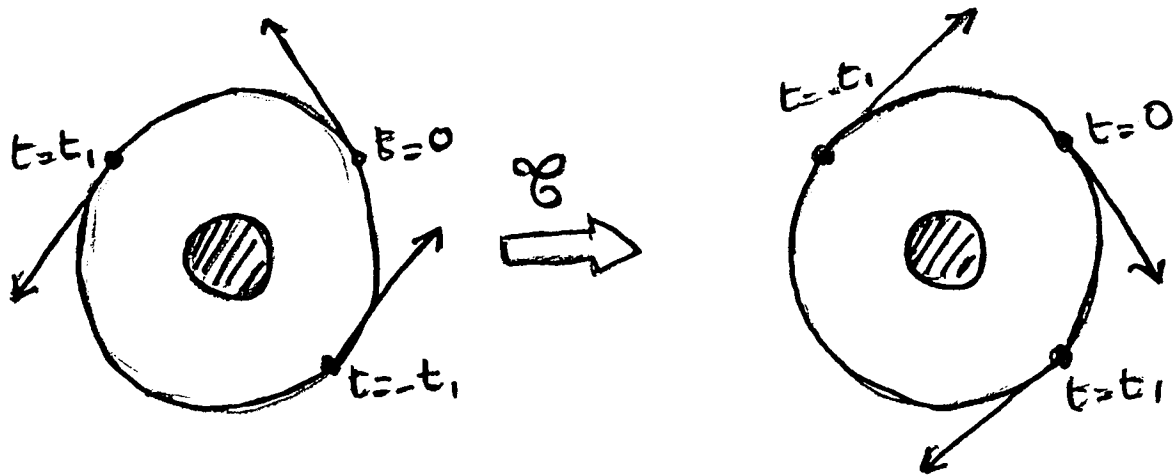


Fig. VIII.3

En revanche, si des forces magnétiques sont présentes, et si \vec{F} s'écrit (force de Lorentz) :

$$\vec{F} = q [\vec{E}(r) + \dot{\vec{r}} \times \vec{B}(\vec{r})] \quad (\text{VIII-7})$$

on voit facilement que la présence du terme en $\dot{\vec{r}}$ implique que la condition (VIII-6) n'est pas satisfaite. On peut par exemple s'en convaincre en supposant que \vec{E} est nul et \vec{B} uniforme; si l'on prend alors une particule de vitesse initiale \vec{v}_0 perpendiculaire à \vec{B} , la trajectoire est un cercle, et ce cercle n'est pas le même si l'on renverse la vitesse initiale \vec{v}_0 (fig. VIII.4). Il est d'ailleurs élémentaire de vérifier que le mouvement obtenu par action de \mathcal{C} obéit aux équations du mouvement dans un champ $-\vec{B}$ opposé au champ initial.

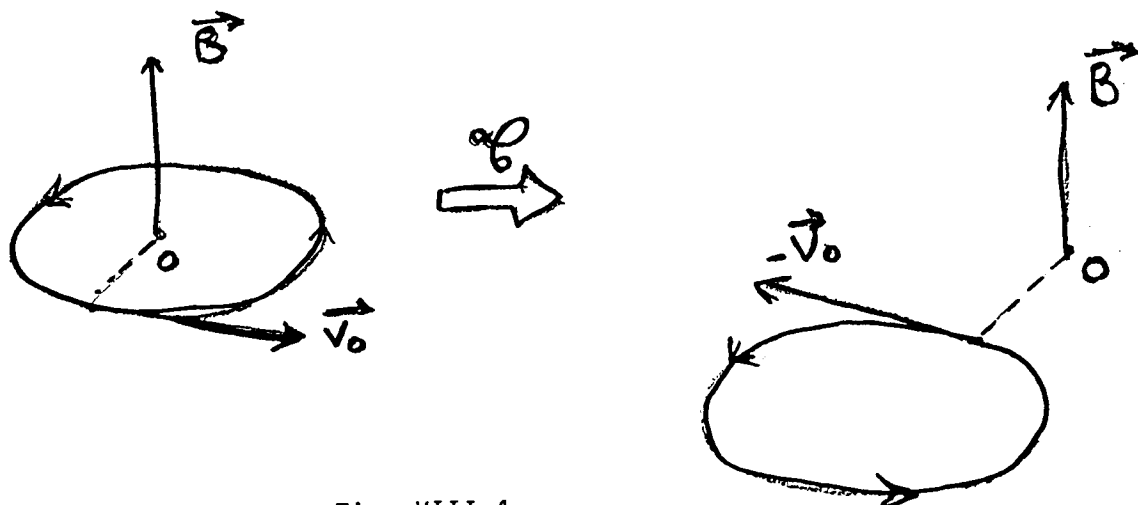


Fig. VIII.4

Ce résultat se généralise à un ensemble de particules chargées : le renversement du temps est opération de symétrie lorsque ces particules sont soumises à l'action d'un potentiel scalaire appliqué de l'extérieur (champ électrostatique), mais ce n'est plus le cas si des champs magnétiques sont appliqués de l'extérieur.

Remarques :

(i) Si le système physique considéré est isolé (aucun champ appliqué de l'extérieur), le renversement du temps est toujours opération de symétrie lorsque les interactions entre particules sont de nature électromagnétique, même si ces interactions font intervenir les champs \vec{E} et \vec{B} : les lois de l'électromagnétisme sont invariantes par renversement du temps. Cependant, il faut noter que la transformation (VIII-4) conduit à changer le signe des champs \vec{B} créés par les particules (sans modifier celui de \vec{E}) :

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}; t) &\stackrel{\mathcal{C}}{\longrightarrow} \vec{E}(\vec{r}; -t) \\ \vec{B}(\vec{r}; t) &\stackrel{\mathcal{C}}{\longrightarrow} -\vec{B}(\vec{r}; -t) \end{aligned} \quad (\text{VIII-8})$$

[La loi de Coulomb ne fait intervenir que la position des particules, alors que celle de Biot et Savart fait explicitement intervenir la vitesse, qui change de signe sous l'action de \mathcal{C}] .

Si le champ \vec{B} est appliqué de l'extérieur, le renversement du temps redevient une opération de symétrie si l'on convient de changer \vec{B} en $-\vec{B}$. Cette opération est naturelle puisque \vec{B} devient $-\vec{B}$ si l'on inverse les vitesses des particules créant \vec{B} (par exemple le courant parcourant le solénoïde qui est à l'origine de \vec{B}).

(ii) Il est clair que l'opération de renversement du temps que nous avons définie dépend de l'origine des temps choisis. On pourrait aussi bien définir un ensemble d'opérations \mathcal{C}_{t_0} par :

$$q_i(t) \stackrel{\mathcal{C}_{t_0}}{\longrightarrow} \tilde{q}_i(t) = q_i(2t_0 - t) \quad (\text{VIII-9})$$

(on vérifie que l'opération est bien l'identité si $t = t_0$). On voit cependant que \mathcal{C}_{t_0} est l'opération $\mathcal{C}_{t_0=0}$ (c'est-à-dire \mathcal{C}), suivie d'une translation de temps d'une quantité $2t_0$. Si les symétries du mouvement par translation

dans le temps sont connues, l'étude de la seule opération \mathcal{E} suffit pour caractériser l'effet de toutes les opérations \mathcal{E}_{t_0} .

Donc si l'on considère un système dont les lois d'évolution sont invariantes par translation de temps, et si \mathcal{E} est opération de symétrie, il en est de même de toute opération \mathcal{E}_{t_0} centrée à une origine des temps t_0 quelconque.

(iii) Dans le point de vue de Lagrange des équations du mouvement, on utilise souvent un Lagrangien \mathcal{L} qui est la somme d'une fonction quadratique des \dot{q}_i (sans terme linéaire) et d'une fonction qui ne dépend que des q_i et du temps. Par exemple :

$$\mathcal{L} = T(\dot{q}_i) - V(q_i; t) \tag{VIII-10}$$

où $T(\dot{q}_i)$ est l'énergie cinétique, quadratique par rapport aux \dot{q}_i . L'opération \mathcal{E} sera alors opération de symétrie si :

$$V(q_i; t) = V(q_i; -t) \tag{VIII-11}$$

(de façon générale, \mathcal{E}_{t_0} sera opération de symétrie quel que soit t_0 si V est indépendant du temps). On aura alors :

$$\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i; t) = \mathcal{L}(q_i, -\dot{q}_i; t) \tag{VIII-12}$$

La fonction \mathcal{L} étant par hypothèse quadratique par rapport aux \dot{q}_i (sans terme linéaire), l'impulsion p_i :

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}(q_i, \dot{q}_i; t) \tag{VIII-13}$$

sera changée en son opposée sous l'action de \mathcal{E} . Par suite :

$$\mathcal{H} = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \tag{VIII-14}$$

sera invariant dans l'opération \mathcal{E} . On vérifie alors facilement que les équations de Hamilton :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \end{array} \right. \tag{VIII-15}$$

sont invariantes par la transformation :

$$\begin{array}{ccc} q_i & \xrightarrow{\mathcal{E}} & q_i \\ p_i & & -p_i \end{array} \tag{VIII-16}$$

Si, cependant, le Lagrangien n'a pas une dépendance quadratique pure par rapport aux \dot{q}_i , la situation est plus compliquée. Par exemple, si :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 + q \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(r, t) - q U(\vec{r}; t) \quad (\text{VIII-17})$$

(particule de charge q dans des champs \vec{E} et \vec{B}), le mouvement n'est plus invariant par renversement du temps, et cette opération ne se traduit plus par un changement de signe de \vec{p} , mais par :

$$\vec{p} \xrightarrow{\mathcal{L}} \vec{p}' \quad (\text{VIII-18})$$

avec (renversement de la vitesse) :

$$\vec{p}' - q \vec{A}(\vec{r}; -t) = - [\vec{p} - q \vec{A}(\vec{r}; t)] \quad (\text{VIII-19.a})$$

c'est-à-dire :

$$\vec{p}' = -\vec{p} + q [\vec{A}(\vec{r}; t) + \vec{A}(\vec{r}; -t)] \quad (\text{VIII-19.b})$$

B. RENVERSEMENT DU TEMPS EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

Comme annoncé dans l'introduction, nous allons commencer par un rappel concernant quelques propriétés mathématiques des opérateurs antilinéaires, propriétés qui nous seront utiles dans la suite.

1. OPERATEURS ANTILINEAIRES

a) Définition

Un opérateur A est dit antilinéaire si, quels que soient les kets $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ de l'espace \mathcal{E} dans lequel il agit, et quelles que soient les constantes (complexes) λ et μ , on a :

$$A [\lambda |\phi_1\rangle + \mu |\phi_2\rangle] = \lambda^* A |\phi_1\rangle + \mu^* A |\phi_2\rangle \quad (\text{VIII-20})$$

En particulier, il découle de cette définition que :

$$A \lambda |\phi_1\rangle = \lambda^* A |\phi_1\rangle \quad (\text{VIII-21})$$

c'est-à-dire que le commutateur $[A, \lambda]$ n'est pas nul, sauf si λ est réel.

Exemple : Si A est antilinéaire et si $\{ |u_n\rangle \}$ est une base de l'espace des états, on a :

$$\begin{aligned} A|\phi\rangle &= A \left[\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \phi\rangle \right] \\ &= \sum_n \langle u_n| \phi\rangle^* A |u_n\rangle = \sum_n \langle \phi | u_n\rangle A |u_n\rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-22})$$

b) Somme et produit

On définit, comme pour des opérateurs linéaires, la somme $A_1 + A_2$ et le produit $A_1 A_2$ de deux opérateurs linéaires ou antilinéaires, par :

$$\begin{aligned} (A_1 + A_2)|\phi\rangle &= A_1|\phi\rangle + A_2|\phi\rangle \\ (A_1 A_2)|\phi\rangle &= A_1(A_2|\phi\rangle) \end{aligned} \quad (\text{VIII-23})$$

(associativité). Si A_1 et A_2 sont antilinéaires, le produit $A_1 A_2$ est linéaire (démonstration immédiate); si par contre, un seul des deux opérateurs A_1 et A_2 est antilinéaire, l'autre étant linéaire, le produit $A_1 A_2$ est antilinéaire.

c) Inverse

A et B sont par définition inverses l'un de l'autre si :

$$AB = BA = 1 \quad (\text{VIII-24})$$

(opérateur identité). Montrons que, si A est antilinéaire, il en est de même de B . En effet, si l'on pose :

$$\begin{cases} |\psi\rangle = B|\phi\rangle \\ |\phi\rangle = A|\psi\rangle \end{cases} \quad (\text{VIII-25})$$

on peut écrire :

$$\begin{aligned} \lambda B|\phi\rangle &= \lambda |\psi\rangle = BA \lambda |\psi\rangle \\ &= B [\lambda^* A|\psi\rangle] \end{aligned} \quad (\text{VIII-26.b})$$

c'est-à-dire :

$$\lambda B|\phi\rangle = B [\lambda^* |\phi\rangle] \quad (\text{VIII-26.b})$$

Exercice : Montrer que si l'on multiplie A par une constante λ complexe, il faut diviser l'inverse B de A par λ^* .

d) Action d'un opérateur antilinéaire sur un bra

Si A est un opérateur antilinéaire, le produit scalaire du ket $A|\phi\rangle$ par le bra $|\psi\rangle$:

$$\langle \chi | (A|\phi\rangle)$$

est une fonctionnelle antilinéaire de $|\phi\rangle$ (cf. (VIII-20)). Donc, le nombre complexe conjugué :

$$\left[\langle \chi | (A|\phi\rangle) \right]^*$$

est une fonctionnelle linéaire de $|\phi\rangle$, quel que soit $|\phi\rangle$; nous pourrions donc l'écrire :

$$\langle \chi' | \phi \rangle$$

où $\langle \chi' |$ est un bra (espace dual de l'espace \mathcal{E}). Nous introduisons alors la notation :

$$\langle \chi' | = \langle \chi | A \tag{VIII-27}$$

qui est la définition de l'action de A sur un bra; de façon plus explicite, on peut écrire :

$$\langle \chi' | = (\langle \chi | A) \tag{VIII-28}$$

pour insister sur le fait que A agit sur le bra qui le précède. Nous avons donc posé :

$$\boxed{(\langle \chi | A) |\phi\rangle = \left[\langle \chi | (A|\phi\rangle) \right]^*} \tag{VIII-29}$$

Nous voyons donc que, pour des opérateurs antilinéaires, il est indispensable de préciser (par des parenthèses par exemple) si leur action s'exerce sur le ket qui les suit ou le bra qui les précède; les expressions obtenues dans les deux cas sont en effet complexes conjuguées.

Exemple : si A_1 et A_2 sont antilinéaires, leur produit A_1A_2 est linéaire et :

$$\begin{aligned} \langle \chi | (A_1A_2 | \phi \rangle) &= \langle \chi | (A_1A_2) | \phi \rangle \\ &= \left[\langle \chi | A_1 \rangle (A_2 | \phi \rangle) \right]^* = \langle \chi | A_1A_2 \rangle | \phi \rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-30})$$

e) Opérateur adjoint

La définition de l'opérateur adjoint A^\dagger d'un opérateur antilinéaire A est la même que pour un opérateur linéaire :

$$\langle \chi' | = \langle \chi | A \iff | \chi' \rangle = A^\dagger | \chi \rangle \quad \forall | \chi \rangle \quad (\text{VIII-31})$$

On a donc :

$$\begin{aligned} \langle \chi' | \phi \rangle &= \langle \chi | A | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \chi' \rangle^* = \left[\langle \phi | (A^\dagger | \chi \rangle) \right]^* \end{aligned} \quad (\text{VIII-32})$$

c'est-à-dire :

$$\boxed{\langle \chi | (A | \phi \rangle) = \langle \phi | (A^\dagger | \chi \rangle)} \quad (\text{VIII-33})$$

Cette égalité peut servir de définition de l'opérateur adjoint d'un opérateur antilinéaire, même si l'on n'a pas introduit son action sur un bra.

Remarques :

(i) Pour un opérateur linéaire A , les deux membres de (VIII-33) seraient complexes conjugués.

(ii) Si A est antilinéaire, A^\dagger l'est également, comme on peut voir directement sur (VIII-33).

(iii) Remplaçons A par A^\dagger dans (VIII-33); il vient :

$$\langle \chi | (A^\dagger | \phi \rangle) = \langle \phi | (A^{\dagger\dagger} | \chi \rangle) \quad (\text{VIII-34})$$

Comme

$$\langle \chi | (A^\dagger | \phi \rangle) = \langle \phi | (A | \chi \rangle) \quad (\text{VIII-35})$$

on voit que

$$A^{\dagger\dagger} = A \quad (\text{VIII-36})$$

(iv) Si A est antilinéaire et B linéaire :

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (\text{VIII-37})$$

En effet, si l'on pose :

$$|\phi' \rangle = B|\phi \rangle \quad (\text{VIII-38})$$

on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle \phi | \left[(AB)^\dagger | \chi \rangle \right] &= \langle \chi | \left[AB | \phi \rangle \right] \\ &= \langle \chi | \left[A | \phi' \rangle \right] \\ &= \langle \phi' | \left[A^\dagger | \chi \rangle \right] \\ &= \left[\langle \phi | B^\dagger \right] \left[A^\dagger | \chi \rangle \right] \\ &= \langle \phi | \left[B^\dagger A^\dagger | \chi \rangle \right] \end{aligned}$$

Exercice : Montrer de même que :

$$(BA)^\dagger = A^\dagger B^\dagger \quad (\text{VIII-39})$$

Vérifier que (VIII-37) et (VIII-39) restent encore valables si A et B sont tous deux antilinéaires.

f) Opérateurs antiunitaires

Par définition, un opérateur antiunitaire est un opérateur antilinéaire tel que :

$$A^\dagger = A^{-1} \quad (\text{VIII-40.a})$$

c'est-à-dire :

$$AA^\dagger = A^\dagger A = 1 \quad (\text{VIII-40.b})$$

A tout opérateur A de ce type, on peut associer une transformation antiunitaire qui change tout ket $|\phi\rangle$ en $|\bar{\phi}\rangle$, bra $\langle\phi|$ en $\langle\bar{\phi}|$, opérateur B en \bar{B} tel que :

$$\begin{aligned} |\bar{\phi}\rangle &= A|\phi\rangle \\ \langle\bar{\phi}| &= \langle\phi|A^\dagger \\ \bar{B} &= A B A^\dagger \end{aligned} \tag{VIII-41}$$

Le tableau suivant résume les effets d'une telle transformation :

λ (constante)	\Rightarrow	$\bar{\lambda} = A \lambda A^\dagger = \lambda^*$ (complexe conjuguée)
$\langle\phi \chi\rangle$ (produit scalaire)	\Rightarrow	$\langle\bar{\phi} \bar{\chi}\rangle = (\langle\phi A^\dagger)(A \chi\rangle)$ $= \left[\langle\phi (A^\dagger A) \chi\rangle \right]^*$ $= \langle\phi \chi\rangle^*$ (complexe conjugué)
B (opérateur linéaire)	\Rightarrow	$\bar{B} = A B A^\dagger$ (également linéaire)
$\langle\phi B \chi\rangle$ (élément de matrice)	\Rightarrow	$\langle\bar{\phi} \bar{B} \bar{\chi}\rangle$ $= (\langle\phi A^\dagger) A B A^\dagger A \chi\rangle$ $= \left[\langle\phi (A^\dagger A B) \chi\rangle \right]^*$ $= \langle\phi B \chi\rangle^*$ (complexe conjugué)
$B \phi\rangle = \lambda \phi\rangle$ (vecteur propre)	\Rightarrow	$\bar{B} \bar{\phi}\rangle = A B A^\dagger A \phi\rangle$ $= A\lambda \phi\rangle$ $= \lambda^* \bar{\phi}\rangle$ (même vecteur propre, valeur propre complexe conjuguée)

Si B est une observable (valeurs propres réelles), son spectre est inchangé dans la transformation antiunitaire

BC (produit d'opérateurs)	\Rightarrow	$\overline{BC} = A B C A^\dagger$ $= A B A^\dagger A C A^\dagger$ $= \bar{B} \bar{C}$
$[X, P] = i\hbar$	\Rightarrow	$[\bar{X}, \bar{P}] = -i\hbar$
$[J_x, J_y] = i\hbar J_z$	\Rightarrow	$[\bar{J}_x, \bar{J}_y] = -i\hbar J_z$

g) Exemple : opérateur de conjugaison complexe $K_{\{u\}}$ attaché à la représentation $\{ |u_n\rangle \}$

Soit $\{ |u_n\rangle \}$ un ensemble de vecteurs orthonormés constituant une base de l'espace des états \mathcal{E} . Tout ket $|\phi\rangle$ veut être décomposé sur les $\{ |u_n\rangle \}$:

$$|\phi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \quad (\text{VIII-42})$$

On peut définir l'action de l'opérateur $K_{\{u\}}$ par :

$$|\bar{\phi}\rangle = K_{\{u\}}|\phi\rangle = \sum_n c_n^* |u_n\rangle \quad (\text{VIII-43})$$

En développant $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ sur la base $\{ |u_n\rangle \}$, on vérifie facilement que $K_{\{u\}}$ satisfait à (VIII-20), ce qui indique que c'est un opérateur antiunitaire. Nous l'appellerons "opérateur de conjugaison complexe en base $\{ |u_n\rangle \}$ ". Calculons l'adjoint de $K_{\{u\}}$; d'après la définition (VIII-33), il vient :

$$\langle u_n | (K_{\{u\}} |u_p\rangle) = \delta_{np} = \langle u_n | (K_{\{u\}}^\dagger |u_n\rangle) \quad (\text{VIII-44})$$

Comme $\delta_{np} = \delta_{pn}$, on a simplement :

$$K_{\{u\}} = K_{\{u\}}^\dagger \quad (\text{VIII-45})$$

D'autre part, on vérifie immédiatement en utilisant (VIII-43) que :

$$(K_{\{u\}})^2 = \mathbb{1} \quad (\text{VIII-46})$$

On a donc :

$$K_{\{u\}} = K_{\{u\}}^{-1} = K_{\{u\}}^\dagger \quad (\text{VIII-47})$$

et $K_{\{u\}}$ est un opérateur antiunitaire. Sous l'action de $K_{\{u\}}$, les composantes (ou la fonction d'onde) de tout ket $|\phi\rangle$ sont changées en leurs complexes conjuguées. Qu'en est-il des éléments de matrice ? Nous avons vu plus haut que

$$\langle \bar{u}_n | \bar{B} | \bar{u}_p \rangle = \langle u_n | B | u_p \rangle^* \quad (\text{VIII-48})$$

Comme $|\bar{u}_n\rangle = |u_n\rangle$ et $|\bar{u}_p\rangle = |u_p\rangle$, on a simplement :

$$\begin{aligned} \bar{B}_{np} &= \langle u_n | \bar{B} | u_p \rangle = \langle u_n | B | u_p \rangle^* \\ &= B_{np}^* \end{aligned} \quad (\text{VIII-49})$$

Remarques :

(i) Dans une base autre que $\{ |u_n\rangle \}$, l'action de $K_{\{u\}}$ peut être plus compliquée qu'une simple conjugaison complexe des composantes. En effet, si $\{ |v_p\rangle \}$ désigne une autre base, on a :

$$\begin{aligned} K_{\{u\}} \sum_p \gamma_p |v_p\rangle &= K_{\{u\}} \sum_{pn} \gamma_p \langle u_n | v_p \rangle |u_n\rangle \\ &= \sum_{pn} \gamma_p^* \langle u_n | v_p \rangle^* |u_n\rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-50})$$

S'il se trouve que $\langle u_n | v_p \rangle$ est réel, quels que soient n et p (changement de base réel), il apparaît dans le second membre de cette égalité une relation de fermeture :

$$\begin{aligned} \sum_{pn} \gamma_p^* |u_n\rangle \langle u_n | v_p \rangle \\ = \sum_p \gamma_p^* |v_p\rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-51})$$

et $K_{\{u\}}$ est simplement l'opérateur de conjugaison complexe en base $|v_p\rangle$. Cependant, en général, $\langle u_n | v_p \rangle$ n'est pas réel et cette simplification ne se produit pas.

(ii) Tout opérateur antilinéaire A peut s'écrire :

$$\begin{aligned} A &= A K_{\{u\}}^2 = (A K_{\{u\}}) A \\ &= K_{\{u\}}^2 A = K_{\{u\}} (K_{\{u\}} A) \end{aligned} \quad (\text{VIII-52})$$

Tout opérateur antilinéaire (antiunitaire) peut donc être mis sous la forme d'un produit d'un opérateur de conjugaison complexe par un opérateur linéaire (unitaire) : on vérifie aisément que, si A est unitaire, le produit $AK_{\{u\}}$ l'est aussi.

Exemple : Opérateur de conjugaison complexe $K_{\{\vec{r}\}}$ en représentation $\{ |\vec{r}\rangle \}$ et $K_{\{\vec{p}\}}$ en représentation $\{ |\vec{p}\rangle \}$ (cas d'une particule unique sans spin) .

• Posons :

$$|\hat{\psi}\rangle = K_{\{\vec{r}\}} |\psi\rangle \quad (\text{VIII-53})$$

alors :

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \hat{\psi} \rangle = \psi^*(\vec{r}) \quad (\text{VIII-54})$$

D'autre part :

$$\begin{aligned} \hat{\vec{R}} &= K_{\{\vec{r}\}} \vec{R} K_{\{\vec{r}\}} = \vec{R} \\ \hat{\vec{P}} &= K_{\{\vec{r}\}} \vec{P} K_{\{\vec{r}\}} = -\vec{P} \end{aligned} \tag{VIII-55}$$

(les éléments de matrice de \vec{R} en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ sont réels; ceux de \vec{P} , qui agit dans cette représentation comme $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$, sont imaginaires purs).

De même :

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}} &= K_{\{\vec{r}\}} \vec{L} K_{\{\vec{r}\}} = K_{\{\vec{r}\}} (\vec{R} \times \vec{P}) K_{\{\vec{r}\}} \\ &= -\vec{L} \end{aligned} \tag{VIII-56}$$

On voit facilement que :

$$\begin{aligned} [\vec{R}, K_{\{\vec{r}\}}] &= 0 \\ [\vec{P}, K_{\{\vec{r}\}}]_+ &= [\vec{L}, K_{\{\vec{r}\}}]_+ = 0 \end{aligned} \tag{VIII-57}$$

où $[B, C]_+$ désigne l'anticommutateur $BC + CB$.

• Si maintenant

$$|\tilde{\psi}\rangle = K_{\{\vec{p}\}} |\psi\rangle \tag{VIII-58}$$

on a :

$$\tilde{\psi}_p(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \tilde{\psi} \rangle = \psi_p^*(\vec{p}) \tag{VIII-59}$$

Comme d'autre part :

$$\psi(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3p e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \psi_p(\vec{p}) \tag{VIII-60}$$

on voit que :

$$\tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi^*(-\vec{r}) \tag{VIII-61}$$

qui diffère donc de (VIII-54) (c'était prévisible puisque le changement de base $\{|\vec{r}\rangle\} \Rightarrow \{|p\rangle\}$ n'est pas réel). On montre aisément que :

$$[\vec{R}, K_{\{p\}}]_+ = [\vec{L}, K_{\{p\}}]_+ = 0 \tag{VIII-62}$$

et :

$$[\vec{P}, K_{\{p\}}] = 0 \tag{VIII-63}$$

2. CONDITIONS IMPOSEES A L'OPERATEUR RENVERSEMENT DU TEMPS

Jusqu'ici, aux transformations considérées (translations, rotations, parité, changement de repère galiléen), nous avons associé des opérateurs unitaires agissant dans l'espace des états & du système physique étudié. Les relations de commutation entre ces opérateurs unitaires que nous avons imposées ont été obtenues à partir de relations de commutation entre transformations linéaires agissant sur des coordonnées d'espace temps x, y, z, t (éventuellement, augmentées d'une coordonnée homogène $u = 1$). Pour le renversement du temps, nous allons tenter de procéder de la même façon; cependant, nous aboutirons à des difficultés qui nous conduiront à renoncer à imposer l'unitarité de l'opérateur renversement du temps. Nous verrons par contre qu'un opérateur antiunitaire peut parfaitement convenir dans ce cas.

Supposons donc pour commencer que nous cherchions un opérateur unitaire T dont l'action dans l'espace des états produise en mécanique quantique l'opérateur \mathcal{C} schématisé sur la fig. VIII.2 (renversement des vitesses sans modification des positions des particules). Quelles sont les relations de commutation entre T et les opérateurs de translation et de rotation agissant dans l'espace des états ? On s'attend à ce que T , qui concerne le sens dans lequel s'écoule le temps, commute avec toutes les transformations d'espace pur.

On peut utiliser un raisonnement du même type que celui du § C-1 du chapitre III pour le montrer de façon précise. Pour cela, on décrit une particule par ses 4 coordonnées d'espace-temps (x, y, z et t), les 3 composantes de la vitesse (\dot{x}, \dot{y} et \dot{z}) et une coordonnée homogène $u = 1$ (*). Les diverses opérations de translation, rotation, changement de repère galiléen, etc... sont alors décrites par des matrices 8×8 (et non 5×5 comme au chapitre I). Par exemple, la matrice associée à une rotation comprendra deux blocs identiques 3×3 (matrices de rotation ordinaire) assurant respectivement la rotation des positions et des vitesses, plus deux éléments diagonaux égaux à un (ni t ni u ne changent).

(*) La donnée du vecteur d'état quantique $|\psi\rangle$ d'un système correspond, en mécanique classique, à celle des positions q_i et de leurs moments conjugués p_i (qui sont liés aux vitesses \dot{q}_i). Il n'est donc pas étonnant que, dans l'étude des opérateurs agissant sur $|\psi\rangle$ associés à certaines transformations comme le renversement du temps, il faille tenir compte de la modification correspondante des vitesses classiques \dot{x}, \dot{y} et \dot{z} .

Pour le renversement du temps, la matrice sera diagonale; les 4 éléments diagonaux associés à x, y, z et u vaudront $+1$, ceux associés à $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ et t vaudront -1 . Il est alors clair que les matrices 8×8 de rotation commutent toutes avec celle associée au renversement du temps. Le résultat sera le même si l'on prend une translation au lieu d'une rotation : la matrice correspondante couple x, y, z et u [cf. (III-98)], mais celle associée à \mathcal{C} est l'identité dans l'espace correspondant.

La situation sera cependant moins simple si l'on considère un changement de repère galiléen, qui "mélange" entre elles les variables x, y, z et t d'espace et de temps associées à des signes différents des éléments diagonaux de la matrice de \mathcal{C} . La commutation des matrices 8×8 n'est pas évidente et, en fait, un calcul explicite montre qu'elles ne commutent pas, mais anticommutent. De même, une translation dans le temps (qui "mélange" t et u) conduit à une matrice qui ne commute pas, mais anticommutent avec celle de \mathcal{C} . On peut retrouver ce dernier résultat de façon très simple en remarquant qu'une translation infinitésimale de temps est associée à l'opérateur différentiel $\partial/\partial t$. Comme :

$$\frac{\partial}{\partial t} [f(-t)] = - \frac{\partial f}{\partial t} (-t) \quad (\text{VIII-64.a})$$

on a :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \times (\text{inversion du temps}) \\ & + (\text{inversion du temps}) \times \frac{\partial}{\partial t} = 0 \end{aligned} \quad (\text{VIII-64.b})$$

Exercice : Généraliser les calculs du § C-1 du chapitre III en écrivant des matrices 8×8 pour tenir compte des modifications de \vec{r}, \vec{v} et t dans les transformations considérées. Donner les matrices associées aux générateurs infinitésimaux de translation de temps et d'espace, de rotation et de changement de repère galiléen. Vérifier que les relations de commutation obtenues au chapitre III entre ces générateurs infinitésimaux sont toujours valables. Calculer les relations de commutation de la matrice 8×8 associée au renversement du temps (on vérifiera qu'elle commute avec rotation et translation d'espace, mais anticommutent avec les générateurs de translation dans le temps ou de changement de repère galiléen).

Pour une particule sans spin, la commutation de l'opération de renversement du temps avec les rotations et translations d'espace conduit donc à annuler (toujours en supposant T unitaire) les commutateurs :

$$\begin{aligned} [T, \vec{L}] \\ [T, \vec{P}] \end{aligned} \tag{VIII-65}$$

(alors que pour H et \vec{K} , le raisonnement précédent conduirait plutôt à annuler anticommutateurs). Mais si l'on admet la nullité de ces commutateurs, on voit facilement qu'aucun opérateur T satisfaisant physiquement n'existe. En effet, si T commute avec P_x, P_y, P_z , et si $|\vec{p}\rangle$ désigne un vecteur propre commun de ces trois opérateurs de valeurs propres p_x, p_y, p_z (composantes de \vec{p}), la nullité du commutateur $[T, \vec{P}]$ et l'unitarité de T entraîneraient que $T|\vec{p}\rangle$ serait égal à $e^{i\alpha}|\vec{p}\rangle$. Cette égalité est cependant inacceptable physiquement : elle exprimerait que l'impulsion d'une particule libre n'est pas changée par renversement du temps (alors qu'elle doit évidemment être changée en son opposée).

Pour une particule de spin non nul, la même difficulté se présente. Si l'on considère la base $\{|\vec{p}, \mu\rangle\}$ des kets propres communs à \vec{P} et S_z , la nullité des commutateurs de T avec \vec{J} et \vec{P} entraînerait que T serait diagonal dans cette base. Or, nous désirons un opérateur T qui renverse le signe de \vec{p} et μ simultanément.

Un opérateur linéaire est donc à éliminer pour T. Cherchons donc si un opérateur antilinéaire, autorisé a priori par le théorème de Wigner (chap. IV § B) peut convenir. Comment se traduisent, dans l'espace des états, les relations de commutation entre opérations de symétrie dans l'espace habituel, lorsque \mathcal{O} est associé à un opérateur T antilinéaire ? Nous voulons exprimer qu'il revient au même d'effectuer une opération de translation (par exemple) après celle de renversement du temps, ou les deux mêmes opérations dans l'ordre inverse. Nous poserons donc :

$$T e^{-i\vec{a}\cdot\vec{P}/\hbar} = e^{-i\vec{a}\cdot\vec{P}/\hbar} T \tag{VIII-66}$$

(où \vec{a} est un vecteur quelconque). Si \vec{a} est un vecteur infinitésimal $\delta\vec{a}$, l'égalité précédente donne, au premier ordre en $\delta\vec{a}$:

$$T (1 - i \delta\vec{a}\cdot\vec{P}/\hbar) = (1 - i \delta\vec{a}\cdot\vec{P}/\hbar) T \tag{VIII-67}$$

ou encore, puisque T est antilinéaire (et $\delta\vec{a}$ réel) :

$$i \delta\vec{a} \cdot (\vec{T}\vec{P}) = -i \delta\vec{a} \cdot \vec{P}\vec{T} \quad (\text{VIII-68})$$

Comme $\delta\vec{a}$ est quelconque, nous devons donc avoir :

$$[\vec{T}, \vec{P}]_+ = 0 \quad (\text{VIII-69})$$

où $[A, B]_+$ désigne l'anticommutateur :

$$[A, B]_+ = AB + BA \quad (\text{VIII-70})$$

La condition (VIII-69) peut être écrite sous la forme :

$$\vec{T}\vec{P} = -\vec{P}\vec{T} \quad (\text{VIII-71})$$

(il faut introduire un signe moins chaque fois que l'on commute T et \vec{P}), ou encore ^(*) :

$$[\vec{T}, i\vec{P}] = 0 \quad (\text{VIII-72})$$

Ces diverses formes de (VIII-69) sont donc vérifiées si la relation de commutation (VIII-66) est satisfaite pour toute valeur de \vec{a} . Réciproquement, elles entraînent (VIII-66), comme on peut facilement le vérifier en développant l'exponentielle :

$$e^{-i\vec{a} \cdot \vec{P}/\hbar} = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\vec{a} \cdot \vec{P}}{\hbar} \right)^n \quad (\text{VIII-73})$$

Donc, grâce à la présence du i dans (VIII-66), c'est l'anticommutateur de \vec{P} avec T (et non son commutateur) qui doit être nul, si T est antiunitaire. Il est clair que le même raisonnement s'applique à \vec{J} et conduit à :

$$[\vec{T}, \vec{J}]_+ = 0 \quad (\text{VIII-74})$$

(\vec{J} peut être remplacé par \vec{L} lorsque le système étudié est constitué d'une particule sans spin). Nous allons voir dans le paragraphe C suivant qu'il est effectivement possible de trouver un opérateur T, satisfaisant physiquement, qui véri-

(*) L'égalité (VIII-71) et la relation (VIII-21) valable pour un opérateur antilinéaire entraînent :

$$T(i\vec{P}) = -iT\vec{P} = +i\vec{P}T$$

et donc (VIII-72).

fié les relations d'anticommuation obtenues.

Remarque : nous avons noté plus haut que les opérations de renversement du temps et de translation dans le temps (ou de changement de repère galiléen) anticommuent. Nous nous attendons donc à ce que :

$$[T, H] = 0 \quad (\text{VIII-75})$$

puisque l'antiunitarité de T reverse les rôles des commutateurs et anticommuteurs. Nous verrons effectivement que, pour un système conservatif dont l'évolution est invariante par renversement du temps, cette relation est vérifiée.

C. FORME EXPLICITE DE L'OPÉRATEUR RENVERSEMENT DU TEMPS

1. PARTICULE SANS SPIN

Nous avons déjà vu en (VIII-55) et (VIII-56) que $K_{\{\vec{r}\}}$, opérateur de conjugaison complexe dans la base $\{ |\vec{r}\rangle \}$, satisfait exactement aux relations de commutation requises. Nous poserons donc, dans ce cas :

$$T = K_{\{\vec{r}\}} \quad (\text{VIII-76})$$

Par suite, si $|\psi\rangle$ est le vecteur d'état de la particule, $\psi(\vec{r})$ sa fonction d'onde :

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \quad (\text{VIII-77})$$

on obtient aisément la fonction d'onde associée à l'état ayant subi le renversement du temps :

$$\langle \vec{r} | T | \psi \rangle = \psi^*(\vec{r}) \quad (\text{VIII-78})$$

En ce qui concerne la fonction d'onde en représentation \vec{p} :

$$\psi_p(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle \quad (\text{VIII-79})$$

elle devient :

$$\langle \vec{p} | T | \psi \rangle = \psi_p^*(-\vec{p}) \quad (\text{VIII-80})$$

Remarque : nous avons supposé implicitement que la particule considérée n'est pas soumise à l'action d'un potentiel vecteur (puisque nous avons admis que vitesse et impulsion de la particule sont proportionnelles). On pourrait reprendre ici une discussion analogue à celle du § C.d du chapitre V. Il n'existe pas en général d'opérateur agissant dans l'espace des états qui, à lui

seul (sans modifier le potentiel vecteur appliqué \vec{A}) traduit l'opération de renversement du temps. Par contre, si l'on applique simultanément $K_{\{\vec{r}\}}$ et une transformation

$$\vec{A}(\vec{r}; t) \rightarrow -\vec{A}(\vec{r}; -t) \quad (\text{VIII-81})$$

on obtient effectivement un renversement du temps [cf. égalités (VIII-19-a) et (VIII-19.b)]. Dans le cas par exemple où \vec{A} est indépendant du temps, ceci correspond bien au changement de \vec{B} en $-\vec{B}$ discuté dans la remarque (ii) du § A.

2. PARTICULE DE SPIN 1/2

Aux relations de commutation avec T de \vec{R} , \vec{P} et \vec{L} pour la particule libre, nous devons maintenant ajouter pour l'opérateur de spin \vec{S} :

$$T \vec{S} T = -\vec{S} \quad (\text{VIII-82})$$

Cette égalité assure que \vec{S} , comme \vec{L} , change de signe dans l'opération de renversement du temps; surtout, compte tenu de l'anticommuation de T et \vec{L} , elle entraîne que l'égalité fondamentale (VIII-74) est bien satisfaite.

Posons alors :

$$T = B K_{\{\vec{r}, \mu\}} \quad (\text{VIII-83})$$

où B est un opérateur (unitaire) à déterminer et $K_{\{\vec{r}, \mu\}}$ l'opérateur (anti-unitaire) de conjugaison complexe dans la base $\{ |\vec{r}, \mu\rangle \}$ des kets propres communs à \vec{R} et S_z . Pour les mêmes raisons que plus haut (réalité des éléments de matrice de \vec{R} dans la base considérée, caractère imaginaire pur de ceux de \vec{P}) :

$$\begin{aligned} K_{\{\vec{r}, \mu\}} \vec{R} K_{\{\vec{r}, \mu\}} &= \vec{R} \\ K_{\{\vec{r}, \mu\}} \vec{P} K_{\{\vec{r}, \mu\}} &= -\vec{P} \end{aligned} \quad (\text{VIII-84.a})$$

et donc :

$$\begin{aligned} &K_{\{\vec{r}, \mu\}} \vec{L} K_{\{\vec{r}, \mu\}} \\ = &K_{\{\vec{r}, \mu\}} (\vec{R} \times \vec{P}) K_{\{\vec{r}, \mu\}} = -\vec{L} \end{aligned} \quad (\text{VIII-84.b})$$

L'opérateur T doit anticommuer avec \vec{P} de sorte que :

$$B K_{\{\vec{r}, \mu\}} \vec{P} K_{\{\vec{r}, \mu\}} B^\dagger = -\vec{P} \quad (\text{VIII-85})$$

c'est-à-dire, compte tenu de (VIII-84) :

$$B \vec{P} B^\dagger = \vec{P} \quad (\text{VIII-86.a})$$

Il en découle que :

$$[B, \vec{P}] = 0 \quad (\text{VIII-86.b})$$

On verrait de même que B commute avec \vec{L} (et \vec{R}). Le fait que $K_{\{\vec{r}, \mu\}}$ ait déjà les relations de commutation requises avec les divers opérateurs orbitaux nous pousse donc à prendre pour B un opérateur sans action dans l'espace des états orbital, c'est-à-dire un opérateur de spin pur.

Les éléments de matrice de σ_x et σ_z sont réels dans la base $\{ |\vec{r}, \mu\rangle \}$; en revanche, ceux de σ_y sont imaginaires purs [cf. expressions (III-71) des matrices de Pauli]. Donc :

$$\begin{aligned} K_{\{\vec{r}, \mu\}} S_x K_{\{\vec{r}, \mu\}} &= S_x \\ K_{\{\vec{r}, \mu\}} S_z K_{\{\vec{r}, \mu\}} &= S_z \end{aligned} \quad (\text{VIII-87.a})$$

tandis que :

$$K_{\{\vec{r}, S_z\}} S_y K_{\{\vec{r}, \mu\}} = -S_y \quad (\text{VIII-87.b})$$

Comme nous voulons que l'opérateur T renverse le signe des trois composantes de \vec{S} , il faut que l'opérateur de spin B assure le changement de signe de S_x et S_z sans affecter S_y . En d'autres termes, B doit commuter avec σ_y , anticommuter avec σ_x et σ_z . Il est bien connu que la matrice σ_y elle-même satisfait à ces conditions et on peut prendre pour B l'opérateur $\sigma_y = 2 S_y / \hbar$. On préfère cependant souvent prendre la matrice $-i\sigma_y$

$$-i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{VIII-88})$$

qui a l'avantage d'être réelle; c'est une matrice unitaire (comme σ_y), et l'on peut donc poser :

$$T = -i\sigma_y K_{\{\vec{r}, \mu\}} \quad (\text{VIII-89})$$

Exercice :

Soit
$$\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (\text{VIII-90.})$$

le spineur attaché à la particule. Montrer qu'après renversement du temps, ce spineur devient :

$$\begin{pmatrix} -\psi_-^*(\vec{r}) \\ \psi_+^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (\text{VIII-90.b})$$

3. PARTICULE DE SPIN QUELCONQUE

Le raisonnement est le même que dans le paragraphe précédent pour une particule de spin quelconque (on écrit les matrices donnant l'action de S_z , S_+ et S_- en base $\{ |\vec{r}, \mu \rangle \}$, et on vérifie que S_x et S_z ont les matrices réelles, S_y imaginaire pure).

Pour l'opérateur de spin B, il faut prendre un opérateur unitaire qui, par transformation, change le signe de S_x et S_z sans affecter celui de S_y . Il est clair que ceci correspond exactement à l'effet d'une rotation de π autour de l'axe Oy . On pose donc :

$$T = e^{-i\pi S_y/\hbar} K_{\{\vec{r}, \mu\}} \quad (\text{VIII-91})$$

Exercice :

Si l'état de la particule est :

$$|\psi \rangle = \sum_{\mu=-S}^S \psi_\mu(\vec{r}) |\vec{r}, \mu \rangle \quad (\text{VIII-92.a})$$

montrer que :

$$T|\psi \rangle = \sum_{\mu=-S}^{+S} (-1)^{S-\mu} \psi_\mu^*(\vec{r}) |\vec{r}, -\mu \rangle \quad (\text{VIII-92.b})$$

On pourra commencer par montrer que :

$$e^{-i\pi S_y/\hbar} |\mu \rangle = (-1)^{S-\mu} |-\mu \rangle \quad (\text{VIII-93})$$

et, pour cela, considérer que le spin S est obtenu par couplage de $2S$ spins $1/2$. Dans l'espace des états de chacun de ces spins, on a [cf. relation (III-75)] :

$$e^{-i\pi S_y/\hbar} = -i\sigma_y \quad (\text{VIII-94})$$

et donc :

$$\begin{aligned} e^{-i\pi S_y/\hbar} |+\rangle &= |-\rangle \\ e^{-i\pi S_y/\hbar} |-\rangle &= -|+\rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-95})$$

Remarques :

(i) La relation (VIII-94) montre que la formule générale est bien équivalente à (VIII-89) pour un spin $1/2$.

(ii) Calculons le carré T^2 de l'opérateur de renversement du temps. Nous obtenons :

$$T^2 = e^{-i\pi S_y/\hbar} K_{\{\vec{r}, \mu\}} e^{-i\pi S_y/\hbar} K_{\{\vec{r}, \mu\}} \quad (\text{VIII-96})$$

Comme l'opérateur antilinéaire $K_{\{\vec{r}, \mu\}}$ anticommute avec S_y [égalité (VIII-87.b)], il commute avec $-iS_y$ et donc avec l'opérateur de rotation $e^{-i\pi S_y/\hbar}$.

Par suite :

$$\begin{aligned} T^2 &= e^{-i\pi S_y/\hbar} e^{-i\pi S_y/\hbar} [K_{\{\vec{r}, \mu\}}]^2 \\ &= e^{-2i\pi S_y/\hbar} \end{aligned} \quad (\text{VIII-97})$$

Nous avons déjà discuté au chapitre VI la valeur d'un opérateur de rotation d'angle 2π (représentations vraies ou bivaluées) suivant que le spin est entier ou demi-entier). Donc :

$$T^2 = \begin{cases} 1 & \text{si } S \text{ est entier} \\ -1 & \text{si } S \text{ est demi-entier} \end{cases} \quad (\text{VIII-98.a})$$

Remarque : ces égalités sont équivalentes à :

$$T^\dagger = \begin{cases} T & \text{si } S \text{ est entier} \\ -T & \text{si } S \text{ est demi-entier} \end{cases} \quad (\text{VIII-98.b})$$

puisque T est unitaire, comme on peut le voir facilement en multipliant les égalités précédentes par T^\dagger . Dans tous les cas, les transformés d'une observable par T , $(T B T^\dagger)$, et par T^\dagger , $(T^\dagger B T)$, sont donc égaux.

4. SYSTEME DE PLUSIEURS PARTICULES

L'opérateur de renversement du temps T associé à un système de plusieurs particules numérotées 1, 2, ... N, est le produit des opérateurs T associés séparément à chaque particule :

$$T = T^{(1)} T^{(2)} T^{(3)} \dots T^{(N)} \tag{VIII-99}$$

Pour un ensemble comprenant N fermions (de spin demi-entier) :

$$T^2 = 1 \text{ si } N \text{ est pair}$$

$$T^2 = -1 \text{ si } N \text{ est impair} \tag{VIII-100}$$

D. APPLICATIONS

1. INVARIANCE PAR RENVERSEMENT DU SENS DU TEMPS DE L'EVOLUTION DU SYSTEME

a) Généralités

Reprenons le schéma de la figure VIII.2 qui symbolise la condition que doivent satisfaire les équations du mouvement pour que le renversement du temps soit opération de symétrie. En mécanique quantique, ce schéma peut être représenté comme sur la figure VIII.5 où apparaissent explicitement deux opérateurs d'évolution U . Rappelons que ce dernier est défini en fonction de l'hamiltonien $H(t)$ du système par :

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \\ U(t_0, t_0) = \mathbb{1} \end{array} \right. \tag{VIII-101}$$

et que : $U^{-1}(t, t') = U^\dagger(t, t') = U(t', t)$ (VIII-102)

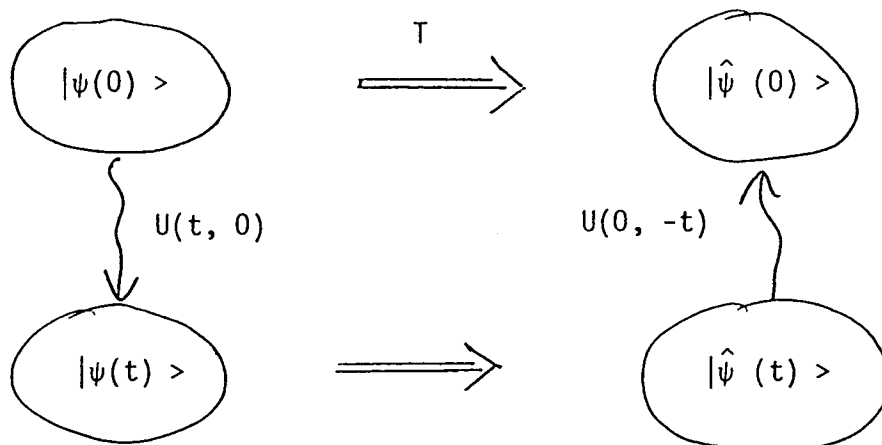


Fig. VIII.5

On pose :

$$\begin{aligned} |\hat{\psi}(0)\rangle &= T|\psi(0)\rangle \\ |\hat{\psi}(t)\rangle &= T|\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-103})$$

Le renversement du temps est opérateur de symétrie si $|\hat{\psi}(t)\rangle$ peut être considéré comme le vecteur d'état à l'instant $-t$ d'un système physique évoluant suivant les mêmes lois que le système initial. En termes d'opérateurs, cette condition s'écrit (*) :

$$U(0, -t) T U(t, 0) |\psi(0)\rangle = T |\psi(0)\rangle \quad (\text{VIII-104})$$

ou encore, puisque $|\psi(0)\rangle$ est quelconque :

$$\boxed{T U(t, 0) = U(-t, 0) T} \quad (\text{VIII-105-a})$$

Nous pouvons transformer cette égalité pour la rendre plus symétrique ; multiplions la à gauche, ou à droite, par T^\dagger

$$U(t, 0) = T^\dagger U(-t, 0) T \quad (\text{VIII-105-b})$$

$$U(-t, 0) = T U(t, 0) T^\dagger \quad (\text{VIII-105-c})$$

Ecrivons la relation inverse (ou hermitique conjuguée) de (VIII-105-b) :

$$U(0, t) = T^\dagger U(-t, 0) T \quad (\text{VIII-105-d})$$

ou encore, en multipliant à gauche et à droite par $T T^\dagger$ et utilisant le fait que $T^2 = T^{\dagger 2} = \pm 1$ [relation (VIII-100)] :

$$U(0, t) = T U(-t, 0) T^\dagger \quad (\text{VIII-105-e})$$

(*) On peut examiner ce qui se produit si la condition (VIII-104) est remplacée par la condition moins forte :

$$U(0, -t) T U(t, 0) |\psi(0)\rangle = e^{i\alpha(t)} T |\psi(0)\rangle$$

Un raisonnement semblable à celui fait dans la remarque du § C.2 du chp. I permet de voir que $\alpha(t)$ ne peut dépendre de $|\psi(0)\rangle$. On a donc :

$$T U(t, 0) = e^{i\alpha(t)} U(-t, 0) T$$

Mais il faut prendre garde au fait que $e^{i\alpha(t)}$ ne commute pas avec T ; les égalités (VIII-105-b et c) deviennent donc :

$$\begin{aligned} U(t, 0) &= e^{-i\alpha(t)} T^\dagger U(-t, 0) T \\ e^{i\alpha(t)} U(-t, 0) &= T U(t, 0) T^\dagger \end{aligned}$$

Par conjugaison hermitique, la première de ces relations devient :

$$U(0, t) = e^{i\alpha(t)} T U(-t, 0) T^\dagger$$

et la généralisation de (VIII-105-e) est :

$$U(0, t) = e^{i\alpha(t)} T^\dagger U(-t, 0) T$$

Donc :

$$U(-t, 0) U(0, t) = e^{-i\alpha(t)} T U(t, 0) T^\dagger e^{i\alpha(t)} T^\dagger U(-t, 0) T$$

ce qui permet de retrouver la relation générale (VIII-106).

Multipliant membre à membre (VIII-105-c) par (VIII-105-e), nous obtenons :

$$U(-t, 0) U(0, t) = T U(t, 0) T^\dagger T U(-t, 0) T^\dagger$$

c'est-à-dire (**):

$$\boxed{U(-t, t) = T U(t, -t) T^\dagger} \quad (\text{VIII-106})$$

Un cas particulier important est celui d'un système physique conservatif (H ne dépend pas du temps t). Alors :

$$U(t, 0) = \exp \left\{ - iHt/\hbar \right\} = \sum_n \frac{1}{n!} \left(- \frac{iHt}{\hbar} \right)^n \quad (\text{VIII-107})$$

Comme U(t, t') ne dépend que de la différence (t-t'), (VIII-106) devient :

$$T U(t, 0) = U^\dagger(t, 0) T \quad (\text{VIII-108.a})$$

Cette égalité s'écrit aussi :

$$T \left\{ \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{iHt}{\hbar} \right)^n \right\} = \left\{ \sum_n \frac{1}{n!} \left(- \frac{iHt}{\hbar} \right)^n \right\} T \quad (\text{VIII-108.b})$$

Au premier ordre en t, elle implique :

$$T \left(\frac{iHt}{\hbar} \right) = \left(- \frac{iHt}{\hbar} \right) T \quad (\text{VIII-108.c})$$

c'est-à-dire, puisque T est antilinéaire :

$$\left(- \frac{it}{\hbar} \right) T H = \left(- \frac{it}{\hbar} \right) H T \quad (\text{VIII-109})$$

et donc :

$$\boxed{[T, H] = 0} \quad (\text{VIII-110})$$

Réciproquement, cette égalité entraîne bien (VIII-107), puisque :

$$T (iH) = (-iH) T \quad (\text{VIII-111})$$

(**) Autrement dit, si $|\psi(t)\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \text{ le ket } |\phi(t)\rangle = |\hat{\psi}(-t)\rangle = T |\psi(-t)\rangle$$

est solution de la même équation (autre mouvement possible avec le même hamiltonien, dépendant éventuellement du temps).

La condition (VIII-110) est donc celle qui assure l'invariance par renversement du sens du temps pour un système conservatif (système isolé par exemple). La comparaison avec (VIII-64) montre que, cette fois encore, le fait de prendre pour T un opérateur antilinéaire a interverti le rôle des commutateurs et anti-commutateurs.

Remarque :

Pour un système conservatif, l'équation de Schrödinger est :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (\text{VIII-112})$$

Si nous multiplions les deux membres par l'opérateur antilinéaire T, il vient (puisque T ne dépend pas explicitement du temps) :

$$\begin{aligned} T i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= -i\hbar \frac{d}{dt} T |\psi(t)\rangle \\ &= T H |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-113})$$

c'est-à-dire, compte tenu de (VIII-110) :

$$-i\hbar \frac{d}{dt} [T |\psi(t)\rangle] = H [T |\psi(t)\rangle] \quad (\text{VIII-114})$$

Cette équation aurait d'ailleurs pu être obtenue directement à partir du schéma de la figure VIII.5 [cf. note page 26]

Exemples : Particule sans spin. Pour une particule sans spin, $T = K_{\{\vec{r}\}}$, et l'hamiltonien s'écrit, en présence d'un potentiel scalaire $V(\vec{r})$ indépendant du temps :

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (\text{VIII-115})$$

Les relations (VIII-55) entraînent que :

$$\begin{aligned} \vec{p}^2 T &= -\vec{p} \cdot T \vec{p} = +T \vec{p}^2 \\ V(\vec{R}) T &= T V(\vec{R}) \end{aligned} \quad (\text{VIII-116})$$

et donc :

$$[T, H] = 0 \quad (\text{VIII-117})$$

Soit $\psi(\vec{r}; t)$ la fonction d'onde de la particule ^(*). Elle obéit à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}; t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}; t) \tag{VIII-118}$$

La fonction d'onde $\hat{\psi}(\vec{r}; t)$ associée à $|\hat{\psi}(t)\rangle = T |\psi(t)\rangle$ vaut :

$$\hat{\psi}(\vec{r}; t) = \psi^*(\vec{r}; t) \tag{VIII-119}$$

et l'équation (VIII-114) s'écrit :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}; t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi^*(\vec{r}; t) \tag{VIII-120.a}$$

qui est équivalente à :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}; -t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi^*(\vec{r}; -t) \tag{VIII-120.b}$$

On vérifie effectivement que ces deux équations découlent immédiatement de (VIII-118) (plus précisément de l'équation obtenue par conjugaison complexe).

Si maintenant la particule est chargée et soumise à l'action d'un potentiel vecteur $\vec{A}(r)$, l'hamiltonien devient :

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - q\vec{A}(\vec{R}) \right]^2 + V(\vec{R}) \tag{VIII-121}$$

et on voit facilement que le commutateur de H et T n'est plus nul à cause des termes linéaires en \vec{p} .

^(*) Un cas particulièrement simple est celui où :

$$\psi(\vec{r}; t) = e^{i \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t} ; \quad \omega = \hbar k^2 / 2m$$

qui correspond à une particule libre d'impulsion $\hbar \vec{k}$ parfaitement définie (nous ne nous préoccupons pas ici du fait qu'une telle onde plane n'est pas normalisable). Le ket $|\psi(t)\rangle$ est donné par :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t} |\vec{p} = \hbar \vec{k}\rangle$$

et :

$$\begin{aligned} T|\psi(t)\rangle &= T \left[e^{-i\omega t} |\vec{p} = \hbar \vec{k}\rangle \right] = e^{i\omega t} T |\vec{p} = \hbar \vec{k}\rangle \\ &= e^{i\omega t} |\vec{p} = -\hbar \vec{k}\rangle \end{aligned}$$

Donc :

$$\hat{\psi}(\vec{r}; t) = e^{i [\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}]}$$

(onde plane se propageant dans le même sens). Le mouvement obtenu par renversement du temps est celui qui, à l'instant t, a la fonction d'onde $\hat{\psi}(\vec{r}; -t)$; sa fonction d'onde est donc :

$$e^{-i [\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t]}$$

qui se propage bien dans la direction $-\hbar \vec{k}$.

b) Postulat de microréversibilité

On parle souvent de "postulat de microréversibilité en mécanique quantique" pour indiquer que, pour tout système physique isolé (donc conservatif), l'hamiltonien H doit commuter avec l'opérateur T de renversement du temps. En fait, il ne s'agit pas vraiment d'un postulat que l'on admet de façon générale en physique : si les interactions électromagnétiques et fortes sont invariantes par renversement du temps, on sait maintenant que ce n'est pas le cas pour les interactions faibles. Cependant, dans beaucoup de cas intéressants, on peut totalement négliger le rôle des interactions faibles et le "postulat" de microréversibilité peut être appliqué. Examinons alors une conséquence de l'équation (VIII-106). Celle-ci entraîne que, si $|\phi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sont des kets quelconques :

$$\begin{aligned} \langle \chi | U(t, 0) | \phi \rangle &= \langle \chi | \{ T^\dagger U^\dagger(t, 0) T \} | \phi \rangle \\ &= \left\{ \left(\langle \chi | T^\dagger \right) U^\dagger(t, 0) \left(T | \phi \rangle \right) \right\}^* \\ &= \left(\langle \phi | T^\dagger \right) U(t, 0) \left(T | \chi \rangle \right) \end{aligned} \tag{VIII-122}$$

Donc, si l'on pose :

$$\begin{aligned} |\hat{\phi}\rangle &= T |\phi\rangle \\ |\hat{\chi}\rangle &= T |\chi\rangle \end{aligned} \tag{VIII-123}$$

on obtient :

$$\boxed{\langle \chi | U(t, 0) | \phi \rangle = \langle \hat{\phi} | U(t, 0) | \hat{\chi} \rangle} \tag{VIII-124}$$

Considérons un système qui, à l'instant initial, est dans l'état $|\phi\rangle$, et évolue librement jusqu'à l'instant t; le membre de gauche de (VIII-124) donne l'amplitude (complexe) de probabilité de le trouver dans l'état $|\chi\rangle$ si une mesure est effectuée à cet instant. Quant au membre de droite, il concerne un système, initialement dans l'état $|\hat{\chi}\rangle$ qui évolue (avec les mêmes lois dynamiques) jusqu'à l'instant t. L'égalité (VIII-124) exprime que l'amplitude de probabilité de le trouver à l'instant t dans l'état $|\hat{\phi}\rangle$ est égale à l'amplitude de probabilité précédente (à condition que l'évolution du système soit invariante par renversement du sens du temps).

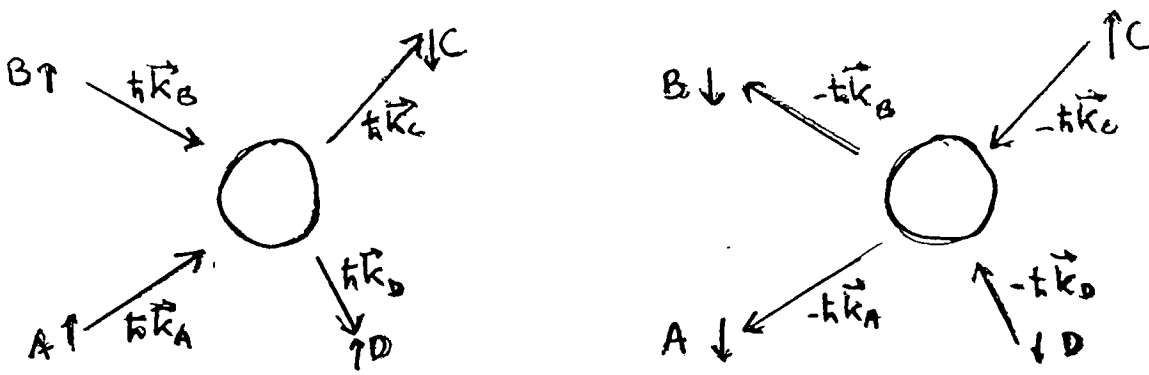


Fig. VIII.6

Prenons par exemple (cf fig. VIII.6) une collision entre deux particules A et B d'impulsions initiales $h\vec{k}_A$ et $h\vec{k}_B$, et de spins pointant tous deux dans la direction Oz. On peut chercher l'amplitude de probabilité de trouver, après collision, une particule d'impulsion $h\vec{k}_C$ et de spin de direction opposée à Oz, et une autre d'impulsion $h\vec{k}_D$ et de spin parallèle à Oz (*). Si les lois qui gouvernent la collision entre les particules sont invariantes par renversement du sens du temps, nous pouvons directement affirmer l'égalité de cette amplitude comme celle d'un autre processus (partie de droite de la figure VIII.6) : celui où les particules entrant dans la collision ont des impulsions $-h\vec{k}_C$ (et le spin vers le haut) et $-h\vec{k}_D$ (et le spin vers le bas) les particules sortantes des impulsions $-h\vec{k}_A$ (et le spin vers le bas) et $-h\vec{k}_B$ (et le spin également vers le bas).

Remarques :

(i) Ne pas oublier que le renversement du sens du temps inverse la direction des spins. Sinon, on s'expose à des erreurs (à moins que H et donc U n'agissent pas dans l'espace des états des spins, cas où ces derniers ne jouent pas de rôle dans la collision).

(ii) Dans un système physique macroscopique, l'invariance par renversement du sens du temps de tous les processus microscopiques n'exclut pas, à l'échelle macroscopique, une irréversibilité apparente (augmentation de l'entropie en mécanique statistique).

c) Théorème de Kramers

Nous avons déjà noté une certaine analogie entre l'opérateur S_0 de parité d'espace et celui de renversement du temps (parité de temps). Si l'hamiltonien H d'un système physique est invariant par parité :

$$[S_0, H] = 0 \tag{VIII-125}$$

(*)

La nature (et le nombre) des particules initiales et finales peut être différente (nous aurions pu prendre 3 particules finales par exemple) : collisions de réarrangement en physique atomique, collisions ionisantes, fusion ou fission en physique nucléaire, création de particules en physique des hautes énergies, etc...

et si $|\phi\rangle$ est un ket propre de H :

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (\text{VIII-126})$$

alors, deux possibilités existent :

- ou bien $|\phi\rangle$ est vecteur propre de S_0 , pair ($S_0|\phi\rangle = |\phi\rangle$) ou impair ($S_0|\phi\rangle = -|\phi\rangle$).
- ou bien $S_0|\phi\rangle$ est un autre vecteur propre de H de même valeur propre E ; cette dernière est donc dégénérée.

Que deviennent ces propriétés si l'on remplace S_0 par T ? Si

$$[T, H] = 0$$

et si :

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

alors :

$$H T|\phi\rangle = T H|\phi\rangle = E T|\phi\rangle \quad (\text{VIII-127})$$

(puisque E est réel). Donc :

$$|\hat{\phi}\rangle = T|\phi\rangle \quad (\text{VIII-128})$$

est vecteur propre de H avec la même valeur propre (comme pour la parité d'espace). Le problème est donc de savoir si $|\hat{\phi}\rangle$ est, ou non, colinéaire à $|\phi\rangle$; s'il ne l'est pas, la valeur propre E est nécessairement dégénérée.

Nous allons voir que si $T^2 = -1$ [nombre impair de fermions; cf. (VIII-100)], le produit scalaire $\langle \phi | \hat{\phi} \rangle$ est nul; par suite, $|\phi\rangle$ et $|\hat{\phi}\rangle$ ne sont pas proportionnels et E est dégénérée. En effet, l'égalité

$$T^2 = -1 \quad (\text{VIII-129})$$

entraîne, puisque T est antiunitaire ($T^\dagger T = \mathbf{1}$) :

$$-T^\dagger = T^\dagger T^2 = (T^\dagger T) T \quad (\text{VIII-130})$$

et donc :

$$T = -T^\dagger \quad (\text{VIII-131})$$

Par suite :

$$\begin{aligned}
 \langle \phi | \hat{\phi} \rangle &= \langle \hat{\phi} | \phi \rangle^* = \{ (\langle \phi | T^\dagger) | \phi \rangle \}^* \\
 &= \langle \phi | (T^\dagger | \phi \rangle) \\
 &= - \langle \phi | (T | \phi \rangle) \\
 &= - \langle \phi | \hat{\phi} \rangle
 \end{aligned}
 \tag{VIII-132}$$

qui entraîne que :

$$\langle \phi | \hat{\phi} \rangle = 0
 \tag{VIII-133}$$

Théorème de Kramers : Les niveaux d'énergie d'un système invariant par renversement du sens du temps sont tous dégénérés si le système comprend un nombre impair de spins demi-entiers.

Exemples :

(i) atome d'hydrogène (on ignore le spin du proton) : les valeurs du moment cinétique J de l'électron unique sont demi-entières ($J = \ell \pm 1/2$) et la dégénérescence $2J+1$ est paire. Aucun niveau n'est non-dégénéré. Par contre, l'application d'un champ magnétique (le système n'est plus invariant par renversement du sens du temps et le théorème de Kramers ne s'applique plus) lève cette dégénérescence par effet Zeeman.

(ii) Si l'on tient compte du spin du proton, on a un système contenant deux particules de spin $1/2$; effectivement, un niveau comme le sous-niveau hyperfin $F = 0$ du niveau fondamental est non-dégénéré.

On peut citer également le niveau fondamental 1S_0 de ^4He comme exemple d'un système non-dégénéré contenant un nombre pair de fermions.

(iii) Evidemment, les cas intéressants d'application du théorème de Kramers sont ceux où l'invariance par rotation ne permet pas de prévoir a priori la dégénérescence, comme c'était le cas dans les exemples précédents. Un exemple en est les ions dans les cristaux (centres colorés) qui sont soumis de la part de leur environnement à un potentiel électrostatique qui peut être de basse symétrie, et où le couplage spin-orbite peut jouer un rôle. On appelle ions Kramers ceux qui comprennent un nombre impair d'électrons; le théorème de Kramers indique que, si basse que soit la symétrie spatiale de l'environnement de ces ions, tous leurs niveaux restent au moins deux fois dégénérés.

Remarque : Si $T^2 = +1$ (nombre pair de fermions), le théorème de Kramers ne s'applique pas. Cependant, comme dans le cas de la parité d'espace, on peut tirer de l'invariance de H certaines conclusions :

- Si $|\hat{\phi}\rangle$ est proportionnel à $|\phi\rangle$, l'état stationnaire considéré est invariant par renversement du sens du temps (les vitesses des particules sont nulles en valeur moyenne en tout point, etc...). Exemple : état fondamental 1S_0 de ^4He .

- Si $|\hat{\phi}\rangle$ et $|\phi\rangle$ ne sont pas colinéaires, ils engendrent un sous-espace propre de H de dimension deux; l'énergie E est dégénérée. On remarque que :

$$\left\{ \begin{array}{l} T \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi\rangle + |\hat{\phi}\rangle) \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi\rangle + |\hat{\phi}\rangle) \\ T \left[\frac{i}{\sqrt{2}} (|\phi\rangle - |\hat{\phi}\rangle) \right] = \frac{i}{\sqrt{2}} (|\phi\rangle - |\hat{\phi}\rangle) \end{array} \right. \quad (\text{VIII-134})$$

Les deux états propres de H, $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi\rangle + |\hat{\phi}\rangle)$ et $\frac{i}{\sqrt{2}} (|\phi\rangle - |\hat{\phi}\rangle)$, sont donc tous deux invariants par renversement du temps.

Donc, dans tous les cas, on peut rechercher les états propres de H parmi des états invariants par renversement du sens du temps (états qui sont leurs propres "conjugués de Kramers").

Par exemple, si l'on étudie les états propres d'un ensemble de deux électrons placés dans un potentiel électrostatique réel, on peut se limiter à prendre des fonctions d'ondes réelles.

2. OBSERVABLES PAIRES ET IMPAIRES PAR RENVERSEMENT DU TEMPS

a) Définition, propriétés

La définition d'une observable paire ou impaire par renversement du temps est analogue à celle que l'on donne pour une observable paire ou impaire par parité (d'espace). Si G est une observable quelconque, sa transformée par renversement du temps est :

$$\hat{G} = T G T^\dagger \quad (\text{VIII-135})$$

$$\text{Si} \quad \hat{G} = \epsilon G \quad (\text{VIII-136})$$

et si $\epsilon = +1$, l'observable G est dite paire; par contre, si $\epsilon = -1$, elle est dite impaire.

Compte tenu de l'unitarité de T, (VIII-136) est équivalente à :

$$T G = \epsilon G T \quad (\text{VIII-137})$$

Une observable paire est donc une observable qui commute avec T, une observable impaire une observable qui anticommute avec T. Par exemple, l'hamiltonien d'un système conservatif invariant par renversement du temps est une observable paire d'après (VIII-110).

Soit $|\phi_g\rangle$ un vecteur propre, de valeur propre (réelle) a_g , de l'observable G, dont la parité est ϵ :

$$G |\phi_g\rangle = a_g |\phi_g\rangle \quad (\text{VIII-138})$$

Alors, le ket $|\hat{\phi}_g\rangle = T |\phi_g\rangle$ est vecteur propre de G avec la valeur propre ϵa_g . En effet :

$$\begin{aligned} G |\hat{\phi}_g\rangle &= G T |\phi_g\rangle \\ &= \epsilon T G |\phi_g\rangle \\ &= \epsilon a_g T |\phi_g\rangle \\ &= \epsilon a_g |\hat{\phi}_g\rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-139})$$

(puisque a_g est réelle).

Remarque : Si G n'est pas hermitique, on peut toujours poser :

$$G = G_1 + i G_2 \quad (\text{VIII-140})$$

où $G_1 = \frac{1}{2} (G + G^\dagger)$

$$G_2 = \frac{1}{2i} (G - G^\dagger) \quad (\text{VIII-141})$$

sont deux opérateurs hermitiques. Si chacun d'eux a la parité ϵ par renversement du temps, on aura :

$$\begin{aligned} \hat{G} &= T (G_1 + i G_2) T^\dagger \\ &= T G_1 T^\dagger - i T G_2 T^\dagger \\ &= \epsilon G_1 - i G_2 = \epsilon G^\dagger \end{aligned} \quad (\text{VIII-142})$$

Donc, pour un opérateur G non hermitique, on dira qu'il est pair par renversement du temps si :

$$\hat{G} = T G T^\dagger = \epsilon G^\dagger \quad (\text{VIII-143})$$

avec $\epsilon = +1$, impair si $\epsilon = -1$.

Par exemple, \vec{R} est un opérateur pair, \vec{P} , \vec{L} et \vec{J} sont des opérateurs impairs; l'opérateur J est impair; J_x^2 est pair, mais $J_x J_y$ n'a pas de parité ϵ déterminée. De même, si H est invariant par renversement du temps, l'opérateur d'évolution :

$$U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}$$

est pair puisque [cf. (VIII-108)] :

$$\hat{U}(t, 0) = U^\dagger(t, 0) \quad (\text{VIII-144})$$

b) Propriétés des éléments de matrices d'observables paires ou impaires

a. première propriété (éléments diagonaux)

Si G est une observable paire ($\epsilon = +1$) ou impaire ($\epsilon = -1$), on a :

$$\langle \phi | G | \phi \rangle = \epsilon \langle \hat{\phi} | G | \hat{\phi} \rangle \quad (\text{VIII-145.a})$$

et, de façon plus générale :

$$\boxed{\langle \phi | G | \chi \rangle = \epsilon \langle \hat{\phi} | G | \hat{\chi} \rangle^*} \quad (\text{VIII-145.b})$$

En effet (la démonstration est analogue à celle qui a été faite au § B.1.f pour calculer l'effet d'une transformation antiunitaire sur un élément de matrice) :

$$\begin{aligned} \langle \hat{\phi} | \hat{G} | \hat{\chi} \rangle &= (\langle \phi | T^\dagger) T G T^\dagger T | \chi \rangle \\ &= \{ \langle \phi | (T^\dagger T G T^\dagger T | \chi \rangle \}^* \\ &= \langle \phi | G | \chi \rangle^* \end{aligned} \quad (\text{VIII-146})$$

relation qui, combinée avec (VIII-136), redonne bien (VIII-145).

β. deuxième propriété (éléments de matrice entre deux états conjugués de Kramers)

Si G est un opérateur pair et si $T^2 = -1$, ou
si G est un opérateur impair et si $T^2 = +1$, alors :

$$\langle \phi | G | \hat{\phi} \rangle = 0 \quad (\text{VIII-147})$$

En effet, si $T^2 = \xi$ (avec $\xi = \pm 1$), on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle \phi | G | \hat{\phi} \rangle &= \langle \phi | G (T | \phi \rangle) \\ &= \{ \langle \phi | T^\dagger \rangle G^\dagger | \phi \rangle \}^* \\ &= \langle \phi | (T^\dagger G^\dagger | \phi \rangle) \end{aligned} \quad (\text{VIII-148})$$

Comme $T^\dagger = \xi T$ [cf. (VIII-98.b)], il vient, compte tenu de (VIII-141) :

$$\begin{aligned} \langle \phi | G | \hat{\phi} \rangle &= \xi \langle \phi | (T G^\dagger T^\dagger T | \phi \rangle) \\ &= \varepsilon \xi \langle \phi | (G T | \phi \rangle) \\ &= \varepsilon \xi \langle \phi | G | \hat{\phi} \rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-149})$$

qui permet de démontrer la nullité de $\langle \phi | G | \hat{\phi} \rangle$ si le produit $\varepsilon \xi$ vaut -1.

c) Théorème de Van Vleck

Considérons un niveau non-dégénéré d'un système dont l'hamiltonien est invariant par renversement du sens du temps. Le théorème de Van Vleck indique que la valeur moyenne dans ce niveau de tout opérateur G impair par renversement du temps est nulle.

En effet, le niveau n'étant pas dégénéré, le ket $|\phi \rangle$ correspondant vérifie :

$$|\hat{\phi} \rangle = T |\phi \rangle = e^{iC} |\phi \rangle \quad (\text{VIII-150})$$

Comme d'autre part G est impair :

$$\begin{aligned} \langle \phi | G | \phi \rangle &= - \langle \phi | T^\dagger G^\dagger T | \phi \rangle \\ &= - \langle \hat{\phi} | G^\dagger | \hat{\phi} \rangle^* \\ &= - \langle \hat{\phi} | G | \hat{\phi} \rangle \\ &= -e^{iC} e^{-iC} \langle \phi | G | \phi \rangle \\ &= - \langle \phi | G | \phi \rangle \end{aligned} \quad (\text{VIII-151})$$

Donc :

$$\langle \phi | G | \phi \rangle = 0 \quad (\text{VIII-152})$$

Le théorème de Van Vleck désigne souvent le résultat précédent appliqué au cas particulier où l'hamiltonien H d'un ensemble n'agit que sur ses variables orbitales (par exemple, on étudie un ion placé dans un cristal et on néglige les effets relativistes qui donnent lieu à l'hamiltonien de structure fine). Alors, si H est invariant par renversement du sens du temps, la valeur moyenne du moment angulaire orbital total \vec{L} est nulle. Ce résultat est une conséquence directe de (VIII-152) puisque \vec{L} est un opérateur impair. On peut aussi le démontrer en remarquant que, puisque H est invariant par renversement du sens du temps, on peut obtenir des fonctions d'onde réelles pour les états stationnaires. Comme d'autre part \vec{L} est un opérateur imaginaire pur en représentation $\{ \vec{r} > \}$ (pour une particule unique par exemple, \vec{L} correspond à $-i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$), sa valeur moyenne est également imaginaire pure. Elle doit par ailleurs être réelle (\vec{L} est hermitique), ce qui entraîne qu'elle ne peut être que nulle.

Reprenons à titre d'exemple l'ion placé dans un cristal dont nous avons parlé plus haut. Supposons que l'ion soit paramagnétique lorsqu'il est libre ($L \neq 0$) mais que, dans le cristal la symétrie de l'hamiltonien orbital de l'ion soit basse, de sorte que la dégénérescence orbitale soit complètement levée (ceci ne contredit pas le théorème de Kramers puisque, dans l'espace des états des variables orbitales, le carré de l'opérateur de renversement du temps vaut +1). Alors le moment orbital est nul dans l'état fondamental :

$$\langle \vec{L} \rangle = 0 \quad \text{(VIII-153)}$$

Ceci entraîne également que la valeur moyenne du moment magnétique orbital de l'ion dans la matrice cristalline est nulle; on dit que le magnétisme orbital est "bloqué" par l'environnement (pour l'ion libre, dont l'état fondamental est dégénéré, le magnétisme orbital est non nul puisque $L \neq 0$). Physiquement, on peut interpréter cette nullité de $\langle \vec{L} \rangle$ en disant que, du fait de la grande complication de son mouvement dû au potentiel exercé par le cristal, $\langle \vec{L} \rangle$ pointe successivement dans toutes les directions de l'espace et s'annule en valeur moyenne dans le temps.

Remarque : Si maintenant on ajoute à l'hamiltonien de l'ion un couplage de structure fine du type $\vec{L} \cdot \vec{S}$, on voit facilement que son effet au premier ordre est nul. Le nouvel hamiltonien ne lèvera donc pas à cet ordre une dégénérescence éventuelle de spin.

d) Nullité du moment dipolaire électrique d'un système de moment cinétique donné et invariant par renversement du sens du temps

Considérons un système conservatif dont l'hamiltonien est invariant à la fois par rotation et par inversion du sens du temps.

$$[H, \vec{J}] = [H, T] = 0 \quad (\text{VIII-154})$$

Soit E_0 une énergie propre de H , dégénérée $(2J+1)$ fois, correspondant à un sous-espace $\mathcal{E}_0(J)$ engendré par les kets orthonormés :

$$|E_0, J, M_J\rangle = M_J = J, J-1, \dots, -J \quad (\text{VIII-155})$$

(Nous supposons ici que le nombre quantique M_J suffit à distinguer entre eux les divers états de même énergie E_J (pas de dégénérescence accidentelle); c'est toujours le cas si H, \vec{J}^2 et J_z forment un E.C.O.C.

Considérons alors le ket :

$$T|E_0, J, M_J\rangle$$

C'est un ket normé (T est antiunitaire), vecteur propre de H et \vec{J}^2 (opérateur pair) avec les mêmes valeurs propres E_0 et $J(J+1)\hbar^2$, et de J_z avec la valeur propre $-M_J$ (J_z est impair par renversement du temps). Donc :

$$T|E_0, J, M_J\rangle = e^{i\zeta}|E_0, J, -M_J\rangle \quad (\text{VIII-156})$$

où ζ est un facteur de phase réel.

Soit \vec{D} l'opérateur dipôle électrique, qui est vectoriel et pair par renversement du temps :

$$\vec{D} = T \vec{D} T^\dagger = T^\dagger \vec{D} T \quad (\text{VIII-157})$$

Nous allons montrer que tous les éléments de matrice de \vec{D} sont nuls à l'intérieur de $\mathcal{E}_0(J)$. Dans ce sous-espace, le théorème de Wigner-Eckart permet d'affirmer que :

$$\vec{D} = \alpha \vec{J} \quad (\text{VIII-158})$$

et le problème est donc de montrer que α est nul. Prenons par exemple la composante D_z , qui n'a que des éléments diagonaux du type :

$$\langle E_0, J, M | D_z | E_0, J, M \rangle$$

D'après (VIII-156) et (VIII-157) :

$$\begin{aligned} & \langle E_0, J, M | D_z | E_0, J, M \rangle \\ &= \langle E_0, J, -M | D_z | E_0, J, -M \rangle \end{aligned} \quad \text{(VIII-159)}$$

c'est-à-dire :

$$\alpha M = -\alpha M$$

Le coefficient α est donc nul [c'est bien compréhensible puisque (VIII-158) le fait apparaître comme un coefficient de proportionnalité entre deux opérateurs de parités temporelles-et d'ailleurs également spatiales-opposées].

Application : le neutron est une particule de spin 1/2. Si l'on peut mettre en évidence un dipôle électrique de cette particule (colinéaire à son spin d'après l'invariance par rotation), on démontre que les lois physiques qui sont à l'origine de l'existence du neutron ne sont pas invariantes par renversement du temps (et par parité d'espace).

INTRODUCTION

Nous allons dans ce chapitre classer les niveaux d'énergie de systèmes physiques constitués par des particules de plusieurs espèces différentes, mais jouant toutes un rôle symétrique dans l'hamiltonien du système. Le but est d'obtenir un classement général de ces niveaux, indépendant du nombre de particules de chaque type qui sont présentes dans chaque système. Le raisonnement s'applique quelle que soit la nature des particules d'une espèce donnée, qui peuvent être soit toutes des fermions, soit toutes des bosons, soit encore considérées comme discernables comme nous le verrons dans un premier temps.

Les résultats que nous allons obtenir peuvent être utilisés dans de nombreux domaines d'application de la mécanique quantique (classification des niveaux en physique atomique ou moléculaire par exemple). Mais ils sont surtout essentiels en physique nucléaire et physique des particules élémentaires. Historiquement, c'est Heisenberg qui, le premier, a introduit la notion d'isospin pour classer les niveaux d'énergie des noyaux (*). Depuis, les symétries "par substitution de particules équivalentes appartenant à n espèces différentes" [symétrie $SU(n)$] ont joué un rôle d'importance croissante, non seulement en spectroscopie nucléaire, mais dans toute la physique des particules élémentaires. On comprend le rôle essentiel de telles symétries chaque fois qu'il s'agit d'examiner si des objets physiques peuvent être considérés comme l'assemblage de particules plus élémentaires. Une application très importante est l'étude des régularités dans les interactions fortes grâce à la symétrie $SU(3)$, qui apparaît très simplement si l'on admet que mesons et baryons sont constitués de "quarks" élémentaires appartenant à trois espèces distinctes, caractérisées par un nombre quantique de "saveur" qui peut prendre trois valeurs distinctes [on pense actuellement que ce nombre est plus élevé, mais l'étude des symétries $SU(3)$ n'en perd pas pour autant son intérêt !].

(*) Au lieu d'isospin, on parle quelquefois de "spin isotopique". Ceci n'est pas très heureux puisque la symétrie d'isospin regroupe en fait des noyaux ayant le même nombre de nucléons (donc des masses voisines) et non pas le même nombre de protons (ce serait le cas pour des isotopes différents d'un même élément où seul le nombre de neutrons varie). La dénomination "spin isobarique", également utilisée, serait plus adéquate.

Un autre but de la discussion qui suit est de donner l'occasion au lecteur de se familiariser avec l'utilisation des diagrammes des racines et diagrammes des poids associés à une algèbre de Lie, dans des cas simples. L'intérêt du groupe SU(3) est que, son algèbre de Lie étant de rang deux, les représentations planes des diagrammes symbolisant les représentations irréductibles sont particulièrement bien adaptées.

Dans ce chapitre, on peut distinguer deux étapes dans le raisonnement. La première consiste à introduire des opérateurs de symétrie K, à montrer qu'ils commutent avec l'hamiltonien H, et à calculer les relations de commutation entre les K (qui sont celles d'une algèbre de Lie). Dans cette première étape, on montre aussi la profonde analogie qui existe en mécanique quantique entre la nature d'une particule (proton, neutron, etc.) et un nombre quantique qui serait associé à une variable interne de la particule. Tout ceci conduit à des raisonnements divers sur les différentes symétries que peut avoir le vecteur d'état, les produits d'opérateur de symétrisation ou d'anti-symétrisation, etc. ; cette partie peut être sautée en première lecture. La seconde étape consiste à partir des relations de commutation des opérateurs K et à construire les représentations irréductibles associées [multiplets d'isospin et supermultiplets de SU(3)]. Le lecteur intéressé par cette partie seulement pourra sauter le § A.

A - SYSTEME DE PARTICULES EQUIVALENTES

1 - Hypothèses générales

Considérons donc un ensemble de N particules dont n_α appartiennent à une première espèce α (ce sont par exemple des protons), n_β à une seconde espèce β (neutrons par exemple). Pour simplifier, nous nous limitons au cas où le nombre d'espèces est deux, mais il est possible de généraliser le raisonnement à 3, 4, ..., espèces différentes. Considérons un opérateur H, qui en pratique sera généralement l'hamiltonien du système, et supposons que toutes les particules (de même espèce ou non) jouent un rôle symétrique dans H. Précisons d'emblée sur quelques cas particuliers le sens de cette hypothèse. Considérons par exemple l'opérateur d'énergie cinétique

$$T = \sum_{i=1}^{n_\alpha} \frac{\vec{p}_i^2}{2m_\alpha} + \sum_{j=1}^{n_\beta} \frac{\vec{p}_j^2}{2m_\beta} \quad (\text{IX-1})$$

(où P désigne l'impulsion des particules, m_α et m_β la masse de chacune des particules d'espèce α et β respectivement). Lorsque

$$m_\alpha = m_\beta = m \quad (\text{IX-2})$$

nous dirons que toutes les particules jouent le même rôle dans T . Dans ce cas, on peut écrire :

$$T = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i^2 \quad (\text{IX-3})$$

expressions où il est évident que les particules interviennent de la même façon, bien que certaines d'entre elles soient de natures différentes. L'expression mathématique de l'opérateur T ne change pas si l'on transforme une (ou plusieurs) particules α en particules β (ou inversement), bien que l'interprétation physique de T devienne différente (T concerne en fait un autre système physique).

Si maintenant H inclut des termes d'énergie potentielle à deux particules

$$H = T + \sum_{i < j} V_{ij}(\vec{R}_i, \vec{R}_j) \quad (\text{IX-4})$$

(les R sont les opérateurs de position des particules), notre hypothèse implique que V_{ij} ne dépende ni de i , ni de j . On suppose donc égaux trois potentiels : celui décrivant les interactions mutuelles entre particules de l'espèce α , celui décrivant les mêmes interactions entre particules β , et celui décrivant les interactions "croisées" entre particules α et β .

De façon générale, quel que soit l'opérateur H (incluant par exemple des interactions à trois corps, des couplages spin-spin, etc.) et le nombre d'espèces $\alpha, \beta, \gamma \dots$ nous supposons toujours que H garde la même expression mathématique si l'on change la nature d'un nombre quelconque de particules.

Ceci n'exclut pas bien sûr que les particules d'espèces α ou β soient fondamentalement discernables : dans ce cas, on peut également introduire d'autres opérateurs qui correspondent à des grandeurs physiques et où les particules des deux espèces jouent un rôle différent (un opérateur de ce type est par exemple N_α , opérateur nombre de particules d'espèce α). En d'autres termes, même si les particules α et β sont, en principe, discernables, nous supposons qu'elles ne sont "pas discernées" par les

$$\mathcal{G}_\alpha \equiv \mathcal{G}_\beta \quad (\text{IX-5-c})$$

ce qui nous permettra dans la suite d'abandonner l'indice α ou β dans la notation des espaces des états d'une seule particule. Cet espace peut être décomposé sur une base orthonormée d'états individuels $\{|\phi_k\rangle\}$, l'indice k variant de 1 à \mathcal{N} (dimensions de \mathcal{E} , éventuellement infinie). L'espace $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$ possède alors une base orthonormée donnée par les kets :

$$\begin{aligned} & |1 : k_1 ; 2 : k_2 ; \dots ; n_\alpha : k_{n_\alpha} ; n_\alpha + 1 : k_{n_\alpha + 1} ; \dots ; n : k_n \rangle \\ & = |\phi_{k_1}(1)\rangle \otimes |\phi_{k_2}(2)\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{k_n}(n)\rangle \end{aligned} \quad (\text{IX-6})$$

Il est très simple d'exprimer mathématiquement que toutes les particules, quelle que soit leur nature, jouent un rôle symétrique dans H . Il suffit d'écrire la nullité des commutateur :

$$[H, P_{ij}] = 0 \quad (\text{IX-7})$$

où P_{ij} est un opérateur de permutation particulier, celui qui effectue une transposition entre les deux particules (i) et (j) (*). La relation (IX-7) doit être vérifiée quels que soient i et j, que la nature des particules soit la même ou non.

L'opérateur P_{ij} ne change, ni le nombre n_α de particules α , ni celui n_β de particules β ; agissant sur un ket de la forme (IX-6), il échange deux états individuels $|\phi_k\rangle$. L'espace $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$ est donc stable sous l'action de P_{ij} .

b) Opérateurs changeant la nature des particules

Nous allons maintenant introduire des opérateurs $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ et $P_{\alpha \rightarrow \beta}$ qui changent n_α et n_β . Pour cela considérons l'espace somme directe :

$$\mathcal{F}_n = \mathcal{E}_{n_\alpha=n, n_\beta=0} \oplus \mathcal{E}_{n_\alpha=n-1, n_\beta=1} \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_{n_\alpha=0, n_\beta=n} \quad (\text{IX-8})$$

Dans l'espace des états plus large \mathcal{F}_n , les nombres n_α et n_β n'ont pas

(*) La commutation de H avec toutes les transpositions P_{ij} entraîne que H commute avec l'ensemble des $n!$ opérateurs de permutation P_λ des n particules.

de valeur fixée (mais leur somme l'est) (*). Une base orthonormée de \mathcal{F}_n est constituée par les kets écrits en (IX-6), pris pour les diverses valeurs de n_α et $n_\beta = n - n_\alpha$, lorsque n_α va de 0 à n (par convention, nous considérons comme orthogonaux dans \mathcal{F}_n deux kets issus de deux espaces $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$ distincts). Il nous faut aussi définir l'action de l'opérateur H dans \mathcal{F}_n (***) de façon que H devienne l'hamiltonien de n particules équivalentes, sans préciser leur nature (α ou β). Il suffit en fait pour cela de considérer l'opérateur qui a la même expression mathématique dans tous les espaces isomorphes $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$, la seule différence étant que chaque particule numérotée (i) peut suivant les cas être interprétée physiquement comme d'espèce α ou β . En d'autres termes, l'action de H dans \mathcal{F}_n est obtenue en ajoutant celles des hamiltoniens, associés à des systèmes physiques différents (n_α et n_β varient), qui sont initialement définis dans chacun des espaces $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$.

Posons alors :

$$P_{\beta \rightarrow \alpha} \left| \overbrace{1:k_1; \dots; n_\alpha:k_{n_\alpha}}^{n_\alpha}; \overbrace{n_\alpha+1:k_{n_\alpha+1}; \dots; n:k_n}^{n_\beta} \right\rangle \quad (IX-9-a)$$

$$= \left| \overbrace{1:k_1; \dots; n_\alpha+1:k_{n_\alpha+1}}^{n_\alpha+1}; \overbrace{n_\alpha+2:k_{n_\alpha+2}; \dots; n:k_n}^{n_\beta-1} \right\rangle$$

L'action de $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ définie sur les kets de base (IX-6), ne laisse invariant aucun sous-espace $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$: agissant sur un ket quelconque de ce sous-espace, $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ donne un ket de $\mathcal{E}_{n_\alpha+1, n_\beta-1}$, où la seule différence est que la $(n_\alpha+1)^{i\text{ème}}$ particule est considérée comme une particule d'espèce α au lieu de β . Quant à l'action de $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ sur ces kets de $\mathcal{E}_{n_\alpha=n, n_\beta=0}$, elle peut être définie comme donnant un ket nul :

$$P_{\beta \rightarrow \alpha} |\psi\rangle = 0 \quad \text{si} \quad |\psi\rangle \in \mathcal{E}_{n_\alpha=n, n_\beta=0} \quad (IX-9-b)$$

(*) L'espace \mathcal{F}_n comprend donc des états qui sont des superpositions cohérentes d'états où n_α et n_β ont des valeurs différentes. Même si de tels états n'ont pas nécessairement de sens physique (superposition cohérente d'un proton et d'un neutron par exemple), il est commode pour la suite d'introduire \mathcal{F}_n .

(**) Pour simplifier, nous prenons la même notation pour H en tant qu'opérateur agissant, soit dans $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$ soit dans \mathcal{F}_n .

De façon symétrique, on peut définir un opérateur $P_{\alpha \rightarrow \beta}$ qui change la particule α numérotée n_α en particule β , et dont l'action dans $\mathcal{E}_{n_\alpha=0, n_\beta=n}$ donne zéro.

γ) Commutation avec H

Soit $|\psi\rangle$ un ket propre de H, appartenant à $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$ et de valeur propre E :

$$\begin{cases} H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \\ |\psi\rangle \in \mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta} \end{cases} \quad (IX-10)$$

Alors, le ket :

$$|\psi'\rangle = P_{\beta \rightarrow \alpha} |\psi\rangle \in \mathcal{E}_{n_\alpha+1, n_\beta-1} \quad (IX-11)$$

est vecteur propre de H avec la même valeur propre E

$$H |\psi'\rangle = E |\psi'\rangle \quad (IX-12)$$

($|\psi'\rangle$ est orthogonal à $|\psi\rangle$). Cette propriété provient du fait que les particules α et β jouent un rôle équivalent dans H. Prenons par exemple le cas où H est donné par l'expression (IX-4). Si les particules considérées n'ont pas de spin, il est clair que l'équation aux états stationnaires :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta_i + \sum_{i < j} V(i, j) \right\} \psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_n) = E \psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_n) \quad (IX-13)$$

sera satisfaite de la même façon que les coordonnées de la $(n+1)^{\text{ième}}$ particule soient interprétées comme appartenant à une particule d'espèce α ou β . Si les particules ont un spin s , l'équation (IX-13) est remplacée par $(2s+1)^n$ équations associées aux diverses composantes d'un spineur, mais la conclusion reste la même. De façon générale, les opérateurs $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ et $P_{\alpha \rightarrow \beta}$ donnent une correspondance biunivoque entre les espaces isomorphes $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$ et $\mathcal{E}_{n_\alpha+1, n_\beta-1}$; les éléments de matrice de H entre états correspondant sont tous égaux.

Les relations (IX-10) et (IX-12) impliquent que l'opérateur P n'a d'éléments de matrice non-nuls qu'entre kets propres de H de même valeur propre; par suite :

$$[P_{\alpha \rightarrow \beta}, H] = [P_{\beta \rightarrow \alpha}, H] = 0 \quad (IX-14)$$

Définissons les opérateurs N_α et N_β , nombre de particules de chaque espèce, comme des opérateurs (hermitiques) agissant dans \mathcal{F}_n dont tous les kets de chaque sous-espace $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$ sont kets propres avec les valeurs propres n_α et n_β . On voit facilement que :

$$\begin{cases} [N_\alpha, H] = [N_\beta, H] = 0 & \text{(IX-15-a)} \\ [N_\alpha, N_\beta] = 0 & \text{(IX-15-b)} \end{cases}$$

Exercice :

. Etablir les relations de commutation suivantes :

$$[P_{\beta \rightarrow \alpha}, N_\alpha] = -P_{\beta \rightarrow \alpha} \quad \text{(IX-16-a)}$$

$$[P_{\beta \rightarrow \alpha}, N_\beta] = P_{\beta \rightarrow \alpha} \quad \text{(IX-16-b)}$$

$$[P_{\alpha \rightarrow \beta}, N_\alpha] = P_{\alpha \rightarrow \beta} \quad \text{(IX-16-c)}$$

$$[P_{\alpha \rightarrow \beta}, N_\beta] = -P_{\alpha \rightarrow \beta} \quad \text{(IX-16-d)}$$

. Evaluer l'effet dans \mathcal{F}_n du commutateur entre $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ et $P_{\alpha \rightarrow \beta}$ (ne pas oublier de prendre en compte les kets de $\mathcal{E}_{n_\alpha=0, n_\beta=n}$ et $\mathcal{E}_{n_\alpha=n, n_\beta=0}$; les deux opérateurs ne sont, ni unitaires, ni inverses l'un de l'autre). Il est plus commode d'introduire les opérateurs :

$$\begin{aligned} T_{\beta\alpha} &= \sqrt{N_\alpha} P_{\beta \rightarrow \alpha} \sqrt{N_\beta} \\ T_{\alpha\beta} &= \sqrt{N_\beta} P_{\alpha \rightarrow \beta} \sqrt{N_\alpha} \end{aligned} \quad \text{(IX-17)}$$

Montrer que leur commutateur est donné par :

$$[T_{\beta\alpha}, T_{\alpha\beta}] = N_\alpha - N_\beta \quad \text{(IX-18)}$$

et que $[T_{\beta\alpha}]^+ = T_{\alpha\beta} \quad \text{(IX-19)}$

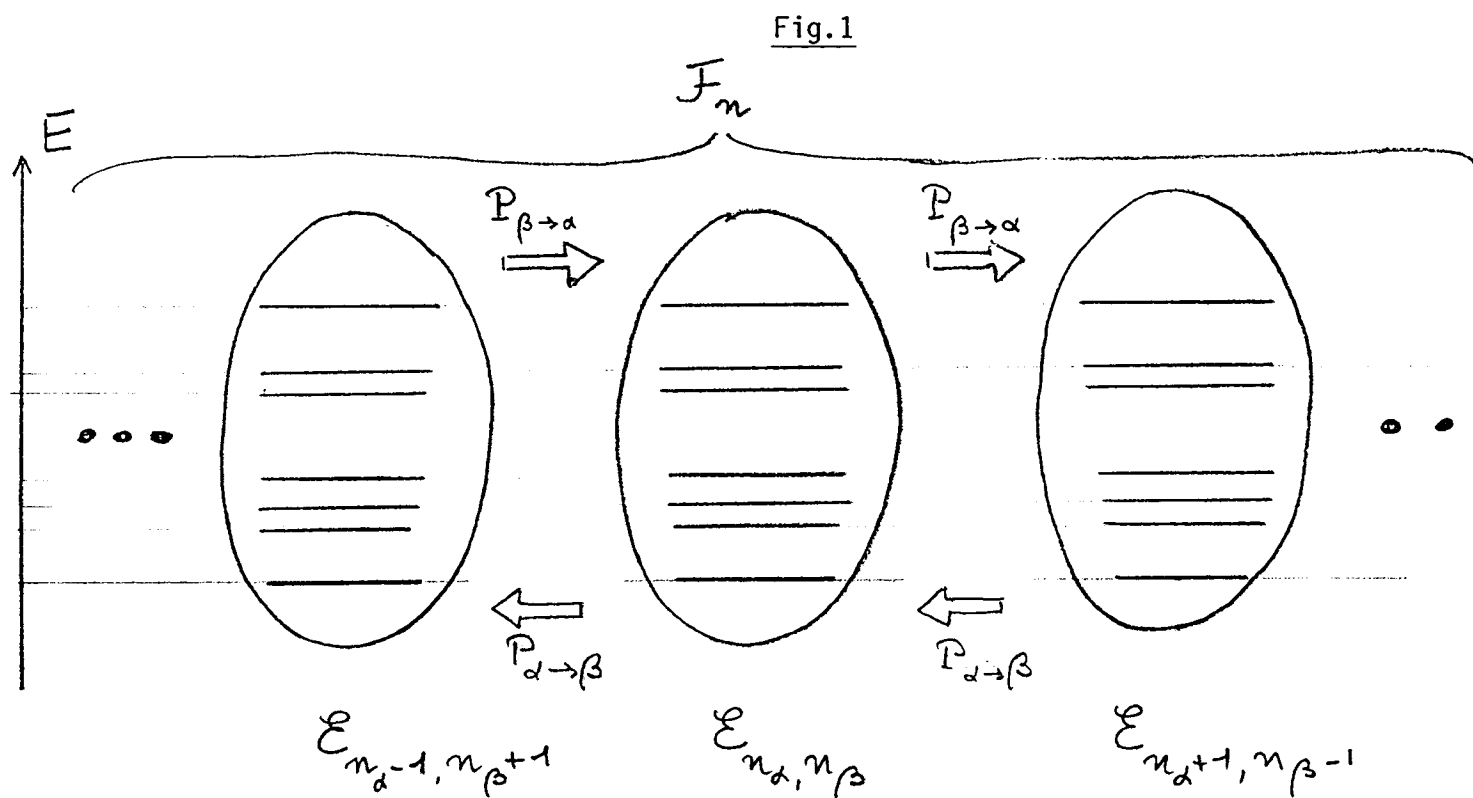
Etablir les égalités :

$$[T_{\beta\alpha}, N_\alpha] = -[T_{\beta\alpha}, N_\beta] = -T_{\beta\alpha} \quad \text{(IX-20-a)}$$

$$[T_{\alpha\beta}, N_\alpha] = -[T_{\alpha\beta}, N_\beta] = T_{\alpha\beta} \quad \text{(IX-20-b)}$$

En déduire que les quatre opérateurs N_α , N_β , $T_{\alpha\beta}$ et $T_{\beta\alpha}$ constituent une algèbre de Lie (dont l'opérateur $N = N_\alpha + N_\beta$ est le centre).

Résumons cette étude préliminaire sur des particules discernables. L'espace des états \mathcal{F}_n est la somme directe de sous-espaces $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$, isomorphes entre eux, et où les éléments de matrice de H se calculent mathématiquement de façon identique. Par suite, le spectre de H (et les degrés de dégénérescence associés) sont les mêmes dans tous les sous-espaces $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$. Les opérateurs $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ et $P_{\alpha \rightarrow \beta}$ (ou $T_{\beta\alpha}$ et $T_{\alpha\beta}$) établissent la correspondance entre les états propres comme schématisé sur la figure 1.



b) Particules identiques

Supposons maintenant que les particules α d'une part, les particules β d'autre part, soient des particules identiques. Qu'elles soient des fermions ou des bosons, il nous faut modifier le raisonnement précédent, car l'espace des états \mathcal{F}_n doit être restreint à sa partie, soit totalement symétrique \mathcal{F}_n^S , soit totalement antisymétrique \mathcal{F}_n^A , par rapport aux deux ensembles de particules α et β . Si les opérateurs H , N_α et N_β ne posent pas de problèmes particuliers (ils laissent invariants les sous-espaces totalement symétrique ou antisymétrique), il n'en est pas de même de $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ et $P_{\alpha \rightarrow \beta}$: changer la nature d'une particule ne peut se faire sans modification de la façon dont le ket est symétrisé (ou antisymétrisé). Une telle opération n'est évidemment pas incluse dans la définition (IX-9-a) de $P_{\beta \rightarrow \alpha}$, qui change simplement une particule β et α . Il nous faudra donc adapter le raisonnement du §a précédent. Ceci nous conduira à introduire des opérateurs $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$, similaires à $P_{\beta \rightarrow \alpha}$ et $P_{\alpha \rightarrow \beta}$, mais

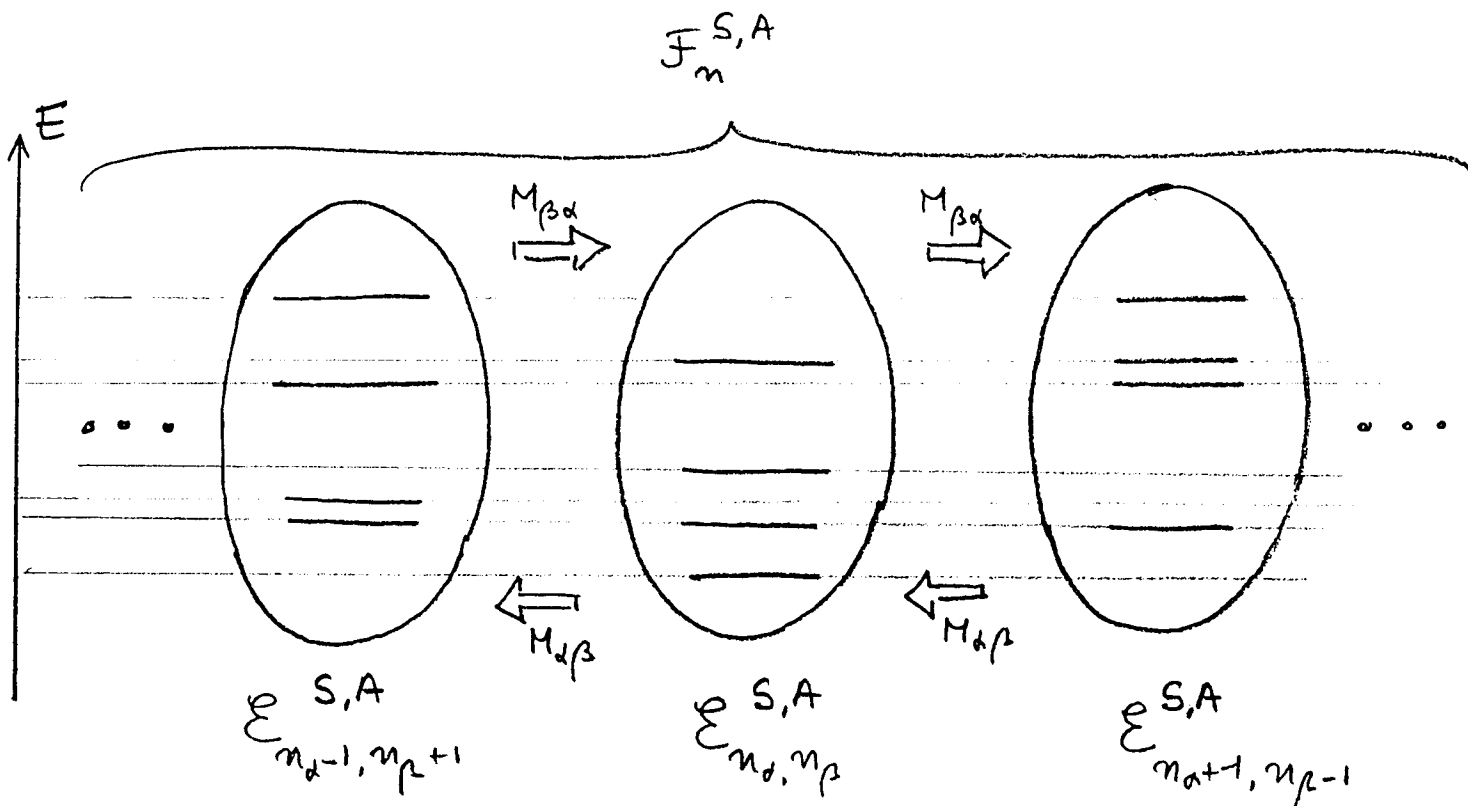
qui laissent stable la partie \mathcal{F}_n^S ou \mathcal{F}_n^A de \mathcal{F}_n (c'est-à-dire la partie qui garde un sens physique pour des particules identiques).

Nous pouvons d'emblée examiner comment le schéma de la figure 1 sera modifié. L'espace des états physiques devient la somme directe des parties totalement symétriques $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}^S$, ou antisymétriques $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}^A$ de chacun des sous-espaces $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$:

$$\mathcal{F}_n^{S,A} = \mathcal{E}_{n_\alpha=0, n_s=n}^{S,A} \oplus \mathcal{E}_{n_\alpha=1, n_s=n-1}^{S,A} \oplus \mathcal{E}_{n_\alpha=n, n_s=0}^{S,A} \quad (\text{IX-21})$$

Chacun de ces sous-espaces est globalement invariant sous l'effet de H (qui ne change pas le nombre de particules de chaque espèce). Tout ket propre de H dans $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}^{S,A}$ est automatiquement ket propre de H dans l'espace plus grand $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta}$, mais l'inverse n'est pas nécessairement vrai. Il faut donc supprimer sur la figure 1 un certain nombre de niveaux d'énergie, ce qui conduit à un schéma du type de celui de la figure 2.

Fig. 2



α) Opérateurs $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$

Les opérateurs $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$ que nous désirons introduire doivent avoir deux effets : changer la symétrisation ou l'antisymétrisation du ket sur lequel ils agissent, et modifier la nature d'une particule. Nous poserons donc :

$$\begin{aligned} M_{\alpha\beta} &= \mu_{\alpha\beta} P_{\beta\rightarrow\alpha} Q_{S,A} (n_\alpha \rightarrow n_\alpha + 1, n_\beta \rightarrow n_\beta - 1) \\ M_{\beta\alpha} &= \mu_{\beta\alpha} P_{\alpha\rightarrow\beta} Q_{S,A} (n_\alpha \rightarrow n_\alpha - 1, n_\beta \rightarrow n_\beta + 1) \end{aligned} \quad (IX-22)$$

où $\mu_{\alpha\beta}$ et $\mu_{\beta\alpha}$ sont des coefficients réels à déterminer par la suite, et les opérateurs $Q_{S,A} (n_\alpha \rightarrow n_\alpha \pm 1, n_\beta \rightarrow n_\beta \mp 1)$ désignent des opérateurs changeant la symétrie des kets par permutation (*). Ce sont donc des combinaisons linéaires d'opérateurs de permutation entre particules et, dans le complément IX-A, on montre qu'ils s'expriment en fait à partir de transpositions P_{ij} de la particule (i) et de la particule (j) :

$$\begin{aligned} Q_{S,A} (n_\alpha \rightarrow n_\alpha + 1, n_\beta \rightarrow n_\beta - 1) \\ = \frac{1}{n_\alpha + 1} \left[1 + \epsilon \sum_{j=1}^{n_\alpha} P_{j, n_\alpha + 1} \right] \end{aligned} \quad (IX-23-a)$$

$$\begin{aligned} Q_{S,A} (n_\alpha \rightarrow n_\alpha - 1, n_\beta \rightarrow n_\beta + 1) \\ = \frac{1}{n_\beta + 1} \left[1 + \epsilon \sum_{j=n_\alpha + 1}^n P_{n_\alpha, j} \right] \end{aligned} \quad (IX-23-b)$$

où :

$$\begin{cases} \epsilon = +1 & \text{pour des bosons} \\ \epsilon = -1 & \text{pour des fermions} \end{cases} \quad (IX-24)$$

Peu nous importe cependant ici la forme exacte des opérateurs Q ; le fait même qu'ils s'expriment en fonction d'opérateurs de permutation, qui commutent tous avec l'opérateur H, entraîne leur commutation avec H. Comme nous avons

(*) Par convention de notation $M_{\alpha\beta}$ fait intervenir $P_{\beta\rightarrow\alpha}$ et $M_{\beta\alpha}$ l'opérateur $P_{\alpha\rightarrow\beta}$ (changement de l'ordre de α et β) ; ce qui sera plus commode pour la suite.

vu que c'est également le cas de $P_{\alpha \rightarrow \beta}$ et de $P_{\beta \rightarrow \alpha}$, nous avons en conséquence :

$$[H, M_{\alpha\beta}] = [H, M_{\beta\alpha}] = 0 \quad (\text{IX-25})$$

Les expressions que nous avons écrites jusqu'ici pour les opérateurs M ne sont cependant pas très maniables; aussi allons-nous en écrire de différentes dans le paragraphe qui suit.

β) Opérateurs de création et d'annihilation

Il est commode, dans de nombreux problèmes où interviennent des particules identiques, d'utiliser les opérateurs de création et d'annihilation agissant dans l'espace de Fock du système (espace où le nombre de particules peut varier). Dans le cas qui nous intéresse, deux types d'opérateurs de création et d'annihilation interviennent, associés respectivement aux particules d'espèce α et β . Ces opérateurs seront notés a_k et a_k^+ (annihilation et création d'une particule α dans l'état $|\phi_k\rangle$), b_k et b_k^+ (opérateurs correspondants pour les particules β). Aucun de ces opérateurs ne laisse invariante la partie symétrique \mathcal{F}_n^S ou antisymétrique \mathcal{F}_n^A de \mathcal{F}_n : ils transforment tout ket de $\mathcal{F}_n^{S,A}$ en un ket de $\mathcal{F}_{n\pm 1}^{S,A}$. Par contre, les produits :

$$\begin{array}{cc} a_k^+ & a_k \\ a_k^+ & b_k \end{array} \quad \begin{array}{cc} b_k^+ & b_k \\ b_k^+ & a_k \end{array} \quad (\text{IX-26})$$

ne changent pas le nombre total de particules $n = n_\alpha + n_\beta$ et laissent donc $\mathcal{F}_n^{S,A}$ globalement invariant. Parmi ces quatre opérateurs, les deux premiers ne changent pas la nature des particules et permettent de définir les opérateurs N_α et N_β , nombre de particules α et β , par (*) :

$$N_\alpha = \sum_k a_k^+ a_k \quad (\text{IX-27-a})$$

$$N_\beta = \sum_k b_k^+ b_k \quad (\text{IX-27-b})$$

Il est clair que :

$$[H, N_\alpha] = [H, N_\beta] = 0 \quad (\text{IX-28})$$

(*) $\mathcal{F}_n^{S,A}$ est un sous-espace du produit tensoriel de l'espace de Fock des particules α par l'espace de Fock des particules β (le sous-espace propre de l'opérateur $N = N_\alpha + N_\beta$, de valeur propre n).

Les deux derniers opérateurs (IX-26) changent la nature d'une des particules du système, et rappellent donc les opérateurs $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$. En fait, dans le complément IX-A, on montre que l'on a simplement (*) :

$$M_{\alpha\beta} = (\epsilon)^{N_\alpha} \sum_k a_k^+ b_k \quad (\text{IX-29-a})$$

$$M_{\beta\alpha} = \sum_k b_k^+ a_k (\epsilon)^{N_\alpha} \quad (\text{IX-29-b})$$

à condition de poser dans (IX-22) :

$$\mu_{\alpha\beta} = \sqrt{n_\beta (n_\alpha + 1)} \quad (\text{IX-30-a})$$

$$\mu_{\beta\alpha} = \epsilon \sqrt{n_\alpha (n_\beta + 1)} \quad (\text{IX-30-b})$$

La définition de ϵ est celle de (IX-24) (**). Nous avons ainsi introduit quatre opérateurs N_α , N_β , $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$ qui commutent avec H [relations (IV-25) et (IV-28)].

(*) Il n'est pas difficile de vérifier sur (IX-27) et (IX-29) que les opérateurs N et M sont invariants si l'on change la base $\{|\phi_k\rangle\}$ des états individuels.

(**) Pour des bosons, les facteurs $(\epsilon)^{N_\alpha}$ et $(\epsilon)^{N_\alpha+1}$ disparaissent de (IX-29). Pour des fermions, ils introduisent une certaine dissymétrie entre les espèces α et β , qui ne serait pas apparue si nous avions posé :

$$M'_{\alpha\beta} = \sum_k a_k^+ b_k$$

$$M'_{\beta\alpha} = \sum_k b_k^+ a_k$$

Cette définition, plus simple, convient également pour la plupart des raisonnements que nous allons faire (par exemple, les relations de commutation des M' entre-eux ou avec les opérateurs N sont exactement les mêmes que celles des M). Les facteurs $(\epsilon)^{N_\alpha}$ et $(\epsilon)^{N_\alpha+1}$ nous seront cependant utiles pour établir la similarité entre spin et isospin (§ B-2) et les règles de commutation entre générateurs du groupe $SU(3)$ (§ C-1).

Rappelons les relations bien connues de commutation des opérateurs de création et d'annihilation. Le commutateur de tous les opérateurs a (ou a^+) avec tous les opérateurs b (ou b^+) est nul. Si les particules sont des bosons on a :

$$\begin{aligned} [a_k, a_{k'}] &= [a_k^+, a_{k'}^+] = 0 \\ [a_k, a_{k'}^+] &= \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (\text{IX-31})$$

(et des relations semblables pour les opérateurs b). Si les particules sont des fermions, les relations (IX-a) doivent être remplacées par :

$$\begin{aligned} [a_k, a_{k'}]_+ &= [a_k^+, a_{k'}^+]_+ = 0 \\ [a_k, a_{k'}^+]_+ &= \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (\text{IX-32})$$

où $[A, B]_+$ désigne l'anticommutateur $AB + BA$.

Dans tous les cas, on a donc :

$$\begin{aligned} a_k a_{k'} &= \epsilon a_{k'} a_k \\ a_k^+ a_{k'}^+ &= \epsilon a_{k'}^+ a_k^+ \\ a_k a_{k'}^+ &= \epsilon a_{k'}^+ a_k + \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (\text{IX-33})$$

des égalités du même type pour les b et b^+ , tous les commutateurs entre un opérateur a (ou a^+) et b (ou b^+) étant nuls (*). En conséquence, toujours pour des fermions comme pour des bosons :

$$\begin{aligned} [a_k, a_{k'}, a_{k'}] &= a_k a_{k'} a_{k'} - a_{k'} a_{k'} a_k \\ &= \epsilon a_{k'} a_k a_{k'} - \epsilon a_{k'} a_k a_{k'} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{IX-34-a})$$

(*) Si l'on a à faire passer un opérateur a_k avant un opérateur $a_{k'}^+$, ne pas oublier le ϵ devant $\delta_{kk'}$, puisque :

$$a_{k'}^+ a_k = \epsilon (a_k a_{k'}^+ - \delta_{kk'})$$

et, de même :

$$[a_k^+ , a_{k'}^+ a_{k'}^+] = 0 \quad (\text{IX-34-b})$$

mais :

$$\begin{aligned} [a_k , a_{k'}^+ a_{k'}] &= a_k a_{k'}^+ a_{k'} - a_{k'}^+ a_{k'} a_k \\ &= \epsilon a_{k'}^+ a_k a_{k'} + \delta_{kk'} a_{k'} - \epsilon a_{k'}^+ a_k a_{k'} \\ &= \delta_{kk'} a_{k'} \end{aligned} \quad (\text{IX-35})$$

et, de même :

$$[a_k^+ , a_{k'}^+ a_{k'}] = - \delta_{kk'} a_k^+ \quad (\text{IX-36})$$

Ces deux dernières relations entraînent que :

$$\begin{aligned} [a_k , N_\alpha] &= a_k \\ [a_k^+ , N_\alpha] &= - a_k^+ \end{aligned} \quad (\text{IX-37})$$

L'opérateur a_k diminue d'une unité la valeur propre de N_α , a_k^+ l'augmente d'une unité. Par suite :

$$\begin{aligned} (\epsilon)^{N_\alpha} a_k &= a_k (\epsilon)^{N_\alpha+1} = - a_k (\epsilon)^{N_\alpha} \\ (\epsilon)^{N_\alpha} a_k^+ &= a_k^+ (\epsilon)^{N_\alpha+1} = - a_k^+ (\epsilon)^{N_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{IX-38})$$

(ces relations se vérifient immédiatement par action sur un vecteur propre quelconque de N_α). Nous pouvons donc réécrire les relations (IX-29) sous la forme :

$$M_{\alpha\beta} = \sum_k a_k^+ b_k (\epsilon)^{N_\alpha+1} \quad (\text{IX-39-a})$$

$$M_{\beta\alpha} = (\epsilon)^{N_\alpha+1} \sum_k b_k^+ a_k \quad (\text{IX-39-b})$$

Sur ces relations comme sur (IX-29), on voit que :

$$M_{\alpha\beta}^+ = M_{\beta\alpha} \quad (\text{IX-40})$$

Les opérateurs $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$ sont hermitiques conjugués l'un de l'autre.

$\gamma)$ Algèbre de Lie d'opérateurs commutant avec H

Calculons les relations de commutation entre les quatre opérateurs N_α , N_β , $M_{\beta\alpha}$ et $M_{\alpha\beta}$ qui tous commutent avec H. La commutation entre opérateurs a et b entraîne que :

$$[N_\alpha, N_\beta] = 0 \quad (\text{IX-41})$$

relation déjà écrite en (IX-15-b). Calculons ensuite les commutateurs :

$$\begin{aligned} & [(\varepsilon)^{N_\alpha} a_k^+ b_k, a_{k'}^+ a_{k'}] \\ &= \varepsilon^{N_\alpha} (a_k^+ b_k a_{k'}^+ a_{k'} - a_{k'}^+ a_{k'} a_k^+ b_k) \end{aligned} \quad (\text{IX-42-a})$$

(puisque N_α commute avec $a_{k'}^+ a_{k'}$) et :

$$\begin{aligned} & [(\varepsilon)^{N_\alpha} a_k^+ b_k, b_{k'}^+ b_{k'}] \\ &= (\varepsilon)^{N_\alpha} (a_k^+ b_k b_{k'}^+ b_{k'} - b_{k'}^+ b_{k'} a_k^+ b_k) \end{aligned} \quad (\text{IX-42-b})$$

Or :

$$\begin{aligned} & [a_k^+ b_k, a_{k'}^+ a_{k'}] \\ &= (a_k^+ a_{k'}^+ a_{k'} - a_{k'}^+ a_{k'} a_k^+) b_k \\ &= (\varepsilon a_{k'}^+ a_k^+ a_{k'} - \varepsilon a_{k'}^+ a_k^+ a_{k'} - \delta_{kk'} a_{k'}^+) b_k \\ &= -\delta_{kk'} a_{k'}^+ b_k \end{aligned} \quad (\text{IX-42-c})$$

De même :

$$[a_k^+ b_{k'}, b_{k'}^+ b_{k'}] = \delta_{kk'} a_k^+ b_k \quad (\text{IX-42-d})$$

Par sommation de (IX-42-a) sur k et k', on obtient :

$$[M_{\alpha\beta}, N_\alpha] = -M_{\alpha\beta} \quad (\text{IX-43-a})$$

De même, par sommation de (IX-42-b), il vient :

$$[M_{\alpha\beta} , N_{\beta}] = M_{\alpha\beta} \quad (\text{IX-43-b})$$

Un raisonnement analogue donne (*) :

$$[M_{\beta\alpha} , N_{\alpha}] = M_{\beta\alpha} \quad (\text{IX-43-c})$$

et :

$$[M_{\beta\alpha} , N_{\beta}] = - M_{\beta\alpha} \quad (\text{IX-43-d})$$

Nous avons ainsi calculé tous les commutateurs où interviennent les opérateurs N. Il ne nous reste plus qu'à évaluer celui de $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$. Or :

$$\begin{aligned} & [(\epsilon)^{N_{\alpha}} a_k^+ b_k , (\epsilon)^{N_{\alpha}+1} b_{k'}^+ a_{k'}] \\ &= (\epsilon)^{N_{\alpha}+N_{\alpha}+2} (a_k^+ b_k b_{k'}^+ a_{k'} - b_{k'}^+ a_{k'} a_k^+ b_k) \\ &= (\epsilon a_k^+ b_{k'}^+ b_k a_{k'} + \delta_{kk'} a_k^+ a_{k'} \\ &\quad - \epsilon b_{k'}^+ a_k^+ a_{k'} b_k - \delta_{kk'} b_{k'}^+ b_k) \\ &= \delta_{kk'} (a_k^+ a_{k'} - b_k^+ b_{k'}) \end{aligned} \quad (\text{IX-44})$$

Par sommation sur k et k', il vient :

$$[M_{\alpha\beta} , M_{\beta\alpha}] = N_{\alpha} - N_{\beta} \quad (\text{IX-45})$$

Les relations (IX-41), (IX-43) et (IX-45) nous donnent ainsi les relations de commutation des quatre opérateurs N_{α} , N_{β} , $M_{\beta\alpha}$ et $M_{\alpha\beta}$, et nous montrent qu'ils constituent une algèbre de Lie, \mathfrak{L}_4 , de dimension 4. Il est commode de remplacer N_{α} et N_{β} par les deux combinaisons linéaires :

$$N = N_{\alpha} + N_{\beta} \quad (\text{IX-46-a})$$

$$\Delta = \frac{1}{2} (N_{\alpha} - N_{\beta}) \quad (\text{IX-46-b})$$

(*) Si l'on préfère, on peut démontrer les relations (IX-43) sans calcul de commutateurs, en remarquant sur l'expression de $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$ qu'ils transforment tout vecteur propre de N_{α} de valeur propre n_{α} en un autre vecteur propre de valeur propre $n_{\alpha} \pm 1$ [ce qui est évident sur (IX-22) ou (IX-29)].

car on voit immédiatement que N commute avec tous les opérateurs de \mathcal{L}_4 (N constitue le "centre" de cet algèbre de Lie). Avec cette nouvelle base d'opérateurs, les relations de commutation s'écrivent :

$$[M_{\alpha\beta} , \Delta] = - M_{\alpha\beta} \quad (\text{IX-47-a})$$

$$[M_{\beta\alpha} , \Delta] = M_{\beta\alpha} \quad (\text{IX-47-b})$$

$$[M_{\alpha\beta} , M_{\beta\alpha}] = 2 \Delta \quad (\text{IX-47-c})$$

(tous les commutateurs où apparaît N étant nuls). Ces relations sont le point de départ de tous les raisonnements qui seront effectués dans les paragraphes B et C suivants.

3. La nature d'une particule peut être considérée comme un nombre quantique interne

Avant d'aller plus loin, il est utile pour la suite d'étudier la question suivante : le système physique étudié possède des propriétés d'invariance par échange entre particules quelle que soit leur nature ; ne peut-on alors les considérer toutes comme des particules identiques, dont l'état interne serait caractérisé par deux valeurs différentes d'un certain nombre quantique, l'hamiltonien n'agissant pas sur les variables internes en question ? Inversement, supposons que l'hamiltonien d'un système donné de particules identiques n'agisse pas sur un certain type de variables internes (le spin par exemple) ; ne peut-on considérer que tout se passe comme si le système était constitué de particules d'espèces différentes, le nombre d'espèces étant simplement le nombre de valeurs distinctes accessibles au nombre quantique qui spécifie l'état des variables internes ? Prenons par exemple un atome dans l'approximation non-relativiste où l'hamiltonien n'agit pas sur le spin des électrons. La question est alors de savoir si l'on peut obtenir ses niveaux d'énergie ainsi que leur degré de dégénérescence, en considérant que le système est constitué de "deux sortes d'électrons", ceux dont la composante du spin sur un axe donné vaut $+\hbar/2$ et ceux dont la même composante vaut $-\hbar/2$.

Nous allons voir que la réponse aux questions précédentes est oui, bien que les postulats de la mécanique quantique conduisent dans les deux cas à décrire le système par des kets mathématiques différents : dans un cas, il faut symétriser (ou antisymétriser) séparément le vecteur d'état par rapport à autant de groupes de particules qu'il existe d'espèces distinctes, alors que dans le second la symétrisation doit être faite par rapport à l'ensemble de toutes les particules identiques.

Le raisonnement qui suit est présenté pour des fermions, mais il peut aisément être étendu au cas des bosons.

α) Antisymétrisation partielle ou totale d'un vecteur d'état

Considérons un ensemble de n_α particules α et n_β particules β . Les antisymétriseurs qui permettent l'obtention du vecteur d'état sont :

$$A(1, 2, \dots, n_\alpha) = \frac{1}{n_\alpha!} \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} P_{\lambda}(1, 2, \dots, n_\alpha)$$

$$A(n_\alpha+1, \dots, n) = \frac{1}{n_\beta!} \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} P_{\lambda}(n_\alpha+1, \dots, n) \quad (\text{IX-48-a})$$

Pour un ensemble de $n = n_\alpha + n_\beta$ particules identiques, l'antisymétriseur à appliquer est :

$$A(1,2,\dots,n) = \frac{1}{n!} \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} P_{\lambda}(1,2,\dots,n) \quad (\text{IX-48-b})$$

Comment exprimer cet opérateur en fonction des antisymétriseurs partiels A écrits en (IX-48-a)? Nous allons montrer (*) que :

$$A(1,2,\dots,n) = \frac{n_{\alpha}! n_{\beta}!}{n!} \left\{ 1 - \sum_i^{n_{\alpha}} \sum_{j_{n_{\alpha}+1}}^n P_{i,j} \right. \\ \left. + \sum_{i_1 < i_2}^{n_{\alpha}} \sum_{j_1 < j_2}^{n_{\alpha}+1} P_{i_1,j_1} P_{i_2,j_2} + \dots \dots \dots \right. \\ \left. + (-1)^q \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_q}^{n_{\alpha}} \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_q}^n P_{i_1,j_1} P_{i_2,j_2} \dots P_{i_q,j_q} + \dots \dots \dots \right\} \\ \times A(1,\dots,n_{\alpha}) A(n_{\alpha}+1,\dots,n) \quad (\text{IX-49})$$

(q est égal au plus petit des nombres n_{α} et n_{β}), où P_{ij} désigne l'opérateur de transposition des particules i et j . Pour établir (IX-49), supposons pour fixer les idées que $n_{\alpha} < n_{\beta}$. Remarquons en premier lieu que toutes permutations des n particules peut être caractérisée par :

- . la donnée des numéros de q particules parmi celles numérotées de 1 à n_{α} ($q < n_{\alpha}$) qui passent sous l'effet de la permutation dans les n_{β} dernières. On précise de cette façon quelles sont les particules de deux "boîtes", celle de rang 1 à n_{α} , et celle des rangs $n_{\alpha}+1$ à n ;
- . les deux permutations des particules à l'intérieur de chacune des deux "boîtes".

A toute permutation des n particules peut être associée une autre permutation intermédiaire, où l'on a remis les q particules qui ont changé de boîte dans leur boîte de référence. Cette opération est effectuée de façon unique en transposant la particule de numéro i_1 ($1 < i_1 < n_{\alpha}$) avec celle de numéro j_1 ($n_{\alpha}+1 < j_1 < n$), i_1 et j_1 étant les numéros les plus bas à permuter dans les deux groupes de particules ; puis, on continue de même avec les particules de numéros les plus bas i_2 et j_2 restant à transposer, etc., etc. (on effectue ainsi q transpositions successives). La permutation intermédiaire ainsi obtenue est nécessairement le produit de permutations bien définies des particules 1 à n_{α} et $n_{\alpha}+1$ à n respectivement. On passe finalement de la permutation intermédiaire à la permutation finale par les q transpositions que nous venons de définir.

(*) La formule (IX-49) généralise la deuxième égalité (9) du complément (IX-A).

Il est aussi possible de vérifier que chaque permutation des n particules apparaît une fois et une seule dans le second membre de (IX-49). Le signe $(-1)^q$ correspond au changement de parité imposé par les q permutations, et le facteur $n_\alpha!n_\beta!/n!$ aux factorielles qui figurent dans la définition des antisymétriseurs A .

β) Correspondance entre les états de deux systèmes physiques

Considérons maintenant deux systèmes physiques distincts :

- . un système \mathcal{S} de n_α particules identiques α , et n_β particules identiques β . L'espace des états de chaque particule est noté \mathcal{E} , et l'hamiltonien du système est H ;
- . un système \mathcal{S}' de $n = n_\alpha + n_\beta$ particules, toutes identiques entre elles, l'espace des états à une particule étant maintenant

$$\mathcal{E}' = \mathcal{E} \otimes \mathcal{E}_i \quad (\text{IX-50})$$

Dans ce produit tensoriel, \mathcal{E}_i est appelé "espace d'isospin", espace des états associé à une variable interne (dite d'isospin) de chaque particule ; cet espace a deux dimensions et possède une base orthonormée de kets notés $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ (\mathcal{E}_i aurait évidemment n dimensions si nous avions supposé l'existence de n espèces différentes $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ de particules dans \mathcal{S}).

Si aucune variable de spin n'est déjà incluse dans l'espace \mathcal{E} , il est possible d'assimiler spin et isospin en considérant $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ comme les deux états propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$ orthonormés d'une composante de spin, de valeurs propres respectives $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$. Sinon, la variable interne en question est en quelque sorte un "spin supplémentaire".

Désignons par H' l'hamiltonien de \mathcal{S}' ; nous supposons que H' n'agit pas dans l'espace \mathcal{E}_i des variables internes d'isospin de chaque particule.

Dans l'espace des états total \mathcal{F}'_n du système \mathcal{S}' , nous ne considérerons pour le moment que le sous-espace $\mathcal{F}'_{n_\alpha, n_\beta}$, invariant sous l'action de H' , où n_α particules sont dans l'état individuel interne $|\alpha\rangle$, n_β dans l'état individuel interne $|\beta\rangle$.

Montrons que, dans ces conditions, il existe une correspondance biunivoque entre les états de \mathcal{S} et ceux de \mathcal{S}' et que les éléments de ma-

trice de H ou H' entre états correspondants sont égaux. Un état de où toutes les particules sont dans des états individuels est défini ————— par la donnée de n_α états $|\psi_k\rangle$ pour les particules α , ainsi que n_β états $|\psi_k\rangle$ pour les particules β . La correspondance biunivoque tient simplement au fait que, pour le système \mathcal{F}' , les n_α premiers états peuvent être attribués à l'état interne $|\alpha\rangle$, les n_β autres à l'état interne $|\beta\rangle$. Elle s'écrit donc :

$$\begin{array}{l}
 \mathcal{F} : \quad \overbrace{|\alpha : k_1, \dots, k_{n_\alpha} ; \beta : k_{n_\alpha+1}, \dots, k_n\rangle}^{n_\alpha \quad n_\beta} \\
 \updownarrow \qquad \qquad \qquad \updownarrow \\
 \mathcal{F}' : \quad |k_{1,\alpha} ; \dots ; k_{n_\alpha,\alpha} ; k_{n_\alpha+1,\beta} ; \dots ; k_{n,\beta}\rangle
 \end{array}
 \tag{IX-51}$$

[l'expression détaillée du ket de \mathcal{F}' , en fonction d'états où les particules sont numérotées, est donnée ci-dessous en (IX-52-a)].

Il ne nous reste donc qu'à établir l'égalité des éléments de matrice de H entre kets de \mathcal{F}_n avec ceux de H' entre kets de \mathcal{F}'_n associés par la correspondance (IX-51).

Les kets de base du système \mathcal{F}' où les particules sont dans des états individuels s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 & |k_{1,\alpha} ; k_{2,\alpha} ; \dots ; k_{n_\alpha,\alpha} ; k_{n_\alpha+1,\beta} ; \dots ; k_{n,\beta} \rangle \\
 & = \sqrt{n!} \ A(1, \dots, n) \\
 & \quad |1 : k_{1,\alpha} ; 2 : k_{2,\alpha} ; \dots ; n_\alpha : k_{n_\alpha,\alpha} ; k_{n_\alpha+1,\beta} \dots n : k_{n,\beta} \rangle \tag{IX-52-a}
 \end{aligned}$$

L'élément de matrice de H' entre de tels kets antisymétrisés apparaîtra comme celui, entre kets à particules numérotées, de l'opérateur :

$$\begin{aligned}
 & n! \ A(1, \dots, n) \ H' \ A(1, \dots, n) \\
 & = n! \ H' \ A(1, \dots, n) \tag{IX-52-b}
 \end{aligned}$$

γ) Conséquences physiques

Il revient donc au même, d'un point de vue physique, de parler de particules de natures différentes ou de particules dont les états quantiques internes sont orthogonaux, du moins tant que l'on ne s'intéresse qu'à des opérateurs n'agissant pas sur cet état interne. Certes, la structure mathématique des kets de l'espace des états est différente dans les deux cas (dans le premier, l'antisymétrisation n'est à effectuer que par rapport à deux sous-ensembles de particules, alors que dans le second elle est totale). Il existe cependant une correspondance biunivoque entre les vecteurs d'état des deux systèmes, correspondance qui préserve les valeurs de nombreuses grandeurs physiques (celles qui ne changent pas la nature des particules dans le premier cas, leur état interne d'isospin dans le second).

Bien sûr, si l'on considère par exemple un état où une particule est décrite par une superposition linéaire d'états internes (d'isospin) différentes, comme il est parfaitement naturel pour toute variable interne, on lui associe dans le premier point de vue un ket à une particule où la nature de cette dernière est mal définie. Il n'est pas indispensable d'attribuer un sens physique à un ket de ce type mais il peut parfaitement se révéler un intermédiaire de calcul utile.

B - GRUPE SU(2) ET SYMETRIE D'ISOSPIN

Considérons donc un système constitué :

- . soit de deux types de particules α et β en nombres n_α et n_β variables, les particules α (comme les particules β) étant identiques entre elles ;
- . soit d'un nombre quelconque $n = n_\alpha + n_\beta$ de particules identiques pouvant se trouver dans l'état interne $|\alpha\rangle$ ou $|\beta\rangle$ (juxtaposé à l'état de spin si les particules considérées en possèdent un).

Nous avons vu que, dans de nombreux cas, de tels systèmes sont quasi équivalents.

(nous avons utilisé le fait que H commute avec toute permutation des n particules et la relation $A^2=A$). Remplaçons l'antisymétriseur $A(1, \dots, n)$ par son expression (IX-49) : il apparaît un certain nombre de termes comprenant q permutations $P_{i,j}$, mais tous sont nuls, sauf le terme $q=0$ [tout $P_{i,j}$ change en effet l'état interne d'une des particules, et comme H ne modifie pas cet état, on a le produit scalaire de deux kets orthogonaux]. Donc, dans (IX-49), seul le terme 1 dans l'accolade donne une contribution non-nulle. On remarque de même que l'élément de matrice cherché ne peut être non-nul que s'il y a exactement le même nombre de particules dans l'état interne $|\alpha\rangle$ dans le bra et le ket (et de même pour l'état interne $|\beta\rangle$). Ceci nous rapproche donc d'un élément de matrice, entre états de \mathcal{S} , d'un opérateur ne changeant pas la nature des particules. En fait, c'est exactement le résultat que nous obtenons : le coefficient $n!$ de (IX-49) se compense avec celui de (IX-52-b), et les coefficients $n_\alpha!$ et $n_\beta!$ sont précisément ceux nécessaires à la normalisation des états de \mathcal{S} .

Remarques

- (i) Nous avons raisonné en supposant que n_α particules de \mathcal{S}' ont toujours l'état interne $|\alpha\rangle$, n_β toujours l'état interne $|\beta\rangle$. Si l'on considère maintenant que n_α et n_β peuvent varier, l'espace des états de \mathcal{S} devient \mathcal{F}_n , qui est donc isomorphe à l'espace \mathcal{F}_n du système de particules de nature différentes, introduit au § 2-a). L'assimilation de la nature des particules α ou β à un nombre quantique interne est alors plus parfaite ; on voit qu'un opérateur de \mathcal{S}' n'agissant pas sur les spins correspondra à un opérateur de \mathcal{S} où toutes les particules jouent un rôle symétrique, quelle que soit leur nature.
- (ii) Pour le système \mathcal{S} , les opérateurs a_k et a_k^+ commutent toujours avec les b_k et b_k^+ : ce sont en effet des opérateurs agissant sur des variables différentes (l'espace des états de \mathcal{S} est le produit tensoriel de l'espace des états des particules α par celui des particules β). Pour le système \mathcal{S}' , ces opérateurs deviennent $a_{k\alpha}$, $a_{k\alpha}^+$, $a_{k\beta}$ et $a_{k\beta}^+$ et, si les particules sont des bosons, les deux premiers commutent encore avec les deux derniers. Cependant, si ce sont des fermions, la situation change puisqu'on a des relations du type :

$$a_{k\alpha} a_{k\beta} = - a_{k\beta} a_{k\alpha}$$

Des opérateurs de \mathcal{S} qui commutent peuvent donc correspondre à des opérateurs de \mathcal{S}' qui anticommulent.

1 - Algèbre d'opérateurs de symétrie

Les relations de commutation (IX-47) sont du même type que celles des composantes J_z , J_+ et J_- d'un moment cinétique \vec{J} :

$$[J_+, J_z] = -\hbar J_+ \quad (\text{IX-53-a})$$

$$[J_-, J_z] = \hbar J_- \quad (\text{IX-53-b})$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (\text{IX-53-c})$$

La correspondance suivante s'impose donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} M_{\alpha\beta} \leftrightarrow \hbar J_+ \\ M_{\beta\alpha} \leftrightarrow \hbar J_- \\ \Delta \leftrightarrow \hbar J_z \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (\text{IX-54-a}) \\ (\text{IX-54-b}) \\ (\text{IX-54-c}) \end{array}$$

Il est donc naturel d'introduire un opérateur K dont les composantes K_x , K_y , K_z sont définies par (*) :

$$\left\{ \begin{array}{l} K_x = \frac{1}{2} (M_{\alpha\beta} + M_{\beta\alpha}) \\ K_y = \frac{1}{2i} (M_{\alpha\beta} - M_{\beta\alpha}) \\ K_z = \Delta \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (\text{IX-55-a}) \\ (\text{IX-55-b}) \\ (\text{IX-55-c}) \end{array}$$

Grâce à (IX-39-c), on vérifie facilement que ces trois opérateurs sont hermitiques, et les relations (IX-47) donnent :

$$\left\{ \begin{array}{l} [K_x, K_y] = i K_z \\ [K_y, K_z] = i K_x \\ [K_z, K_x] = i K_y \end{array} \right. \quad (\text{IX-56})$$

qui sont les relations de commutation d'un moment cinétique (à un facteur \hbar près) apparaissant dans l'étude du groupe $R_{(3)}$ des rotations.

(*) La notation \bar{K} est simplement une écriture commode pour symboliser l'ensemble K_x, K_y, K_z ; nous évitons d'écrire \vec{K} pour éviter la confusion avec un opérateur vectoriel, satisfaisant à des relations de commutation avec \vec{J} bien définies.

Nous connaissons un ensemble très simple de matrices 2×2 satisfaisant ces relations de commutation : les matrices de Pauli $\sigma_x/2$, $\sigma_y/2$ et $\sigma_z/2$. Nous avons vu, [cf. chap. III, § B-3], qu'elles constituent l'algèbre de Lie du groupe $SU(2)$, dont elles engendrent tous les éléments $\mathcal{M}(\vec{a})$ par exponentiation :

$$\mathcal{M}(\vec{a}) = e^{-i \vec{a} \cdot \vec{\sigma}/2} \in SU(2) \quad (\text{IX-57-a})$$

où a désigne un ensemble de 3 paramètres réels (le module a de \vec{a} est compris entre 0 et 2π).

Les 3 opérateurs K_x , K_y , K_z engendrent donc une algèbre de Lie \mathcal{G}_3 , dite algèbre d'isospin, qui est isomorphe à celle de $SU(2)$. Par exponentiation, on obtient les opérateurs unitaires d'isospin :

$$\mathcal{Z}(\vec{a}) = e^{-i[a_x \bar{K}_x + a_y \bar{K}_y + a_z \bar{K}_z]} \quad (\text{IX-57-b})$$

qui constituent un groupe d'isospin $\mathcal{G}_{\text{isospin}}$, dont les éléments dépendent de 3 paramètres réels (a_x , a_y et a_z).

Il n'est donc pas nécessaire de construire de nouveaux raisonnements dans notre étude de la symétrie d'isospin : ceux qui ont été faits pour le groupe des rotations $R_{(3)}$, ou le groupe $SU(2)$ s'appliquent sans aucun changement.

Remarques

(i) L'action d'un opérateur de rotation d'isospin $\mathcal{Z}(\vec{a})$ sur un ket où n_α particules sont de nature α et n_β de nature β donne en général (si a_x et a_y ne sont pas nuls) une superposition linéaire de kets où n_α et n_β ont varié. Si l'on préfère éviter la manipulation de tels kets, on peut parfaitement, dans toute la suite, ignorer les opérateurs $\mathcal{Z}(\vec{a})$ et le groupe d'isospin, le seul point essentiel d'un point de vue physique étant l'existence de l'algèbre de Lie définie par (IX-47) ou la relation équivalente (IX-56).

(ii) L'isomorphisme des algèbres de Lie $SU(2)$ et $\mathcal{G}_{\text{isospin}}$ entraîne qu'il existe un homomorphisme qui fait passer du premier groupe au second. Si $\mathcal{G}_{\text{isospin}}$ est simplement connexe, comme $SU(2)$, cet homomorphisme devient un isomorphisme (cas où le nombre $n = n_\alpha + n_\beta$ particules est impair).

2. Similarité entre spin et isospin

D'après (IX-54) et (IX-55), on a la correspondance :

$$\left\{ \begin{array}{l} K_+ = K_x + i K_y \\ K_- = K_x - i K_y \\ K_z = \Delta \end{array} \right. \quad \leftrightarrow \quad \begin{array}{l} \hbar J_+ \\ \hbar J_- \\ \hbar J_z \end{array} \quad \text{(IX-58)}$$

Montrons que cette correspondance préserve bien celle écrite en (IX-51) entre états des systèmes \mathcal{S} et \mathcal{S}' lorsque l'on interprète \vec{J} comme le "moment angulaire total d'isospin" des particules de \mathcal{S}' . Pour ce dernier système, introduisons les opérateurs d'isospin \bar{I} à une particule par :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \bar{I}_z |\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2} |\alpha\rangle & \bar{I}_z |\beta\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\beta\rangle \\ \bar{I}_+ |\alpha\rangle = 0 & \bar{I}_+ |\beta\rangle = \hbar |\alpha\rangle \\ \bar{I}_- |\alpha\rangle = |\beta\rangle & \bar{I}_- |\beta\rangle = 0 \end{array} \right. \quad \text{(IX-59-a)}$$

ce qui revient à assimiler $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ aux deux états propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$ de la composante S_z d'un spin 1/2 :

$$\left\{ \begin{array}{l} |\alpha\rangle \leftrightarrow |+\rangle \\ |\beta\rangle \leftrightarrow |-\rangle \end{array} \right. \quad \text{(IX-59-b)}$$

Nous posons ensuite :

$$\bar{J} = \sum \bar{I} \quad \text{(IX-59-c)}$$

où la somme porte sur toutes les particules constituant \mathcal{S}' .

Si l'on se reporte aux définitions (IX-27) ^{et (IX-29)} des opérateurs N et M, on vérifie aussitôt que l'état de \mathcal{S} écrit en (IX-51) est ket propre de K_z avec la valeur propre $\frac{1}{2}(n_\alpha - n_\beta)$, celui de \mathcal{S}' étant ket propre de J_z $\frac{\hbar}{2}(n_\alpha - n_\beta)$.

Pour l'opérateur $K_+ = M_{\alpha\beta}$, son effet est donné par l'équation (20) du complément IX-A, où les radicaux valent un puisque nous étudions ici des fermions. Le ket correspondant pour \mathcal{S}' sera donc :

$$(-i)^{n_\alpha} \left\{ |k_{n_\alpha+1,\alpha}; k_{1,\alpha}; k_{2,\alpha}; \dots; k_{n_\alpha,\alpha}; k_{n_\alpha+2,\beta}; \dots; k_{n,\beta} \rangle - \sum_{k=k_{n_\alpha+2}}^{k_n} |k,\alpha; k_{1,\alpha}; \dots; k_{n_\alpha,\alpha}; k_{n_\alpha+2,\beta}; k_{n_\alpha+1,\beta}; \dots; k_{n,\beta} \rangle \right\} \quad (IX-60)$$

Or, en termes d'opérateurs de création a^+ et d'annihilation a des particules de \mathcal{F}' , J_+ s'écrit

$$J_+ = \hbar \sum_k a^+(k,\alpha) a(k,\beta) \quad (IX-61)$$

dont l'action sur le ket de \mathcal{F}' écrit en (IX-51) est facilement calculable : lorsque $k=k_{n_\alpha+1}$, on fait venir le nombre quantique $k_{n_\alpha+1}$ en tête, ce qui introduit un signe $(-1)^{n_\alpha}$, et l'on obtient le premier terme de (IX-60) ; lorsque $k = k_{n_\alpha+2}, \dots, k_n$ on commence par permuter les états k et $k_{n_\alpha+1}$ (d'où un changement supplémentaire de signe), puis on fait la même opération que précédemment. Au total, le ket obtenu est donc exactement^(*) celui écrit en (IX-60).

En ce qui concerne les opérateurs $M_{\beta\alpha}$ et J_- , il n'est pas nécessaire de reprendre le raisonnement puisqu'ils sont respectivement hermitiques conjugués de $M_{\alpha\beta}$ et J_+ (l'égalité des éléments de matrice pour un couple d'opérateurs entraîne automatiquement, par conjugaison complexe et échange du bra et du ket, l'égalité pour l'autre couple) (**).

3. Multiplets d'isospin

Dans l'espace \mathcal{F}_n , construisons une "base standard d'isospin", exactement comme nous avons précédemment construit (au chapitre VI) une base standard adaptée à l'étude du moment cinétique. L'opérateur $[\bar{K}]^2$ est défini par :

(*) L'introduction des coefficients $(\epsilon)^{N_\alpha}$ dans les définitions de $M_{\alpha\beta}$ et $M_{\beta\alpha}$ [relations (IX-29)] évite à ce stade l'apparition d'un facteur de phase variable $(\epsilon)^{N_\alpha}$ dans le cas des fermions.

(**) En faisant agir l'opérateur $\sum_k a^+(k,\beta) a(k,\alpha)$ sur le ket de \mathcal{F}' écrit en (IX-51), on voit apparaître un facteur $(-1)^{n_\alpha-1} = (-1)^{n_\alpha+1}$ qui correspond bien au facteur $(\epsilon)^{N_\alpha+1}$ de (IX-39-b).

$$\begin{aligned} |\bar{K}|^2 &= (K_x)^2 + (K_y)^2 + (K_z)^2 \\ &= \frac{1}{4} (N_\alpha - N_\beta)^2 + \frac{1}{2} (M_{\alpha\beta} M_{\beta\alpha} + M_{\beta\alpha} M_{\alpha\beta}) \end{aligned} \quad (\text{IX-62})$$

et ses valeurs propres sont de la forme

$$K(K + 1)$$

où K est entier ou demi entier.

Le fait que H commute avec K_z et $|\bar{K}|^2$ permet de construire une base standard séparément à l'intérieur de chaque sous-espace propre de H, de valeur propre E. On obtient ainsi des kets :

$$|\sigma, E, K, M_K \rangle$$

où E, K, et M_K spécifient les valeurs propres respectives de H, $|\bar{K}|^2$ et K_z ; la réunion de ces kets pour toutes les valeurs possibles de ces trois nombres fournit une base standard dans l'espace total. L'indice σ sert à distinguer les kets orthogonaux associés aux mêmes valeurs de E, K et M_K ; il n'est donc pas nécessaire si H, K et K_z forment un E.C.O.C. (c'est-à-dire si, du point de vue de la symétrie d'isospin seule, aucune dégénérescence ne se produit). Comme pour toute base standard, on a :

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{K}_z |\sigma, E, K, M_K \rangle &= M_K |\sigma, E, K, M_K \rangle \\ |\bar{K}|^2 |\sigma, E, K, M_K \rangle &= K(K + 1) |\sigma, E, K, M_K \rangle \end{aligned} \right. \quad (\text{IX-63-a})$$

avec

$$M_K = K, K-1, K-2, \dots, -K \quad (\text{IX-63-b})$$

(K et M_K sont tous deux, soit entiers, soit demi entiers). De plus :

$$K \pm |\sigma, E, K, M_K \rangle = \sqrt{K(K+1) - M_K(M_K \pm 1)} |\sigma, E, K, M_K \pm 1 \rangle \quad (\text{IX-64})$$

Enfin, pour la base standard choisie, on peut écrire :

$$H |\sigma, E, K, M_K \rangle = E |\sigma, E, K, M_K \rangle \quad (\text{IX-65})$$

Rappelons que K_z est associé à la différence $n_\alpha - n_\beta$:

$$M_K \leftrightarrow \frac{1}{2} (n_\alpha - n_\beta) \quad (\text{IX-66})$$

et que K_+ et K_- changent à la fois n_α et n_β , tout en conservant leur somme [$|\sigma, E, K, M_K\rangle$ et $|\sigma, E, K, M_{K\pm 1}\rangle$ décrivent donc des systèmes physiques constitués de particules de natures différentes].

Regroupons ensemble les $(2K+1)$ états associés à des valeurs identiques de σ, E et K ; ils forment un ensemble d'états dégénérés que l'on appelle "multiplet d'isospin". Le sous-espace correspondant noté $\mathcal{F}(E, \sigma, K)$, est stable sous l'action de toutes les composantes de \bar{K} ; ses composantes y sont représentées par des matrices hermitiques $(2K+1) \times (2K+1)$ dont les commutateurs satisfont les relations (IX-56). On dit que ces matrices fournissent une représentation de l'algèbre de Lie $\mathcal{L}_3(\star)$. L'espace $\mathcal{F}(E, \sigma, K)$ n'étant pas la somme directe de deux sous-espaces stables sous l'action de tous les opérateurs de \mathcal{L}_3 (espace irréductible), la représentation est dite "irréductible" (**).

Sur la figure 2, les états propres de H associés à un même multiplet d'isospin sont représentés par $(2K+1)$ segments sur une même ligne horizontale (ils ont même énergie), chacun tombant dans un sous-espace $\mathfrak{g}_{n_\alpha, n_\beta}^{A, S}$ avec :

$$\begin{array}{lll} n_\alpha = \frac{n+K}{2}, n_\beta = \frac{n-K}{2} & & M_K = K \\ \\ n_\alpha = \frac{n+K-1}{2}, n_\beta = \frac{n-K+1}{2} & & M_K = K-1 \\ \\ \vdots & & \vdots \\ \\ n_\alpha = \frac{n-K}{2}, n_\beta = \frac{n+K}{2} & & M_K = -K \end{array}$$

(\star) Rappelons que le produit (opération interne) dans l'algèbre de Lie est défini par le commutateur des opérateurs (cf. Chap. III, § A-2-c). Cette notion de représentation d'une algèbre est donc la même que pour un groupe.

(**) Les mêmes notions s'appliquent évidemment au groupe \mathcal{G} (isospin) : dans $\mathcal{F}(E, \sigma, K)$, ses éléments $Z(\vec{a})$ définis en (IX-57-b) sont représentés de façon irréductible par un ensemble de matrices unitaires $(2K+1) \times (2K+1)$.

Partant d'un état stationnaire d'énergie quelconque donnée, associé à un système de n_α particules α et n_β particules β , l'action des opérateurs $K_+ = M_{\alpha\beta}$ ou $K_- = M_{\alpha\beta}$ permet toujours de construire d'autres kets propres de H qui soient non-nuls, sauf éventuellement si $n_\alpha = n_\beta$, cas auquel l'état choisi constitue un singulet d'isospin (de même, pour un opérateur de moment cinétique, $J_+ |\tau, J, M\rangle$ ne peut être un ket nul que si $M = J$, $J_- |\tau, J, M\rangle$ un ket nul que si $M = -J$).

Remarques

(i) Il existe en général d'autres bases standard que celle des vecteurs propres de H que nous avons introduits (c'est le cas si l'indice σ prend plusieurs valeurs distinctes). Dans une telle base standard quelconque $(|\xi, K, M_K\rangle)$ on peut utiliser le théorème de Wigner-Eckart pour calculer les éléments de matrice de H (qui est un "scalaire d'isospin" puisqu'il commute avec toute composante de \bar{K}) :

$$\begin{aligned} & \langle \xi, K, M_K | H | \xi', K', M_{K'} \rangle \\ &= \delta_{M_K M_{K'}} \delta_{K K'} \langle \xi, K || M || \xi', K' \rangle \end{aligned} \quad (\text{IX-67})$$

Le $\delta_{M_K M_{K'}}$ traduit simplement le fait que H ne change pas la nature des particules.

On a :

$$|\sigma, E, K, M_K\rangle = \sum_{\xi} C_{\xi}(E, K, M_K) |\xi, K, M_K\rangle \quad (\text{IX-68})$$

(le changement de base standard ne "mélange" pas les différentes valeurs de K et M_K).

De façon générale, le théorème de Wigner-Eckart montre que tout opérateur scalaire [par exemple l'opérateur \bar{K}^2 défini en (IX-62)] n'a d'éléments de matrice qu'entre kets où M_K a la même valeur ; ceci implique qu'un tel opérateur ne change pas la nature des particules s'il commute avec $N = N_\alpha + N_\beta$.

(ii) Soit $|E, M_K\rangle$ un vecteur propre commun à H et \bar{K}_Z . L'action de \bar{K}_+ sur ce ket donne un ket orthogonal, non-nul, de même valeur propre E , sauf M_K est positif (ou nul) et si $|E, M_K\rangle$ est ket propre de $[\bar{K}]^2$ de valeur propre $M_K(M_K+1)$. De même l'action de \bar{K}_- ne peut donner un ket nul que si M_K est négatif ou nul et si $|E, M_K\rangle$ est vecteur propre de $[\bar{K}]^2$ avec la valeur propre $M_K(M_K+1)$

(iii) La relation (IX-56) nous permet immédiatement de prévoir les valeurs de K accessibles à un système de n particules. On a en effet :

$$M_K = \frac{n}{2}, \frac{n}{2} - 1, \dots, -\frac{n}{2} \quad (\text{IX-69})$$

Le nombre quantique K a donc la même parité que n et sa valeur maximale a priori possible est précisément n .

(iv) En passant de (IX-46) à (IX-47), nous avons abandonné l'opérateur N car il commute, non seulement avec H , mais avec tous les opérateurs de \mathcal{L}_3 (c'est un opérateur central). Comme H , l'opérateur N est un scalaire d'isospin, et ses éléments de matrice satisfont aux mêmes règles de sélection: dans tout $\mathcal{F}(\sigma, E, K)$, N est représenté par une matrice scalaire (éléments diagonaux tous égaux, éléments non-diagonaux nuls).

Sans utiliser le théorème de Wigner-Eckart, on peut d'ailleurs retrouver immédiatement ce résultat : si la matrice représentant N dans $\mathcal{F}(\sigma, E, K)$ admettait deux valeurs propres différentes, chacune d'elles définirait un sous-espace propre de $\mathcal{F}(\sigma, E, K)$ qui serait invariant sous l'action de K (puisque ses trois composantes commutent avec N) ; or, c'est impossible puisque $\mathcal{F}(\sigma, E, K)$ est irréductible.

On peut, bien sûr, inclure l'opérateur N dans l'algèbre de Lie considérée (qui devient \mathcal{L}_4) ; le groupe \mathcal{G}_4 correspondant dépend alors de quatre paramètres, et ses opérateurs s'écrivent :

$$W(\vec{a}, \vec{b}) = e^{-i\vec{b} \cdot N} Z(\vec{a}) \quad (\text{IX-70})$$

où $Z(\vec{0})$ est défini par (IX-57-b). Dans chaque $\mathcal{F}(\sigma, K)$, la contribution de $e^{-i\vec{b} \cdot N}$ est un facteur de phase $e^{-i\vec{b} \cdot n}$. On dit parfois que \mathcal{G}_4 est le produit (tensoriel) du groupe d'isospin par un "groupe de phase".

4. Exemples d'application

Prenons un atome dans l'approximation où toutes les interactions dépendant des spins électroniques sont ignorées. Les considérations précédentes montrent que ses niveaux d'énergie se regroupent en multiplets de $(2K+1)$ niveaux, K étant pair ou impair suivant que le nombre d'électrons est pair ou impair. Dans cet exemple, cette classification n'apporte rien de très nouveau : K et M_K s'identifient ici simplement aux nombres quantiques S et M_S associés au spin total de l'ensemble des électrons.

Un exemple d'application plus intéressant est la symétrie d'isospin en physique nucléaire : si l'on ignore dans un noyau les interactions électromagnétiques entre nucléons, moins importantes que les interactions fortes, l'indépendance de charge de ces dernières fait que proton et neutron jouent un rôle symétrique. Dans un tel schéma, tous les niveaux d'énergie des noyaux sont regroupés en multiplets d'isospin de $(2K+1)$ niveaux dégénérés. On peut remarquer que le nombre M_K prend ici une signification physique simple, directement reliée à la charge électrique Q système considéré, puisque :

$$Q = q_p N_\alpha = q_p \left(K_z + \frac{1}{2}N \right) \quad (\text{IX-71})$$

On trouvera dans le complément IX-B l'étude d'un cas simple, celui où le nombre de nucléons (protons ou neutrons) est $n=2$; nous renvoyons à un traité de physique nucléaire pour la discussion d'exemples plus complexes.

C - SYMETRIE SU(3)

Nous allons maintenant généraliser ce qui précède au cas où le nombre d'espèces de particules est trois, α , β et γ . Nous noterons respectivement a_k , b_k , c_k les opérateurs de destruction d'une particule dans l'état individuel $|\psi_k\rangle$, a_k^+ , b_k^+ et c_k^+ les opérateurs de création correspondants. Leurs relations de commutation sont du même type que celles écrites en (IX-32). Généralisant (IX-27), nous introduisons les opérateurs :
 et (IX-33)

$$\begin{cases} N_\alpha &= \sum_k a_k^+ a_k \\ N_\beta &= \sum_k b_k^+ b_k \\ N_\gamma &= \sum_k c_k^+ c_k \end{cases} \quad \text{(IX-72)}$$

ainsi que (*) :

$$\begin{aligned} M_{\alpha\beta} &= (\epsilon)^{N_\alpha} \sum_k a_k^+ b_k & M_{\beta\alpha} &= \sum_k b_k^+ a_k (\epsilon)^{N_\alpha} \\ M_{\beta\gamma} &= (\epsilon)^{N_\beta} \sum_k b_k^+ c_k & M_{\gamma\beta} &= \sum_k c_k^+ b_k (\epsilon)^{N_\beta} \\ M_{\gamma\alpha} &= (\epsilon)^{N_\gamma} \sum_k c_k^+ a_k & M_{\alpha\gamma} &= \sum_k a_k^+ c_k (\epsilon)^{N_\gamma} \end{aligned} \quad \text{(IX-73)}$$

On a :

$$\begin{cases} (M_{\alpha\beta})^+ &= M_{\beta\alpha} \\ (M_{\beta\gamma})^+ &= M_{\gamma\beta} \\ (M_{\gamma\alpha})^+ &= M_{\alpha\gamma} \end{cases} \quad \text{(IX-74)}$$

Lorsque toutes les particules, quelle que soit leur espèce, jouent le même rôle dans l'opérateur H, on a, comme plus haut :

$$[H, N_{\alpha,\beta,\gamma}] = 0 \quad \text{(IX-75)}$$

(*) Comme dans le § B précédent, les espèces α , β et γ ne jouent pas exactement le même rôle, du fait des $(\epsilon)^{N_{\alpha,\beta,\gamma}}$ dans les définitions (IX-73). Ces dernières respectent cependant une symétrie par permutation circulaire des trois espèces de particules.

et :

$$[H, M] = 0 \quad (IX-76)$$

[où M symbolise l'un quelconque des six opérateurs définis en (IX-73)].

Des calculs similaires à ceux du § B donnent :

$$\begin{aligned} [N_\alpha, N_\beta] &= 0 \\ [M_{\alpha\beta}, N_\alpha] &= - [M_{\alpha\beta}, N_\beta] = - M_{\alpha\beta} \\ [M_{\alpha\beta}, M_{\beta\alpha}] &= N_\alpha - N_\beta \end{aligned} \quad (IX-77-a)$$

avec, bien sûr :

$$[M_{\alpha\beta}, N_\gamma] = [M_{\beta\alpha}, N_\gamma] = 0 \quad (IX-77-b)$$

A ces relations il faut ajouter celles obtenues par permutation circulaire de α , β et γ . Posons :

$$N = N_\alpha + N_\beta + N_\gamma \quad (IX-78)$$

On définit ainsi un opérateur qui commute avec tous les autres :

$$\begin{cases} [N, N_{\alpha,\beta,\gamma}] = 0 & (IX-79-a) \\ [N, M] = 0 & (IX-79-b) \end{cases}$$

Les relations précédentes ne nous donnent pas tous les commutateurs entre opérateurs M et N ; il nous faut encore calculer les commutateurs entre opérateurs M faisant intervenir les trois espèces α , β et γ , tels que :

$$[M_{\alpha\beta}, M_{\alpha\gamma}] \quad \text{ou} \quad [M_{\beta\alpha}, M_{\gamma\beta}]$$

Or :

$$\begin{aligned} [(\epsilon)^{N_\alpha} a_k^+ b_k, a_{k'}^+ c_{k'} (\epsilon)^{N_\gamma}] \\ = (\epsilon)^{N_\alpha} [a_k^+ b_k a_{k'}^+ c_{k'} - \epsilon a_{k'}^+ c_{k'} a_k^+ b_k] \epsilon^{N_\gamma} \end{aligned} \quad (IX-80)$$

[le ϵ supplémentaire du second terme provient de ce que nous avons changé l'ordre de $(\epsilon)^{N_\alpha}$ et $a_{k'}^+$; cf. relations (IX-38)]. Comme :

$$\begin{aligned} a_k^+ b_k a_{k'}^+ c_{k'} - \epsilon a_{k'}^+ c_{k'} a_k^+ b_k \\ = (a_k^+ a_{k'}^+ - \epsilon a_{k'}^+ a_k^+) b_k c_{k'} = 0 \end{aligned} \quad (IX-81)$$

une sommation sur k et k' donne (*) :

$$[M_{\alpha\beta} , M_{\alpha\gamma}] = 0 \qquad [M_{\alpha\gamma} , M_{\alpha\beta}] = 0 \qquad (IX-82-a)$$

et, par permutation circulaire, on montre la nullité de tous les commutateurs entre opérateurs M où le premier indice α, β ou γ est répété. Prenant ensuite les relations hermitiques conjuguées et utilisant (IX-74), on montre ensuite que les commutateurs où c'est le second indice qui est répété. Il ne reste donc plus à calculer que les commutateurs du type $[M_{\alpha\beta} , M_{\beta\gamma}]$ ou $[M_{\beta\alpha} , M_{\gamma\beta}]$. Comme :

$$\begin{aligned} & [(\epsilon)^{N_\alpha} a_k^+ b_k , (\epsilon)^{N_\beta} b_{k'}^+ c_{k'}] \\ &= (\epsilon)^{N_\alpha+N_\beta+1} (a_k^+ b_k b_{k'}^+ c_{k'} - \epsilon b_{k'}^+ c_{k'} a_k^+ b_k) \\ &= (\epsilon)^{N_\alpha+N_\beta+1} a_k^+ c_{k'} (b_k b_{k'}^+ - \epsilon b_{k'}^+ b_k) \\ &= \delta_{kk'} a_k^+ c_{k'} (\epsilon)^{N_\alpha+N_\beta} \end{aligned}$$

on obtient, par sommation sur k et k' :

$$[M_{\alpha\beta} , M_{\beta\gamma}] = (\epsilon)^N M_{\alpha\gamma} \qquad (IX-82-b)$$

Par conjugaison hermitique, il vient enfin :

$$[M_{\beta\alpha} , M_{\gamma\beta}] = - (\epsilon)^N M_{\gamma\alpha} \qquad (IX-82-c)$$

(*) Sans les facteurs $(\epsilon)^{N_\alpha, \beta, \gamma}$ dans les définitions (IX-73) des opérateurs M , nous n'aurions pas pu obtenir l'égalité (IX-82-a) pour des fermions. En effet, il serait apparu dans (IX-81) l'expression $a_k^+ a_{k'}^+ - a_{k'}^+ a_k^+$ qui vaut $2 a_k^+ a_{k'}^+$ pour des fermions, de sorte qu'aucune simplification ne se serait produite (le commutateur de $M_{\alpha\beta}$ avec $M_{\alpha\gamma}$ ne s'exprime plus en fonction des M et des N).

Un autre point de vue, prolongeant celui du § A-3, est de considérer un système constitué, non de particules de natures différentes (α, β, γ) , mais par un ensemble de particules toutes identiques pour lesquelles 3 états internes $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ et $|\gamma\rangle$ sont accessibles ; la variable interne correspondante est appelée "hyperspin" [nous réservons le nom d'isospin pour la symétrie $SU(2)$ à deux états internes]. Tous les opérateurs de création et d'annihilation satisfont alors à des relations d'anticommuration (pour des fermions) de sorte que :

$$\begin{aligned} [a_k^+ b_k , a_{k'}^+ c_{k'}] &= a_k^+ b_k a_{k'}^+ c_{k'} - a_{k'}^+ c_{k'} a_k^+ b_k \\ &= a_k^+ a_{k'}^+ b_k c_{k'} + a_{k'}^+ a_k^+ b_k c_{k'} = 0 \end{aligned}$$

L'introduction des facteurs $(\epsilon)^{N_\alpha, \beta, \gamma}$ dans la définition des opérateurs M devient alors inutile.

1 - Opérateur de symétrie

Poursuivant toujours l'analogie avec le § B, posons cf. (IX-55) :

$$\left\{ \begin{array}{l} K_Z^{(1)} = \frac{1}{2} (N_\alpha - N_\beta) \\ K_Z^{(2)} = \frac{1}{2} (N_\beta - N_\gamma) \\ K_Z^{(3)} = \frac{1}{2} (N_\gamma - N_\alpha) \end{array} \right. \quad (\text{IX-83-a})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} K_X^{(1)} = \frac{1}{2} (M_{\alpha\beta} + M_{\beta\alpha}) \\ K_X^{(2)} = \frac{1}{2} (M_{\beta\gamma} + M_{\gamma\beta}) \\ K_X^{(3)} = \frac{1}{2} (M_{\gamma\alpha} + M_{\alpha\gamma}) \end{array} \right. \quad (\text{IX-83-b})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} K_Y^{(1)} = \frac{1}{2i} (M_{\alpha\beta} - M_{\beta\alpha}) \\ K_Y^{(2)} = \frac{1}{2i} (M_{\beta\gamma} - M_{\gamma\beta}) \\ K_Y^{(3)} = \frac{1}{2i} (M_{\gamma\alpha} - M_{\alpha\gamma}) \end{array} \right. \quad (\text{IX-83-c})$$

L'opérateur $\bar{K}^{(1)}$ n'est autre que l'opérateur d'isospin \bar{K} déjà introduit, les opérateurs $\bar{K}^{(2)}$ et $\bar{K}^{(3)}$ jouent des rôles analogues pour les autres espèces de particules (*). Si les six composantes $K_{X,Y}^{(1,2,3)}$ des \bar{K} sont des combinaisons linéaires indépendantes des M, ce n'est pas le cas des trois composantes K_Z puisque :

$$K_Z^{(1)} + K_Z^{(2)} + K_Z^{(3)} = 0 \quad (\text{IX-83-d})$$

Trois opérateurs indépendants seraient obtenus en prenant N et deux quelconques parmi les trois opérateurs $K_Z^{(1,2,3)}$.

Les relations de commutation entre diverses composantes d'un même opérateur $\bar{K}^{(i)}$ ont déjà été calculées au § B :

$$[K_X^{(i)}, K_Y^{(i)}] = i K_Z^{(i)} \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{IX-83-e})$$

(*) L'indice (1) est associé au couple $\alpha\beta$ l'indice (2) au couple $\beta\alpha$ et l'indice (3) au couple $\gamma\alpha$.

(ainsi que les deux autres relations obtenues par permutation circulaire des indices $x; y; z$). Il est facile d'écrire, à partir des définitions (IX-83) et des équations (IX-77) et suivantes, les relations de commutation entre composantes d'opérateurs $\bar{K}^{(i)}$ différents. Nous ne le ferons pas car il est plus commode de poser :

$$K_{\pm}^{(i)} = \frac{1}{2} (K_x^{(i)} \pm i K_y) \quad (\text{IX-84})$$

(par exemple, $K_+^{(1)} = M_{\alpha\beta}$, $K_-^{(1)} = M_{\beta\alpha}$, etc). On obtient alors les relations de commutation :

$$\begin{aligned} [K_z^{(i)}, K_{\pm}^{(i)}] &= \pm K_{\pm}^{(i)} \\ [K_+^{(i)}, K_-^{(i)}] &= 2 K_z^{(i)} \end{aligned} \quad (\text{IX-85-a})$$

$$[K_z^{(i)}, K_z^{(j)}] = 0 \quad (\text{IX-85-b})$$

ainsi que [cf. relations (IX-77-a)] :

$$[K_{\pm}^{(i)}, K_z^{(j)}] = \pm \frac{1}{2} K_{\pm}^{(i)} \quad \text{si } i \neq j \quad (\text{IX-85-c})$$

Les relations de commutation précédentes sont le point de départ des raisonnements qui vont suivre. Bien que nous n'en ayons pas besoin pour la suite, nous pouvons compléter la liste de ces relations de commutation en écrivant [cf. relations (IX-82-a)] :

$$[K_+^{(i)}, K_-^{(j)}] = 0 \quad \text{si } i \neq j \quad (\text{IX-85-d})$$

et, enfin, (lorsque $i \neq j \neq \ell$) [cf. relations (IX-82)] :

$$\begin{cases} [K_+^{(i)}, K_+^{(j)}] = \epsilon_{ij\ell} (\epsilon)^N K_-^{(\ell)} \\ [K_-^{(i)}, K_-^{(j)}] = -\epsilon_{ij\ell} (\epsilon)^N K_+^{(\ell)} \end{cases} \quad (\text{IX-85-e})$$

Tous les opérateurs K qui ont été introduits commutent avec H lorsque les différentes particules jouent un rôle symétrique dans H , quelle que soit leur nature. Nous avons défini neuf opérateurs K , mais la relation (IX-83-d) entraîne que seulement huit d'entre-eux sont indépendants. Les opérateurs engendrent une algèbre de Lie \mathfrak{L}_8 de dimensions 8 (*), associée

(*) \mathfrak{L}_8 est l'espace engendré par les combinaisons linéaires réelles des composantes x, y, z des opérateurs $K^{(i)}$.

Le facteur $(\epsilon)^N$ qui apparaît dans (IX-82-b et c) ou (IX-85-e) n'est pas gênant ; on peut par exemple, considérer que le nombre total n de particules est fixé, et ce facteur perd son caractère d'opérateur.

au groupe \mathcal{G} (hyperspin) d'opérateurs de symétrie

$$W(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = e^{-i[\vec{a} \cdot \vec{K}^{(1)} + \vec{b} \cdot \vec{K}^{(2)} + \vec{c} \cdot \vec{K}^{(3)}]} \quad (\text{IX-86})$$

où la notation $\vec{a} \cdot \vec{K}^{(i)}$ symbolise l'expression :

$$\vec{a} \cdot \vec{K}^{(i)} = a_x K_x^{(i)} + a_y K_y^{(i)} + a_z K_z^{(i)}$$

[Les opérateurs W dépendent en fait de huit paramètres puisque la somme $a_z + b_z + c_z$ disparaît de (IX-86)]. Les mêmes remarques peuvent être faites concernant le sens physique des opérateurs W que pour les opérateurs d'isospin $Z(\vec{a})$.

Tous les sous-espaces propres de H sont stables sous l'action de l'ensemble des éléments, soit de \mathcal{L}_8 soit de \mathcal{G} (hyperspin). Dans ces sous-espaces propres, on peut faire apparaître des représentations irréductibles de l'algèbre \mathcal{L}_8 d'opérateurs K , tout-à-fait analogues aux représentations irréductibles de l'algèbre d'isospin \mathcal{L}_3 , introduites au § B. Il est donc important de connaître et de classer les représentations irréductibles de \mathcal{L}_8 et \mathcal{G} (hyperspin), ce qui nous permettra de connaître le type de dégénérescence imposée par la commutation de H avec tous les K . Il est clair sur (IX-85) que les relations de commutation ne sont pas simplement la juxtaposition de celles de trois opérateurs K d'isospin : la structure de \mathcal{L}_8 produit en quelque sorte une "imbrication" des trois symétries d'isospin les unes dans les autres.

Remarque : Nous avons délibérément ignoré l'opérateur N , qui pourtant lui aussi commute avec H . La raison en est que, comme dans le cas étudié au § B, l'adjonction de N revient à celle d'un "groupe de phase", sans conséquences physiques.

2. Algèbre de Lie du groupe SU(3)

a) Calcul des matrices

Il est commode, pour fixer les idées, d'associer des matrices aux opérateurs K . Une façon simple de le faire est de prendre un sous-espace stable sous l'action des K , le sous-espace à une particule unique engendrée par les kets :

$$\begin{cases} |u_1\rangle = |\psi_k\rangle \otimes |\alpha\rangle \\ |u_2\rangle = |\psi_k\rangle \otimes |\beta\rangle \\ |u_3\rangle = |\psi_k\rangle \otimes |\gamma\rangle \end{cases} \quad (\text{IX-87})$$

(seul l'état d'hyperspin varie). Il est alors très simple d'obtenir les matrices associées aux opérateurs de symétrie dans le sous-espace :

l'ordre des kets de base étant celui de (IX-87) :

$$(K_Z^{(1)}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_Z^{(2)}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$(K_Z^{(3)}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(K_+^{(1)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_-^{(1)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_+^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_-^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_+^{(3)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_-^{(3)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ou encore :

$$(K_X^{(1)}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_Y^{(1)}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_X^{(2)}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_Y^{(2)}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_x^{(3)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(K_y^{(3)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(IX-88-b)

Si l'on élimine l'un des $K_z^{(i)}$, $i = 3$ par exemple, on obtient ainsi un ensemble de huit matrices linéairement indépendantes, de trace nulle, cet ensemble de matrices est par construction isomorphe à \mathcal{L}_8 , dont il fournit une "représentation" (nous allons montrer qu'elle est irréductible).

On voit facilement sur (IX-88) que, par combinaisons linéaires avec des coefficients réels, les huit matrices en question engendrent l'ensemble des matrices hermitiques 3x3 de trace nulle. En d'autres termes, elles engendrent l'algèbre de Lie du groupe SU(3), groupe des matrices 3x3 unitaires, de déterminant égal à 1(★). Ceci justifie la dénomination "symétrie SU(3)" qui est employée pour le type de symétrie qui nous intéresse ici.

L'irréductibilité de la représentation peut être démontrée très rapidement : si elle était réductible, il existerait un vecteur de l'espace à trois dimensions qui serait invariant (en direction) sous l'effet de tout opérateur hermitique ; or il est facile de construire un opérateur hermitique qui change une direction quelconque de l'espace à trois dimensions.

Remarque : Si nous avions conservé l'opérateur N parmi les K, nous aurions obtenu une matrice de trace non-nulle ; l'algèbre de Lie serait alors celle du groupe U(3) [plus de restriction sur le déterminant des matrices unitaires], de dimension 9 .

b) Sous-groupes

Il n'est possible de voir directement, par exemple sur les matrices (IX-88) que \mathcal{L}_8 peut être décomposé de plusieurs façons en sous-algèbres engendrant chacune des sous-groupes de \mathcal{G} (hyperspin). Par exemple,

(★) Pour le voir, on peut utiliser le même raisonnement que celui effectué pour SU(2) au § B-3 du chapitre III.

les trois composantes de $\bar{K}^{(1)}$ engendrent \mathcal{L}_3 et le groupe d'isospin discuté au § B [on fait $b=c=0$ dans les opérateurs W définis en (IX-86), et l'on obtient $Z(a)$]. Deux autres sous-algèbres \mathcal{L}'_3 et \mathcal{L}''_3 sont engendrées de façon analogue par $\bar{K}^{(2)}$ et $\bar{K}^{(3)}$ respectivement.

Le fait que ces trois algèbres soient celles du moment cinétique [c'est-à-dire celles de $SU(2)$] sera constamment utilisé dans les raisonnements qui suivent.

Un autre sous-groupe de $SU(3)$ est celui des matrices unitaires réelles (orthogonales) 3×3 de déterminant 1, généralement noté $SO(3)$; ce sont en fait simplement des matrices de rotation dans l'espace habituel. Les matrices de l'algèbre de Lie correspondantes ont déjà été écrites au chap. V (à un facteur près) :

$$(R_x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = 2 (K_y^{(2)})$$

$$(R_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} = 2 (K_y^{(3)})$$

$$(R_z) = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 2 (K_y^{(1)})$$

(IX-89-a)

Posons donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} R_x = 2 \bar{K}_y \\ R_y = 2 \bar{K}_y \\ R_z = 2 \bar{K}_y \end{array} \right. \quad \text{(IX-89-b)}$$

Compte-tenu des relations de commutation (IX-85), il vient :

$$\begin{aligned}
 [R_x, R_y] &= 4 \left[\frac{1}{2i} (K_+^{(2)} - K_-^{(2)}), \frac{1}{2i} (K_+^{(3)} - K_-^{(3)}) \right] \\
 &= - [K_+^{(2)}, K_+^{(3)}] - [K_-^{(2)}, K_-^{(3)}] \\
 &= - K_-^{(3)} + K_+^{(3)} = 2i K_y^{(3)} \\
 &= i R_z
 \end{aligned}$$

(IX-89-c)

On obtient de même les relations où x, y, z sont permutés circulairement et l'on vérifie que R_x, R_y, R_z engendrent un sous-groupe de \mathcal{G} (hyperspin) qui a les constantes de structure de $SO(3)$.

Remarque : Nous savons grâce à la théorie du moment cinétique que les matrices (IX-89-a) donnent une représentation irréductible $[J=1]$ de $SO(3)$. A plus forte raison, les matrices (IX-88) donnent donc une représentation irréductible de $SU(3)$; nous retrouvons ainsi un résultat déjà obtenu précédemment.

3. Rang ; diagramme des racines et des poids

Par définition, le rang d'une algèbre de Lie est le nombre maximum d'opérateurs de cette algèbre, linéairement indépendants, qui commutent entre eux. Pour l'algèbre de Lie \mathcal{L}_3 du moment cinétique, ce rang est évidemment un ($\vec{u} \cdot \vec{J}$ et $\vec{v} \cdot \vec{J}$ ne commutent pas si \vec{u} n'est pas parallèle à \vec{v}) ; ceci explique la structure "linéaire" des multiplets de moment cinétique (fig. 3)



Fig. 3

Pour $SU(3)$, nous allons voir que le rang est deux, ce qui nous conduira à

des structures planes pour représenter les "supermultiplets" associés aux représentations irréductibles.

Il est clair que le rang de \mathcal{L}_g est au moins deux puisque $K_Z^{(1)}$ commute avec $K_Z^{(2)}$. Inversement, il ne peut pas être supérieur : sinon, on pourrait diagonaliser simultanément les matrices correspondantes et il est facile de voir que trois matrices 3x3 diagonales de trace nulle ne peuvent être linéairement indépendantes (la nullité de la trace ramène à deux le nombre de paramètres dont elles dépendent) (★).

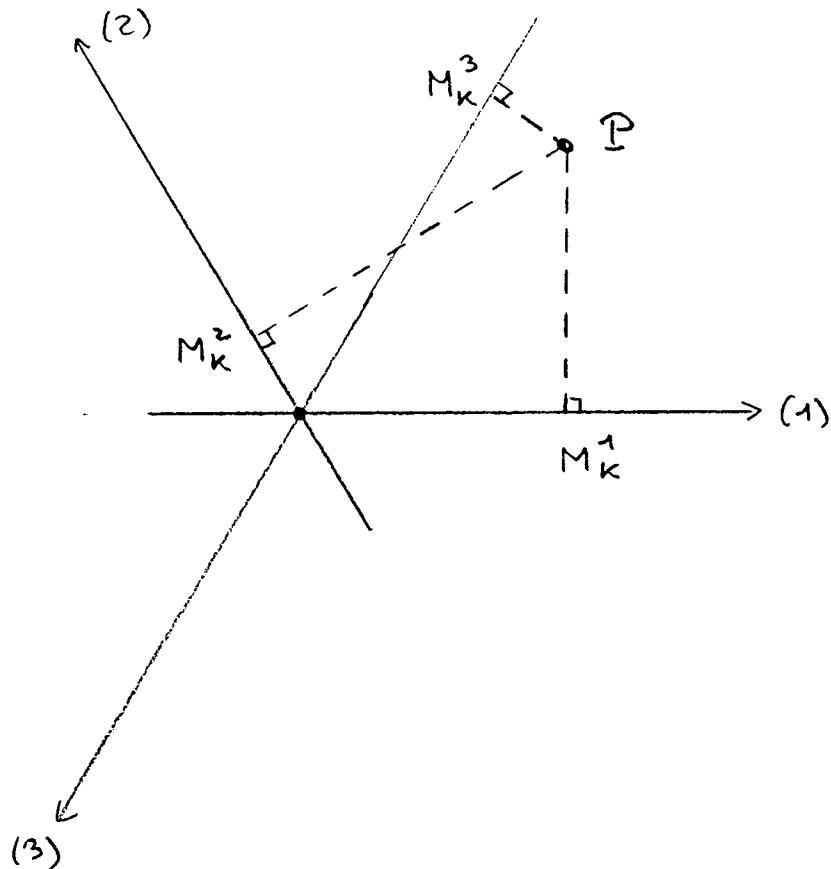
Dans le cas de SU(3), il y a donc deux opérateurs qui jouent le rôle de J_Z pour SO(3) [ou σ_Z pour SU(2)]. Lorsque ces deux opérateurs sont simultanément diagonalisés, chaque vecteur de base possède deux nombres quantiques donnant chacun des valeurs propres. Ceci conduit naturellement à construire des diagrammes dans le plan, où les deux valeurs propres sont portées sur deux axes indépendants. Tout vecteur de base sera alors associé à un point bien déterminé du plan (de même, sur la figure 3, tout vecteur de base est associé à un point sur l'axe linéaire des M).

Si l'on choisit $K_Z^{(1)}$ et $K_Z^{(2)}$ comme opérateurs simultanément diagonalisés, il est commode de porter les valeurs propres M_K^1 et M_K^2 correspondantes sur deux axes à 60 degrés l'un de l'autre, sur lesquels on effectue projection orthogonale. La raison en est que le 3^e axe à 60 degrés donnera alors automatiquement par projection (cf. fig. 4) :

$$M_K^3 = - M_K^1 - M_K^2 \quad (\text{IX-90})$$

qui est précisément la valeur propre de K_Z [cf. relation (IX-83-d)]. On préserve ainsi la symétrie du rôle joué par $\bar{K}^{(1)}$, $\bar{K}^{(2)}$ et $\bar{K}^{(3)}$. Dans ces conditions, il n'est pas étonnant que les diagrammes que nous allons obtenir aient une certaine symétrie ternaire, mais il ne faut pas s'y tromper : l'algèbre \mathcal{L}_g est de rang deux, et l'opérateur $K_Z^{(3)}$ est en fait superflu.

(★) La généralisation est évidente : le rang de l'algèbre de Lie de SU(n) est (n-1).



A toute représentation irréductible de $SU(2)$ sera associé un ensemble de points P, P', P'', \dots de coordonnées M_K^1 et M_K^2 . Chaque point est affecté d'un certain poids : le nombre de vecteurs de base qui lui sont associés [pour $SO(3)$, les poids sont toujours égaux à 1, mais ce n'est pas une règle générale pour tous les groupes]. L'ensemble est appelé "diagramme des poids" de la représentation irréductible.

Soit maintenant $|\varepsilon ; M_K^1, M_K^2\rangle$ un vecteur de base associé à l'un des points du diagramme ; ε peut prendre un nombre de valeurs distinctes égal au poids associé. Appliquant la théorie générale du moment cinétique, nous savons que M_K^1 et M_K^2 sont, soit entiers, soit demi-entiers ; de plus, nous déduirons des relations de commutation (IX-85-a) que

$$K_{\pm}^{(1)} |\varepsilon ; M_K^1, M_K^2\rangle$$

est . soit un ket nul,

- . soit un autre ket propre de $K_Z^{(1)}$ de valeur propre $M_K^1 \pm 1$, appartenant au même sous-espace irréductible.

En particulier, si $M_K^1 > 0$, le ket ne devient jamais nul par action de $K_-^{(1)}$; si $M_K^1 < 0$ il n'est jamais nul par action de $K_+^{(1)}$; si $M_K^1 = 0$ il peut

être nul ou non suivant les cas (★).

Les relations (IX-85-d) permettent également de savoir comment l'action de $K_{\pm}^{(1)}$ change la valeur propre de $K_Z^{(2)}$ [ou de $K_Z^{(3)}$] : on voit que, en sens inverse de celle de K_Z , les valeurs propres de $K_Z^{(2)}$ et $K_Z^{(3)}$ sont diminuées de 1/2 par action de $K_{+}^{(1)}$, et augmentées de 1/2 par action de K_{-} .

Pour finir, l'action de $K_{+}^{(1)}$ conduit sur la figure 4 à un déplacement de +1 parallèlement à l'axe M_K alors que celle de $K_{-}^{(1)}$ conduit à un déplacement de -1 parallèlement au même axe. Les mêmes raisonnements conduisent à des résultats analogues pour $K_{\pm}^{(2)}$ et $K_{\pm}^{(3)}$. On symbolise l'effet des six opérateurs $K_{\pm}^{(i)}$ par un diagramme du type de celui de la figure 5, dit "diagramme des racines".

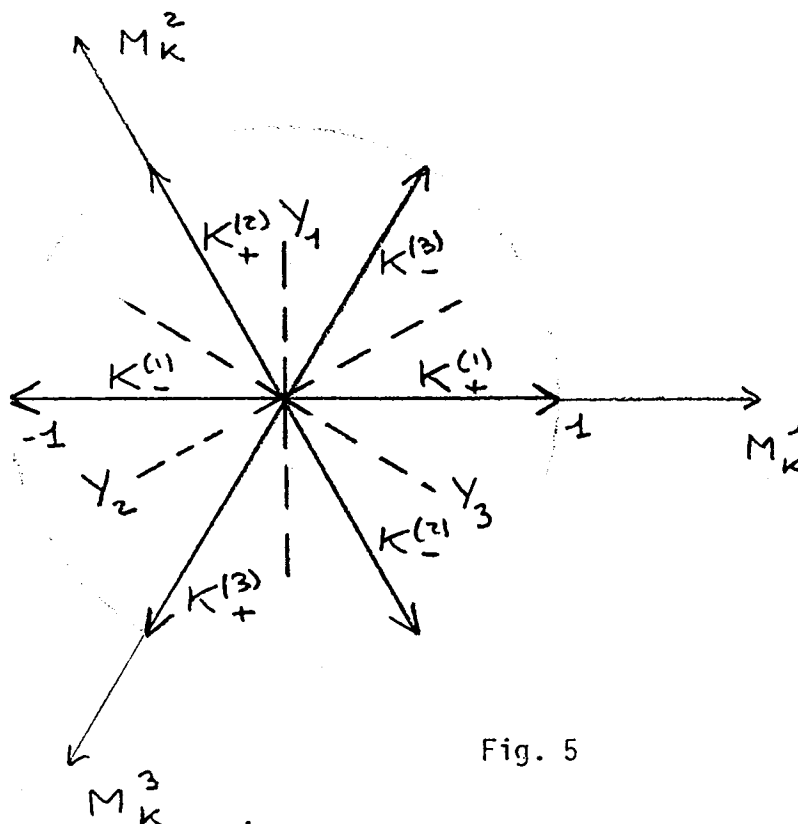


Fig. 5

(★) Cette propriété s'établit facilement en décomposant $|\xi; M_K^1, M_K^2\rangle$ sur une "base standard" associée à $\bar{K}^{(1)}$; $J_{-}|\tau, J, M\rangle$ n'est jamais nul si $M > 0$.

Remarques

(i) La forme du diagramme des racines laisse prévoir une symétrie de type hexagonal pour les diagrammes des poids.

Le fait que les kets de base puissent être regroupés comme ceux d'une base standard associée à $\bar{K}^{(M)}$, où M varie entre +J et -J permet également de prévoir une symétrie par rapport à l'axe Y_1 , perpendiculaire à celui de M_K^A , et passant par l'origine .0. De même, on prévoit des symétries par rapport aux axes Y_2 et Y_3 de la figure 5.

(ii) Le diagramme des poids ne change pas si l'on fait un changement de base quelconque dans le sous-espace de la représentation considérée : les valeurs propres d'un opérateur sont invariantes dans un changement de base, ainsi que les degrés de dégénérescence associés. Deux diagrammes des poids distincts correspondent donc nécessairement à des représentations différentes (non équivalentes).

(iii) Nous avons fait jouer dans notre analyse un rôle privilégié aux composantes $K_Z^{(i)}$, en dépit d'une certaine symétrie entre les rôles joués par les composantes x, y ou z. La raison en est double. En premier lieu, la relation de dépendance linéaire (IX-83-d) porte exclusivement sur les composantes $K_Z^{(i)}$, les autres restant indépendantes. Ensuite, les opérateurs H qui nous intéressent ne changent pas le nombre de particules n_α, n_β ou n_γ , comme $K_Z^{(i)}$, les vecteurs de base des représentations sont donc, lorsque les $K_Z^{(i)}$ sont diagonaux, automatiquement des vecteurs propres "physiques" de H (appartenant à un sous-espace $\mathcal{E}_{n_\alpha, n_\beta, n_\gamma}$ donné) et non des superpositions cohérentes d'états où la nature des particules varie.

4. Construction des représentations irréductibles

Examinons les dispositions possibles des points P qui constituent un diagramme des poids de SU(3). Nous en déduirons ensuite quelles sont les premières représentations irréductibles de SU(3) [celles de dimensions les plus basses].

a) Remarques générales

Considérons un point P quelconque du diagramme des poids, et supposons qu'il soit distinct de l'origine 0. Il ne peut alors être à la fois sur plus d'un seul parmi les trois axes Y_1, Y_2, Y_3 de la figure 5.

Appelons $Y_{(i)}$ l'un des deux axes où il ne se trouve pas.

Si le point P a une projection orthogonale positive (\star) sur cet axe $M_K^{(i)}$, l'action de $K_-^{(i)}$ sur un ket de base quelconque associé à P donne un autre ket non-nul, la valeur propre des K_z^i ayant diminué d'une unité. Par récurrence, à tout point N est associé une série de points P', P'', \dots . L'existence du point initial P de coordonnée M_K^i impose que l'espace de représentation contient ou moins une fois une valeur propre $K^{(i)} [K^i + 1]$ de $[K^i]^2$ avec $K^i \geq M_K^i$. L'action de $K_-^{(i)}$ donne donc au moins $2 M_K^i + 1$ points qui existent nécessairement dans le diagramme des poids [voir figure 6, où l'on a supposé que $i=1$]. Le dernier de ces points est symétrique du premier par rapport à l'axe $Y_{(i)}$ de la figure 5.

Remarquons au passage que, dans un tel déplacement, les valeurs de M_K varient par sauts entiers, mais celles des autres composantes par sauts demi-entiers (cf. fig. 5). Il en découle que, en général, un diagramme des poids regroupe des multiplets d'isospin pour lesquels K_1, K_2 et K_3 sont entiers et demi-entiers.

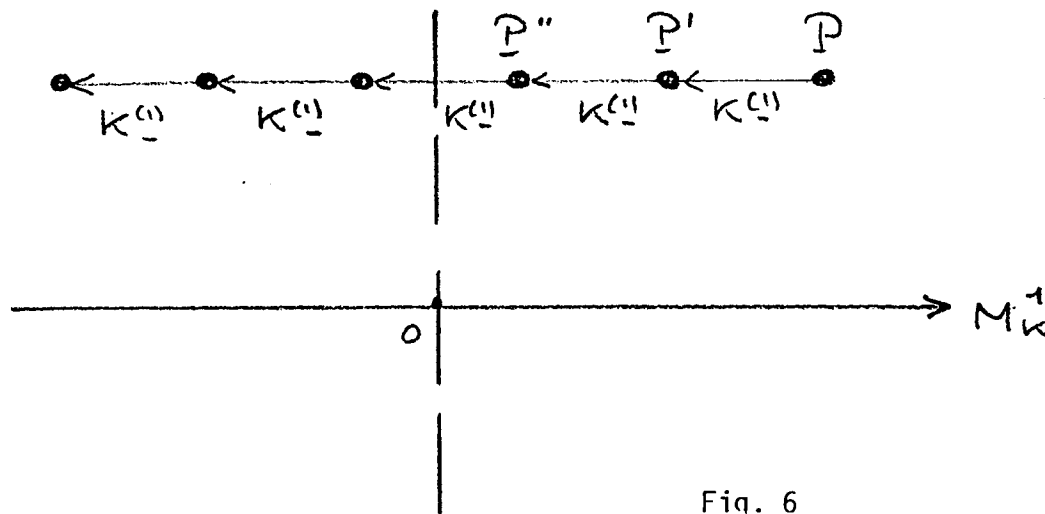


Fig. 6

Si donc l'on part d'un point P_1 qui n'est sur aucun axes Y_1, Y_2, Y_3 , on sait qu'il existe nécessairement cinq autres points P_2, \dots, P_6 du diagramme, symétriques du premier par rapport à ces axes (cf. fig. 7) ; le

(\star) Si elle est négative, un raisonnement symétrique utilisant K_+ peut évidemment être mené.

produit de deux symétries par rapport à deux Y_i distincts donne une rotation de ± 120 degrés, de sorte que les six points forment les sommets de deux triangles équilatéraux égaux. Si maintenant P_1 est sur l'un des axes Y_1, Y_2 ou Y_3 , les points se regroupent deux par deux et les deux triangles équilatéraux se confondent en un seul (par exemple, P_1 et P_6 , P_2 et P_3 , P_4 et P_5 se confondent sur la figure 7). Deux situations sont donc possibles pour les points distincts de l'origine 0 : ou bien ils se regroupent par ensemble de six points, ou bien par ensemble de trois points qui sont sur les axes de symétrie Y_1, Y_2 et Y_3 .

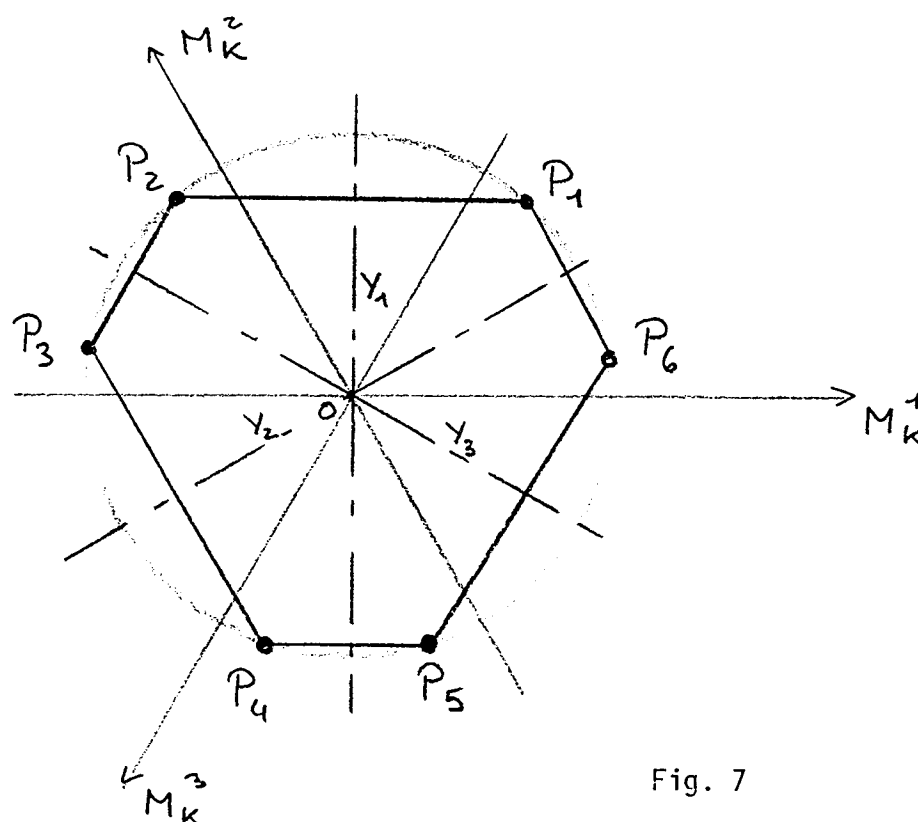


Fig. 7

Partant d'un des six points P_1, \dots, P_6 , on peut en obtenir d'autres par action des opérateurs symbolisés sur le diagramme des racines de la figure 5 : tout déplacement de ± 1 , perpendiculairement à l'axe Y_i , est autorisé lorsque le point obtenu n'est pas plus éloigné de l'axe (il existe au moins un ket non-nul associé au nouveau point obtenu). On peut ainsi remplir le périmètre $P_1 P_2 \dots P_6$ de la figure 7 de triangles iso-cèles de côté 1 et de côtés perpendiculaires aux axes Y_1, Y_2 et Y_3 (fig. 8).

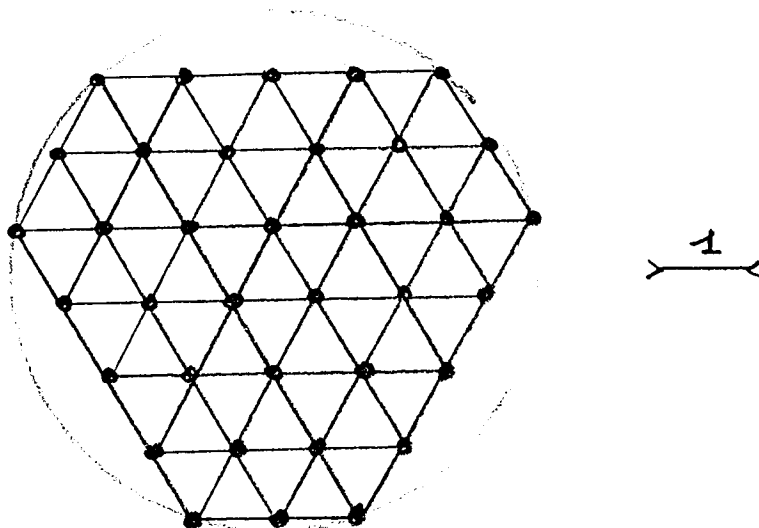


Fig. 8

b) Diagrammes à un point : représentation $\{1\}$

La situation la plus simple est évidemment celle où le diagramme des poids comprend un seul point P , qui est alors nécessairement situé à l'origine 0 . Les seules valeurs propres possibles de $K_z^{(i)}$ sont alors toutes nulles. Il en est aussi de même de celles de $[K_x^{(i)}]^2$ et l'on en déduit que toutes les matrices associées aux $K_{x,y,z}$ sont nulles. La seule représentation irréductible dans ces conditions est celle de dimensions 1 (le poids de 0 est 1) ; on la dénote par $\{1\}$. Le groupe \mathcal{G} (isospin) est alors uniquement représenté par les matrices (1), ce qui donne la représentation dite "triviale".

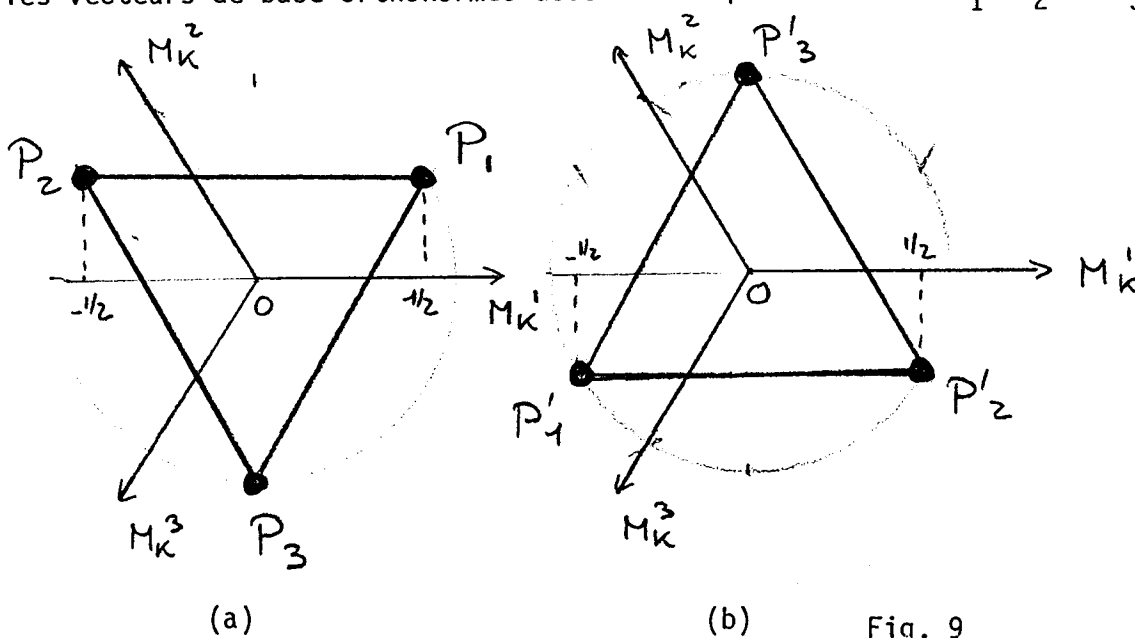
c) Diagrammes à trois poids : représentations $\{3\}$ et $\{3^*\}$

Le nombre minimum de points distincts de l'origine est trois. D'après l'étude du § a précédent, deux dispositions sont possibles ; elles sont données sur les figures 9-a et 9-b (triangles isocèles à pointe

vers le bas ou vers le haut).

De tels diagrammes permettent de construire très directement les matrices de représentation. Commençons par supposer que le poids de chaque point P est un : nous cherchons alors des représentations de dimension 3.

Pour le diagramme de la figure 9-a, appelons $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$ les vecteurs de base orthonormés associés respectivement à P_1 , P_2 et P_3 .



On lit directement sur la figure les valeurs propres des opérateurs $K_Z^{(i)}$ qui sont associées à $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$: par exemple, $|u_1\rangle$ est vecteur propre de $K_Z^{(1)}$ avec la valeur propre $+1/2$, de $K_Z^{(2)}$ avec la valeur propre 0 , de $K_Z^{(3)}$ avec la valeur propre $-1/2$. Le même raisonnement étant fait pour $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$ on obtient :

$$(K_Z^{(1)}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et des expressions similaires pour $K_Z^{(2)}$ et $K_Z^{(3)}$. Ces expressions ne sont en fait autres que celles déjà écrites en (IX-99-a).

Le diagramme des racines montre que l'opérateur $K_+^{(1)}$ fait passer de $|u_2\rangle$ à $|u_1\rangle$; une définition adéquate de la phase relative de ces vecteurs de base redonne l'expression donnée en (IX-88-a). La matrice de $K_-^{(1)}$ hermitique conjuguée, a alors également l'expression de (IX-88-a).

La définition de la phase relative de $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$ permet ensuite de retrouver également les expressions de $(K_{\pm}^{(2)})$. Les relations de (IX-85-e) peuvent alors être utilisées et entraînent que les matrices $(K_{\pm}^{(3)})$ ne peuvent être que celles déjà écrites en (IX-88-a).

Pour finir, nous obtenons une représentation unique associée au diagramme 9-a ; celle qui est donnée directement par les matrices de SU(3). Nous la symboliserons par la notation $\{3\}$.

Examinons maintenant le diagramme de la figure 9-b. Il est différent du précédent ; donc s'il donne une représentation, elle ne sera pas équivalente à la précédente. Il existe une méthode immédiate pour attribuer une représentation irréductible à ce diagramme puisqu'il est obtenu à partir de celui de la figure 9-a par simple transposition du rôle joué par $\bar{K}^{(2)}$ et $\bar{K}^{(3)}$: on échange dans (IX-88-a) toutes les matrices d'indice $i=2$ avec celles d'indice $i=3$. Les représentations correspondantes existe donc, et elle sera notée $\{3^*\}$.

Pour Par cette représentation ; il est commode de numéroter autrement les vecteurs de base $|u_1\rangle, |u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$; cette opération est un changement de base et donne donc une représentation équivalente. La numérotation adoptée est celle des points P'_1, P'_2 et P'_3 de la figure 9-b ; elle se déduit de celle choisie par la figure 9-a par une symétrie par rapport à l'origine 0. Comparons alors dans les représentations $\{3\}$ et $\{3^*\}$. Dans la symétrie en question, les valeurs propres des opérateurs changent de signe et les matrices associées sont donc les opposées de celles de la représentation $\{3\}$. On voit de la même façon que les matrices associées aux opérateurs $K_{\pm}^{(i)}$ s'interchangent avec celles des $K_{\mp}^{(i)}$. Il faut cependant prendre garde à correctement définir les phases relatives des vecteurs de base car, dans les relations de commutation (IX-85), les opérateurs K_{+} et K_{-} jouent un rôle antisymétrique. Le raisonnement qui a été fait pour la représentation $\{3\}$ ne s'applique donc que si l'on prend le soin de définir les phases relatives des $|u_p\rangle$ de façon que $K_{\pm}^{(i)}$ soit associé à l'opposé de la matrice précédemment associée à $K_{\pm}^{(i)}$ [on vérifie que toutes les relations de commutation (IX-85) sont invariantes si l'on change de signe $K_z^{(i)}$ ainsi que $K_{\pm}^{(i)}$, et intervertit ensuite $K_{+}^{(i)}$ avec $K_{-}^{(i)}$]. Dans cette opération, les opérateurs hermitiques $K_{x,y,z}$ subissent les transformations :

$$\begin{aligned} K_{x,z}^{(i)} &\leftrightarrow - K_{x,z}^{(i)} \\ K_y^{(i)} &\leftrightarrow + K_y^{(i)} \end{aligned} \tag{IX-91}$$

Pour finir, les matrices de la représentation $\{3^*\}$ peuvent être obtenues à partir des équations (IX-88-b) par un changement de signe suivi d'une conjugaison complexe. En ce qui concerne les matrices associées aux opérateurs unitaires de \mathcal{G} (hyperspin), l'égalité (IX-86) montre que le passage de $\{3\}$ à $\{3^*\}$ se traduit par une simple conjugaison complexe : ceci explique l'origine de la notation $\{3^*\}$.

Remarques

(i) Il est clair que si un ensemble de matrices fournit une représentation d'un groupe \mathcal{G} , l'ensemble des matrices complexes conjugués en donnera également une représentation (le produit de matrices complexe conjuguées est la matrice conjuguée du produit). Ici, nous avons des représentations conjuguées qui donnent des diagrammes des poids différents, et ne sont donc pas équivalentes. Pour le groupe $SU(2)$, il existe également des représentations complexes, ne fût-ce que les matrices de $SU(2)$ elles-mêmes. Mais nous avons vu, au chapitre VI, que les représentations irréductibles de $SU(2)$ sont entièrement caractérisées par le nombre J , c'est-à-dire la dimension $2J+1$ de l'espace. Pour $SU(2)$, contrairement à $SU(3)$, ces représentations conjuguées sont donc toujours équivalentes.

(ii) Les représentations $\{3\}$ et $\{3^*\}$ fournissent automatiquement des représentations du sous-groupe $SO(3)$ dont les générateurs ont été écrits en (IX-89). En fait, on obtient deux fois la même représentation ($J=1$), puisque les matrices $(K_y^{(i)})$ restent invariantes par conjugaison complexe suivie d'un changement de signe.

(iii) Il n'existe pas de représentation irréductible de $SU(3)$, autre que $\{3\}$ et $\{3^*\}$, qui soit associée à des diagrammes à trois points.

Nous avons construit toutes celles pour lesquelles chaque point P a un poids unité, c'est-à-dire celles de dimension 3. Supposons donc que P_1 ait un poids égal à deux : la valeur propre $M_K = 1/2$ étant alors réalisée deux fois, il existe nécessairement deux kets distincts $|\tau, K, M_K = +\frac{1}{2}\rangle$ dans une base standard associée à $\bar{K}^{(1)}$. Il y a donc également deux kets $|\tau, K, M_K = -\frac{1}{2}\rangle$ orthogonaux et le poids de P_2 est aussi deux. Un raisonnement analogue montre que le poids de P_3 doit, encore, valoir deux. La représentation considérée est donc de dimension 6.

Considérons l'opérateur (unitaire) $K_+^{(1)} \times K_+^{(2)} \times K_+^{(3)}$; partant d'un ket quelconque associé au point P , il redonne un autre ket associé au

même point (le point "revient sur place" après un "tour" sur un triangle équilatéral). Dans le sous-espace de dimensions 2 associé à P_1 , diagonalisons cet opérateur. On obtient ainsi deux kets orthogonaux :

$$|\tau_1, M_K = +\frac{1}{2}\rangle$$

$$|\tau_2, M_K = +\frac{1}{2}\rangle$$

Partant du premier par exemple, on engendre un espace \mathcal{E}_3 de dimension 3 seulement par actions successives des opérateurs $K_{\pm}^{(i)}$. Les relations

$$K_{\pm}^{(i)} K_{\mp}^{(i)} = [K^{(i)}]^2 - (K_Z^{(i)})^2 \pm K_Z^{(i)} \quad (\text{IX-92})$$

permettent de montrer qu'il est stable sous l'action de tout opérateur K_{\pm} et en conséquence que \mathcal{E}_3 est stable sous l'action de \mathcal{L}_8 . Pour finir, la représentation considérée est nécessairement réductible et égale à une somme directe :

$$\{3\} \oplus \{3\}$$

d) Diagramme à plus de 3 points

Essayons d'ajouter l'origine aux diagrammes des figures 9-a et 9-b. Le point 0 ne peut alors être connecté par le diagramme des racines à aucun autre point (P_1, P_2 et P_3 , ne son pas à une distance unité de l'origine). Les représentations correspondantes sont donc réductibles : le poids du point 0 donne le nombre de fois qu'elles contiennent la représentation $\{1\}$ en sus de l'une des représentations $\{3\}$ ou $\{3^*\}$.

Si l'on cherche les diagrammes à plus de trois points, deux situations doivent être envisagées :

- . si 0 est un point du diagramme (et si ce n'est pas le seul) on voit facilement que la disposition la plus simple possible des points est celle de la figure 10-a qui a sept points ;

- . si 0 n'est pas un point du diagramme, il faut ajouter au minimum trois points aux figures 9-a ou 9-b, et l'on aboutit aux schémas de la figure 10-b et 10-c.

Nous allons voir que tous ces schémas sont effectivement associés à une représentation irréductible. Pour cela, nous allons considérer

Les représentations de SU(3) obtenues par produit tensoriel des deux représentations à trois dimensions, que nous noterons :

$$(9) \equiv \{3\} \otimes \{3\}$$

$$(9)' \equiv \{3\} \otimes \{3^*\}$$

$$(9)'' \equiv \{3^*\} \otimes \{3^*\}$$

(IX-93)

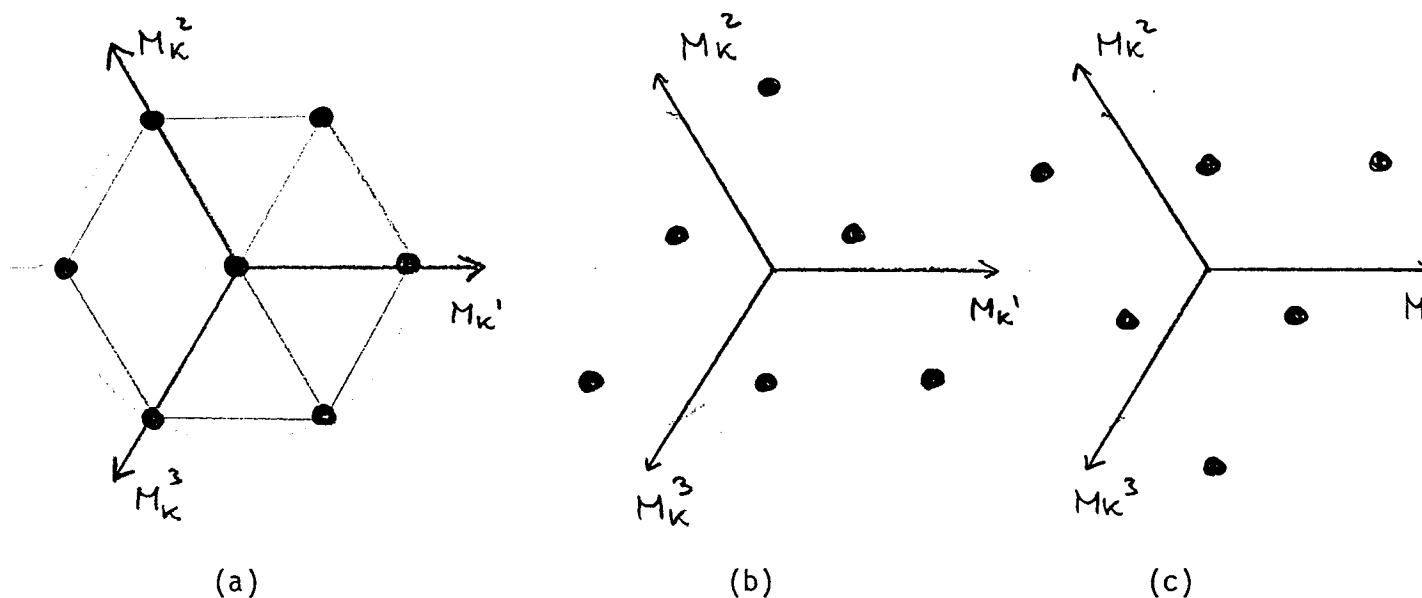


Fig. 10

(nous prenons une notation différente car nous verrons qu'elles sont réductibles). Ces représentations sont de dimensions 9 et elles peuvent être calculées dans une base de kets obtenus par produit tensoriel des kets initiaux. Si l'on associe deux kets qui sont vecteurs propres d'un même opérateur de \mathcal{G} (hyperspin), avec des valeurs propres λ_1 et λ_2 , le ket produit tensoriel est encore ket propre avec une valeur propre $\lambda_1 \times \lambda_2$. Pour les kets propres d'opérateur de l'algèbre de Lie \mathcal{L}_g , la situation est semblable, mais il faut ajouter les valeurs propres (tout se passe comme lors de la composition de deux moments cinétiques).

Le diagramme des poids de la représentation produit s'obtient donc de façon très simple. On associe deux à deux les points P_1 et P_2 de la représentation initiale, et on porte le point P défini par

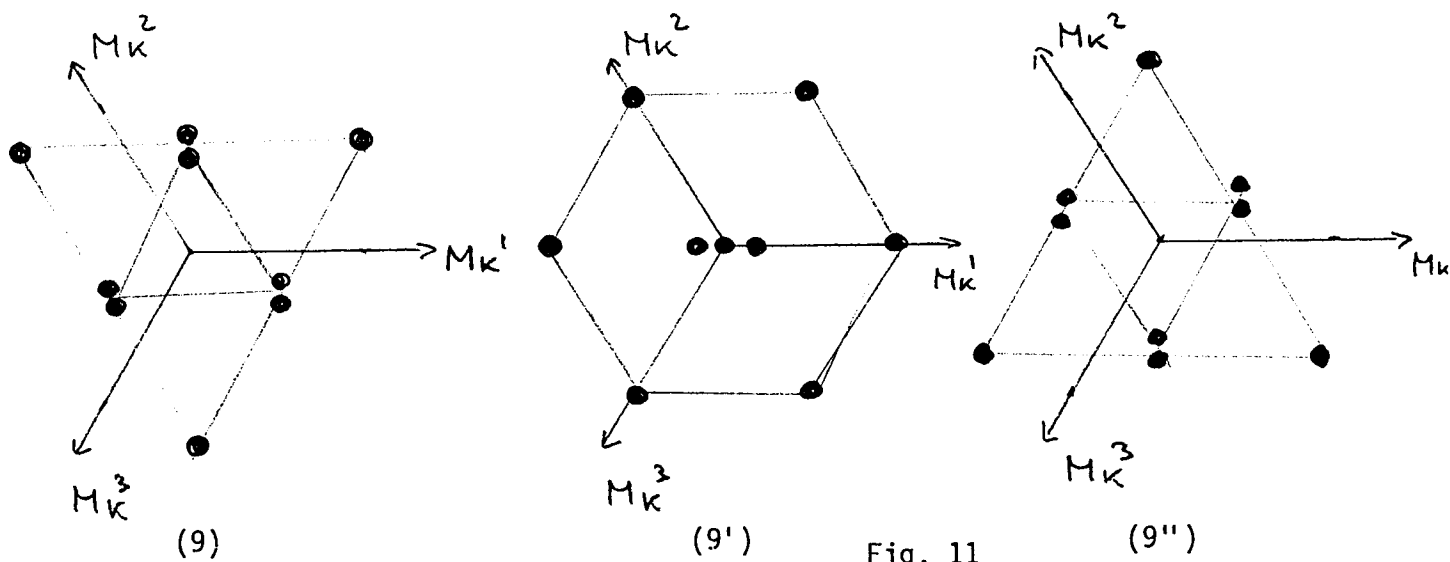
$$\vec{OP} = \vec{OP}_1 + \vec{OP}_2$$

Il est bien sûr possible d'obtenir le même point P à partir de couples P_1, P_2 différents ; on en tient compte lors du calcul des poids.

Les figures 11-a, 11-b et 11-c donnent le résultat de cette

opération pour les représentations produit (9), (9)' et (9)'' ; les points doubles ou triples indiquent des poids égaux à 2 ou 3.

Les représentations (9) et (9)'' sont en fait celles associées au changement de base unitaire pour des tenseurs d'ordre deux, lorsque la dimension de l'espace est 3 et que les deux composantes μ et μ' sont toutes deux soit covariantes, soit contravariantes (voir rappels du complément VII-A). Or, nous connaissons deux ensembles de tenseurs qui sont invariants dans une telle opération, les tenseurs A complètement symétriques $[A_{\mu\mu'} = A_{\mu'\mu}]$ et les tenseurs complètement antisymétriques $[A_{\mu\mu'} = -A_{\mu'\mu}]$. Ces deux ensembles constituent des espaces de dimensions 6 et 3 respectivement. Les représentations (9) et (9)'' se décomposent donc en deux représentations ayant ces dimensions.



En conséquence, il faut séparer dans les diagrammes des figures 11-a et 11-c deux groupes de 3 et 6 points. La seule façon de le faire qui soit compatible avec les règles énoncées plus haut conduit à retrouver les diagrammes des figures 9-a et 9-b ainsi que deux autres représentés sur les figures 12-a et 12-b. On vérifie sans difficulté qu'il n'est plus possible de décomposer plus loin ces diagrammes en ensemble de points qui aient les propriétés acceptables pour un diagramme de poids

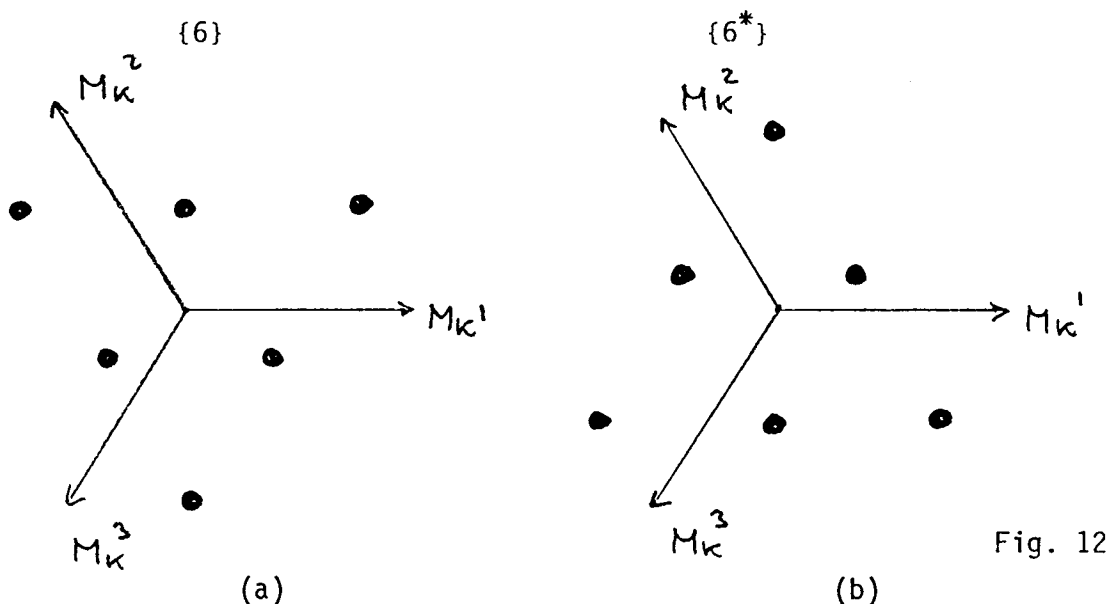


Fig. 12

[cf. fig. 5] . Les représentations sont donc irréductibles et nous les noterons $\{6\}$ et $\{6^*\}$. La décomposition peut être symbolisée par les équations :

$$\{3\} \otimes \{3\} = \{3^*\} \oplus \{6\}$$

$$\{3^*\} \otimes \{3^*\} = \{3\} \oplus \{6^*\} \tag{IX-94}$$

Reste maintenant à examiner la représentation $(9)'$. Elle donne la transformation d'un tenseur à deux indices dont l'un est covariant, l'autre contravariant. On sait que la trace

$$\sum_{\mu} A^{\mu}_{\mu}$$

est invariante dans tout changement de base (unitaire ou non). Ceci nous permet de retirer de $(9)'$ une représentation qui ne peut être que $\{1\}$. Il reste alors le diagramme de la figure 13, qu'il n'est pas possible de décomposer en deux sous-ensembles de points qui donnent des diagrammes acceptables. La représentation qui reste, de dimensions 8, sera notée $\{8\}$, et nous écrirons :

$$\{3\} \otimes \{3^*\} = \{1\} \oplus \{8\} \tag{IX-95}$$

On remarque que $\{8\}$ est la première représentation irréductible que nous ayons trouvé dont tous les poids ne valent pas 1 (le poids de l'origine est deux).

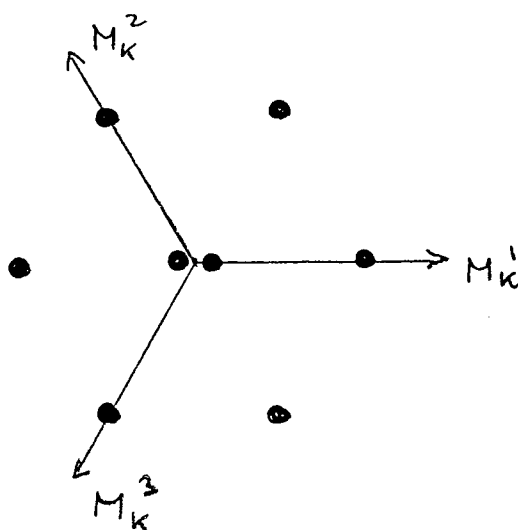


Fig. 13

Remarque : Effectuons le produit tensoriel

$$(27) = \{3\} \otimes \{3\} \otimes \{3\}$$

Le diagramme correspondant, obtenu comme plus haut, est représenté sur la figure 14 ; il comprend 10 points distincts dont certains (ceux des "coins") ne figurent dans aucun des diagrammes déjà obtenus. La représentation (27) comprend donc une représentation irréductible nouvelle, de dimension 10 (si tous ses poids valent 1) ou plus.

En termes de tenseurs, la représentation (27) est celle qui apparaît si l'on considère l'effet de changement de base unitaires sur les composantes 3 fois covariantes μ , μ' et μ'' d'un tenseur du troisième ordre. Or nous savons qu'un tenseur B totalement symétrique :

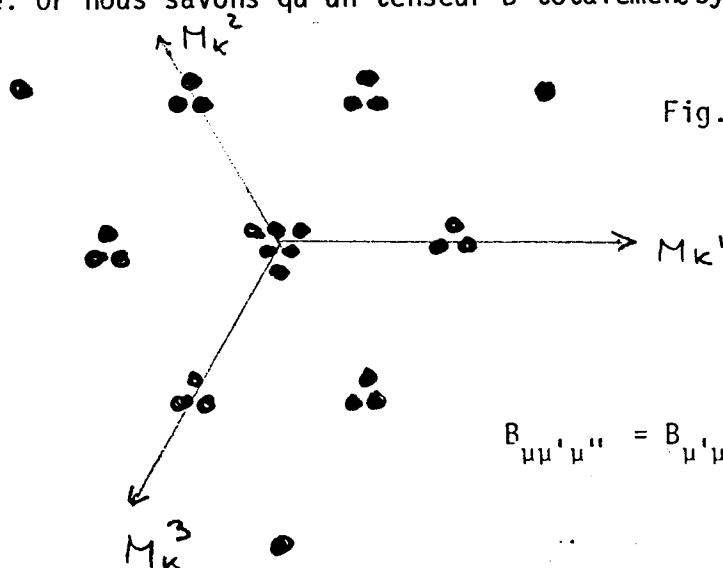


Fig. 14

$$B_{\mu\mu'\mu''} = B_{\mu'\mu\mu''} = B_{\mu''\mu\mu'} = \dots$$

garde cette propriété par changement de base. Il existe donc un sous-espace invariant dans l'espace de représentation. Un tenseur totalement

symétrique dépend de 10 paramètres (*). Il est d'autre part clair que cet espace comprend les vecteurs associés aux "coins" de la figure 14 : ils correspondent en effet à $\mu = \mu' = \mu''$. Le diagramme de cette représentation est donc celui de la figure 15 ; tous les poids valent 1, de sorte qu'il est totalement impossible de retrancher l'une des représentations irréductibles obtenues plus haut. La représentation en question, de dimensions 10, est donc irréductible ; elle est notée $\{10\}$.

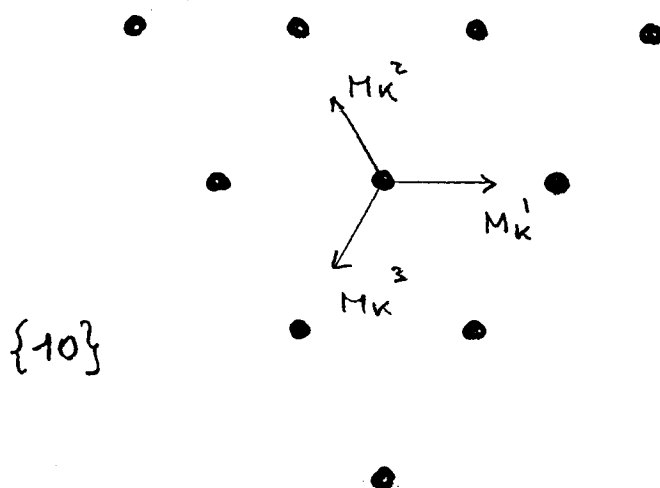
D'autre part, utilisant (IX-94) et (IX-95), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \{3\} \otimes \{3\} \otimes \{3\} &= [\{3^*\} \oplus \{6\}] \otimes \{3\} \\ &= \{1\} \oplus \{8\} \oplus (\{6\} \otimes \{3\}) \end{aligned} \quad \text{(IX-95)}$$

La représentation $\{10\}$ ne peut être que contenue dans $\{6\} \otimes \{3\}$; un raisonnement simple montre alors que la représentation restante, de dimension 8, ne peut être que $\{8\}$:

$$\{3\} \otimes \{6\} = \{8\} \oplus \{10\} \quad \text{(IX-96)}$$

Pour finir, l'équation (IX-95) devient :



$$\{3\} \otimes \{3\} \otimes \{3\} = \{1\} \oplus \{8\} \oplus \{8\} \oplus \{10\} \quad \text{(IX-97)}$$

(*) Les composantes $B_{\mu, \mu', \mu''}$ dépendent du choix de x, y ou z pour les indices μ, μ' et μ'' mais pas de leur ordre. Le nombre de composantes indépendantes est donc égal au nombre de façons différentes dont on peut choisir x, y, z (avec des répétitions éventuelles). Ce nombre est la somme de :

- 1 (3 indices différents)
- $3 \times 2 = 6$ (un indice est pris deux fois, puis associé à l'un quelconque des deux autres)
- 3 (3 indices égaux).

Il vaut donc 10.

e) Applications
.....

Une application très importante de ce qui précède est le modèle des quarks (★) : on considère que les hadrons (particules sensibles aux interactions fortes : baryons, mésons, ...) peuvent être construits à partir de constituants plus élémentaires, les quarks. Ces derniers sont supposés jouer le même rôle dans l'hamiltonien des interactions fortes. Lorsque le nombre de quarks distincts est trois (quarks u, d, s, de "saveurs" différentes), la symétrie SU(3) est satisfaite par tous les édifices qu'ils permettent de construire.

Le cas le plus simple est celui où le nombre total n de particules est n = 1 . On a alors trois états possibles du système

$$|u\rangle \quad |d\rangle \quad |s\rangle$$

qui engendrent une représentation irréductible de SU(3) [groupe qui joue ici le rôle d'un "groupe de saveur"] . On suppose que c'est la représentation {3} de la figure 9-a.

Aux trois quarks sont associés trois "antiquarks" de nombres quantiques opposés ; les états correspondant sont notés

$$|\bar{u}\rangle \quad |\bar{d}\rangle \quad |\bar{s}\rangle$$

et ils doivent également engendrer une représentation irréductible de SU(3). Si l'on change de signe les nombres quantiques M_K , on passe de {3} à {3*} ; les antiquarks seront donc associés à la représentation {3*}.

(★) On peut concevoir des applications de la symétrie SU(3) dans des domaines autres que la physique des particules. Par exemple, cette symétrie apparaît dans la classification des niveaux d'énergie des molécules polyatomiques, constituées par un nombre quelconque d'atomes de spin nucléaire I = 1 (trois états m_I de spin nucléaires sont alors accessibles). On peut également supposer que les molécules polyatomiques sont constituées par des isotopes différents de masses très proches (et de même spin nucléaire, I = 0 par exemple). La symétrie SU(3) est obtenue dans les spectres de vibration-rotation lorsque l'on néglige les différences de masse entre les noyaux. Dans un deuxième temps, on peut introduire ces différences de masse qui correspondent à une brisure de symétrie (levée de certaines dégénérescences).

On voit ici un avantage du groupe $SU(3)$ sur $SU(2)$: il possède des représentations irréductibles de même dimension non équivalentes, ce qui permet l'introduction des antiparticules.

Quarks et antiquarks sont des particules de spin $1/2$, donc des fermions obéissant au principe d'exclusion de Pauli (les quarks sont en cela analogues aux leptons : électrons et positrons, muons μ^\pm , etc.)

Examinons quelles sont les symétries possibles de divers assemblages de quarks et antiquarks. La formule (IX-95) montre quels sont les supermultiplets obtenus en combinant un quark et un antiquark : un octet de représentation $\{8\}$ et un singulet $\{1\}$. L'octet est celui des mésons pseudoscalaires [de spin nul (*) et de parité négative] représenté sur la figure 16. Signalons qu'il existe également un octet de mésons pseudovecteurs [de spin 1 et parité négative].

Si maintenant nous associons trois quarks, la formule (IX-97) montre que l'on obtient un singulet, deux octets et un décuplet. Le singulet est associé au baryon Y^* (spin $1/2$, parité négative). Un octet de baryons de spin $1/2$ et de parité positive est représenté sur la figure 17. On y reconnaît en haut le doublet d'isospin du proton et du neutron. De façon générale, sur ce schéma comme ceux des autres figures, les particules appartenant à un même multiplet d'isospin sont rangées sur des mêmes segments horizontaux ; par déplacement d'une unité horizontale vers la droite, on obtient une particule dont la charge est augmentée du quantum de charge q_p . La deuxième ligne du schéma de la figure 17 donne donc un triplet et un singulet d'isospin. Le décuplet des baryons de spin $3/2$ et de parité positive, associé à la représentation 10 est représenté sur la figure 18.

(*) Comme H , le moment cinétique total des quarks est un opérateur qui commute avec tous les opérateurs K de l'algèbre \mathcal{L}_3 [c'est un scalaire de $SU(3)$]; il possède donc une valeur unique dans chaque supermultiplet.

Remarques :

(i) Si l'on ajoute aux trois quarks $|u\rangle$, $|d\rangle$, $|s\rangle$ un "quark charmé" $|c\rangle$, la symétrie SU(3) de saveur devient SU(4) et les supermultiplets sont commodément représentés par des diagrammes tri-dimensionnels, dont ceux de SU(3) fournissent des sections planes (*). On tend en fait actuellement, à introduire cinq, six... , quarks de saveurs distinctes ; la symétrie devient alors SU(5), SU(6)... (**).

Il faut cependant garder à l'esprit que les symétries en question ne sont qu'approchées : seule "la partie la plus forte" des interactions fortes est invariante par permutation des quarks de saveur différente, de sorte que la symétrie SU(3) n'est qu'une première approximation (**). Dans une théorie plus raffinée, on introduit une correction, brisant la symétrie SU(3) qui peut être traitée par une théorie des perturbations au premier ordre. C'est de cette façon qu'est obtenue la formule de masse de Gell-Mann et Okubo, qui est vérifiée par les résultats expérimentaux avec une précision surprenante.

(ii) Nous avons vu que, dans (IX-97), la représentation $\{10\}$ provient de combinaisons complètement symétriques des indices associés à chacune des représentations initiales, c'est-à-dire des états des quarks. Elle correspond donc à des vecteurs d'état totalement symétriques par échange des particules. Comme l'état de spin est $S = 3/2$, c'est-à-dire symétrique, le principe de Pauli impose alors à l'état orbital des trois quarks identiques d'être totalement antisymétrique. Or ceci est peu plausible pour un ensemble de particules dans leur état fondamental : une fonction d'onde totalement antisymétrique possède plusieurs "noeuds" (plus précisément des hypersurfaces où elle s'annule), ce qui implique une énergie cinétique élevée des particules. Cette difficulté a conduit à introduire un nombre quantique supplémentaire pour les quarks, nombre qui prend trois valeurs distinctes et définir leur "couleur" (cette opération multiplie par 3 le nombre total de quarks distincts).

(*) De même, des segments horizontaux des diagrammes de SU(3) donnent des diagrammes de SU(2).

(**) Par contre, la symétrie d'isospin est considérée comme exacte pour les interactions fortes.

(**) La symétrie SU(n) entre n quarks équivalents n'épuise pas les invariances de la théorie. On a, par exemple, une invariance par rotation qui conduit à une symétrie du type SU(2). Le groupe de symétrie est alors le produit tensoriel :

$$SU(2) \otimes SU(n)$$

[$SU(2) \otimes SU(n)$ n'est qu'un sous-groupe de $SU(n+2)$].

Les différentes couleurs jouent des rôles équivalents dans la théorie des interactions fortes appelée "chromodynamique quantique". On est alors conduit à introduire un groupe "SU(3) de couleur", qu'il ne faut bien sûr pas confondre avec le groupe "SU(3) de saveur" dont nous avons parlé jusqu'ici. Les 3 vecteurs de base de la représentation $\{3\}$ de ce groupe de couleur sont associés à 3 quarks de couleurs différentes (mais de même saveur), les 3 vecteurs de base de $\{3\}^*$ aux anti-quarks correspondants. La chromodynamique quantique est une "théorie de jauge" présentant quelques analogies avec l'électrodynamique quantique. Dans ce dernier cas cependant, le groupe de jauge est U(1), c'est-à-dire un groupe très simple à un seul générateur, donc commutatif ; le champ de jauge correspondant est le champ électromagnétique, quantifié en photons. Dans le cas de la chromodynamique quantique, le groupe SU(3) de couleur possède 8 générateurs ne commutant pas tous entre-eux ; c'est une théorie de jauge non-abélienne. On est ainsi conduit à introduire 8 champs distincts par l'intermédiaire desquels interagissent les quarks de couleurs différentes (ces interactions assurent, par exemple, la liaison de 3 quarks dans un proton). A ces 8 champs sont associées 8 particules, appelées "gluons".

Exercices

(i) Un sous-groupe $R_{(3)}$ de SU(3) a été introduit grâce aux formules (IX-89). Calculer les valeurs de J associée aux représentations irréductibles $\{6\}$, $\{8\}$ et $\{10\}$; sont-elles irréductibles vis-à-vis de $R_{(3)}$?

(ii) Reprendre les calculs du § B-4 (symétrie d'isospin) dans le cas de trois particules et de la symétrie SU(3). On supposera que les trois particules ont un spin 1/2. Examiner le cas où leur état orbital est décrit par une fonction d'onde totalement symétrique par échange ; obtient-on alors la représentation $\{10\}$?

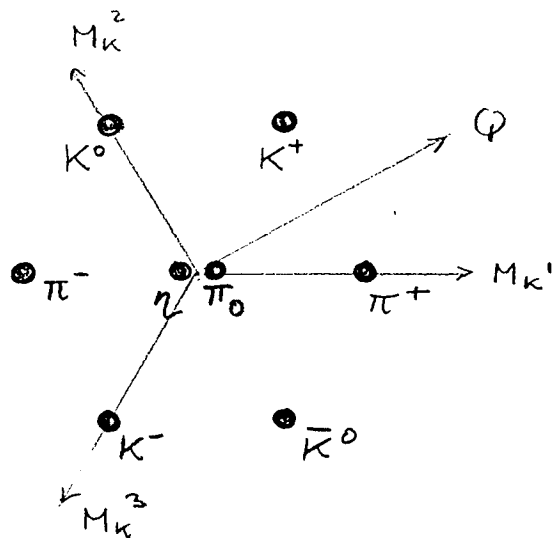


Fig. 16 : octet des mésons pseudoscalaires

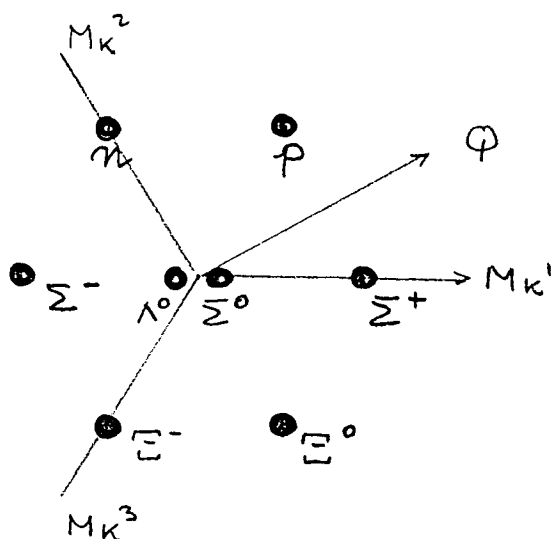


Fig. 17 : octet de baryons de spin 1/2

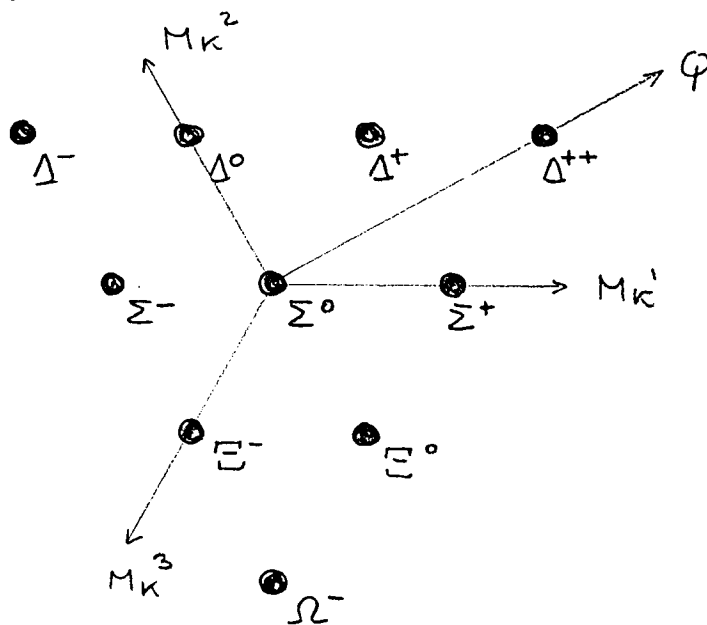


Fig. 18 : décuplet de baryons

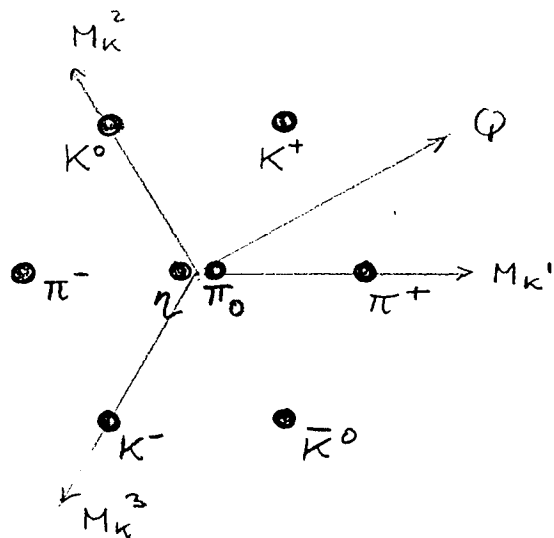


Fig. 16 : octet des mésons pseudoscalaires

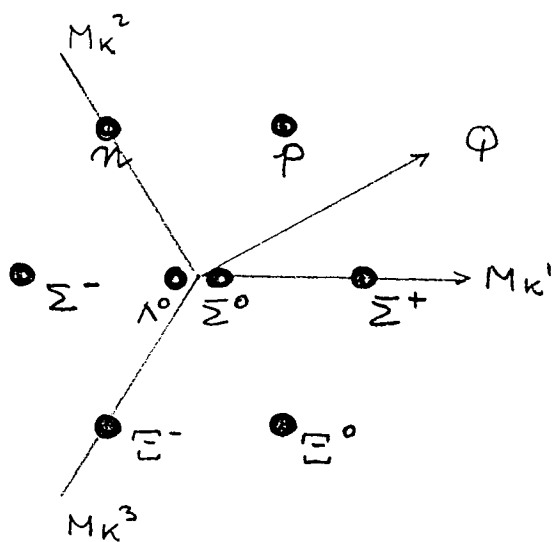


Fig. 17 : octet de baryons de spin 1/2

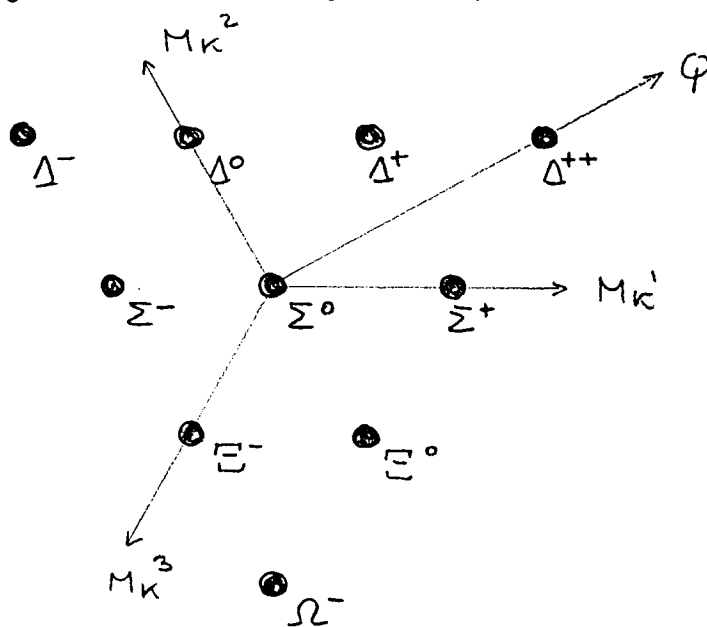


Fig. 18 : décuplet de baryons

REFERENCES

ARTICLES SIMPLES D'INTRODUCTION

- G. FEINBERG et M. GOLDHABER, "The conservation laws of Physics", Scientific American, Vol. 209, p. 36 (Octobre 1963),
- E.P. WIGNER, "Violations of symmetry in Physics", Scientific American, Vol. 213, p. 28 (Décembre 1965),
- P. MORRISON, "The overthrow of parity", Scientific American, Vol. 196, p. 45 (Avril 1957),
- E.P. WIGNER, "Symmetry and conservation laws" Physics Today, p. 34, (Mars 1964),

LIVRES GENERAUX

- (1) L. SCHIFF, Quantum Mechanics, Chapitre 7 : Symmetry in Quantum Mechanics, Mc Graw Hill (1968),
- (2) A. MESSIAH, Mécanique Quantique, Tome II, 3ème partie : Symétries et invariance, Dunod, Paris (1964),
- (3) L. LANDAU et E. LIFSHITZ, Mécanique Quantique, Chapitre XII, Editions Mir, Moscou (1965),
- (4) R. OMNES, Introduction à l'étude des Particules élémentaires, Chapitres II, III, IV et VI ; Ediscience, Paris (1970). Ce livre donne en particulier une introduction très simple à la théorie des groupes continus.

LIVRES CONSACRES A LA THEORIE DES GROUPEs

Un certain nombre de "grands classiques" :

- (5) E.P. WIGNER, "Group Theory and its Application to Quantum Mechanics", Academic Press, New York (1959)
- (6) M. HAMMERMESH, "Group Theory and its Application to Physical Problems", Addison-Wesley, Reading, Mars (1962)
- (7) P.H.E. MEIJER and E. BAUER Group Theory, North Holland, Amsterdam (1962)
- (8) M. TINKHAM, Group Theory and Quantum Mechanics, McGraw Hill, New York (1964)
- (9) Cours de G. RACAHA et de W. PAULI (en anglais)
dans Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften, vol.37, Springer Verlag

En français :

- {10} H. BACRY, Leçons sur la théorie des groupes, Dunod (1967)

- {11} Th. KAHAN, Théorie des groupes en physique classique et quantique, Dunod Paris, (1971)

- {12} J.P. SERRE, Représentation linéaire des groupes finis, Hermann (1971) ; un livre concis, agréable à lire et rigoureux d'un point de vue mathématique

- {13} Nous nous référerons à plusieurs reprises à l'ouvrage suivant : C.COHEN-TANNOUJJI, B. DIU et F. LALOE "Mécanique Quantique", Hermann Paris (1973)

- {14} Voir aussi le polycopié du cours de J. MARGERIE rédigé par A. BASTIN "Quelques applications de la théorie des groupes en spectroscopie" publication interne du Laboratoire de Physique de l'ENS

Tenseurs :

- {15} A. LICHNEROWICZ "Eléments de calcul tensoriel", collection Armand Colin (1962)