TABLE DES MATIERES

CHAPITRE 0 DU COURS (remplace partiellement les chapitres VI et VII du polycopié) .....pages 2 à 66

COMPLEMENTS

COMP. I-A : Points de vue d'Euler et de Lagrange en mécanique classique.....page 67

COMP. II-A : Classes résiduelles d'un sous-groupe, groupe quotient.....page 78

COMP. III-A : Forme de Killing ; opérateur de Casimir .....page 81

COMP. IV-A : Démonstration complète de la relation (IV-102).....page 89

COMP. IV-B : Relations de commutation entre générateurs infinitésimaux associés à des représentations projectives des groupes de Galilée et de Poincaré.....page 91

COMP. IV-C : Représentations projectives de dimension finie des groupes de Lie connexes .....page 131

COMP. V-A : Réflexions d'espace (parité).....page 138

COMP. V-B : Représentations du groupe de Galilée dans l'espace des états d'une particule sans spin.....page 146

COMP. VI-A : Homomorphisme entre les matrices de SU(2) et celles de rotation .....page 164

COMP. VII-A : Rappels élémentaires sur les tenseurs classiques.....page 173

COMP. VII-B : Les moments multipolaires.....page 188

COMP. IX-A : Opérateurs changeant la symétrie d'un vecteur d'état par permutation .....page 215

COMP. IX-B : Isospin d'un système de deux nucléons.....page 225

CHAPITRE 0

L'ALGÈBRE DES OPÉRATEURS DE MOMENT CINETIQUE

A - VALEURS PROPRES DE $\vec{J}^2$ ET J_z ; BASE STANDARD..... p. 4

1 - Quelques propriétés utiles..... p. 6

2 - Sous-espaces irréductibles..... p. 9

3 - Base standard..... p. 11

B - OPERATEURS DE ROTATION..... p. 16

1 - Définition, propriétés simples..... p. 16

2 - Structure du groupe..... p. 19

3 - Matrices de représentation du groupe..... p. 23

4 - Construction explicite des matrices..... p. 24

C - REUNION DE PLUSIEURS SOUS-SYSTEMES..... p. 30
(Composition des moments cinétiques)

1 - Position du problème..... p. 31

2 - Réduction de la représentation produit..... p. 34

D - TRANSFORMATION DES OBSERVABLES..... p. 40

1 - Opérateurs de rotation dans l'espace des observables..... p. 41

2 - Opérateurs scalaires, vectoriels..... p. 43

3 - Généralisation : opérateurs tensoriels irréductibles..... p. 48

E - THEOREME DE WIGNER-ECKART..... p. 53

1 - Démonstration..... p. 54

2 - Applications et exemples..... p. 58

N.B. : Ce chapitre correspond à une différente présentation du cours de celle du polycopié, auquel il emprunte des éléments des chapitres VI et VII. Il est destiné à être lu avant le polycopié lui-même, d'où sa numérotation zéro.

Ce chapitre est un premier contact avec un type de raisonnement fréquent dans l'étude des symétries en mécanique quantique. Il illustre bien la puissance de ce type de raisonnement car l'hypothèse dont nous partirons est très simple : nous admettrons seulement que l'on peut définir, dans l'espace des états & du système physique étudié, l'action de trois opérateurs hermitiques notés A, B et C, dont les relations de commutation s'écrivent (☆) :

$$\begin{aligned} [A, B] &= iC \\ [B, C] &= iA \\ [C, A] &= iB \end{aligned} \qquad (1)$$

(ces trois relations sont obtenues par permutation circulaire des opérateurs). Un exemple bien connu de tels opérateurs est, pour un système constitué d'une particule de position $\vec{R}$ et d'impulsion $\vec{P}$, les trois composantes (divisées par $\hbar$) de moment cinétique orbital $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$.

De cette seule hypothèse, nous allons voir qu'on peut tirer de nombreuses conclusions :

- Les valeurs propres de l'opérateur
  $D = A^2 + B^2 + C^2 \qquad (2)$
  ne peuvent prendre que certaines valeurs constituant un ensemble discret.
- La structure de l'espace des états & n'est pas quelconque : & se décompose en <u>sous-espaces "irréductibles"</u> engendrés par les kets de <u>"bases standard"</u> que nous définirons plus bas. La dimension de & et les valeurs propres de D sont reliées.
- Dans &, on peut définir l'action d'un groupe d'opérateurs R, que nous appellerons <u>"opérateurs de rotation"</u>, et dont les matrices ne sont pas quelconques.

(☆) On a :

$$[A, B]^+ = (AB - BA)^+ = B^+A^+ - A^+B^+ = -[A^+, B^+]$$

Le i des relations (1) est donc indispensable si A, B et C sont hermitiques.

- Toutes les observables (⋆) A agissant dans l'espace des états & peuvent subir les transformations unitaires associées aux R. Suivant l'effet de ces transformations, on peut distinguer parmi les A différents types d'opérateurs : opérateurs scalaires, vectoriels, tensoriels, etc... Cette distinction conduit au théorème de Wigner-Eckart, dont les applications sont nombreuses.

Une partie de ce chapitre n'est en fait qu'un rappel du cours de maîtrise de physique. Le problème des symétries en mécanique quantique est abordé ici de façon un peu technique, basée sur l'utilisation systématique de calculs sur des commutateurs. Ceci permet d'introduire assez rapidement des outils (en particulier le théorème de Wigner-Eckart, déjà mentionné) qui sont utiles à d'autres cours ; on peut aussi introduire simplement les notions d'algèbre et de groupe de Lie, de représentation irréductible, dans un cas particulier. Dans les chapitres suivants, nous reviendrons sur ces questions avec un point de vue plus général.

(⋆) *Rappelons que le mot "observable" désigne un opérateur hermitique à spectre complet.*

A - VALEURS PROPRES DE $\vec{J}$ ET $\vec{J}^2$, BASE STANDARD

Pour pouvoir utiliser des formules déjà connues sans changement de notations, nous poserons

$$A = J_x/\hbar \qquad B = J_y/\hbar \qquad C = J_z/\hbar \qquad (3\text{-a})$$

ce qui revient à assimiler A, B et C aux trois composantes d'un moment cinétique $\vec{J}$.

Alors :

$$D = \vec{J}^2/\hbar^2 \qquad (3\text{-b})$$

et les relations ([1]) peuvent êtres écrites

$$[J_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} J_{x_k} \qquad (4)$$

où

$$x_1 = x \qquad x_2 = y \qquad x_3 = z$$

et

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{si i, j, k, sont une permutation paire de 1,2,3.} \\ -1 & \text{si la permutation est impaire.} \\ 0 & \text{si deux des indices i, j, k sont égaux.} \end{cases} \qquad (5)$$

[dans le second membre de ([4]), la somme sur k ne comprend en fait jamais plus d'un terme, et souvent l'on n'écrit pas le $\sum_k$]. Nous désignons par "opérateur de moment cinétique" tout ensemble de 3 opérateurs satisfaisant aux relations de commutation ([4]) ; cette dénomination sera justifiée plus bas. Donnons quelques exemples d'opérateurs de ce type :

(i) Pour une particule sans spin, nous avons déjà cité le moment cinétique orbital $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$. Si la particule a un spin non-nul, on définit dans son espace des états de spin $\mathcal{E}_s$ l'action de trois opérateurs S_x, S_y et S_z satisfaisant les relations de commutation ([4]) :

$$[S_{x_i}, S_{x_j}] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_{x_k} \qquad (6\text{-a})$$

Comme tous les opérateurs de spin commutent avec tous les opérateurs orbitaux :

$$\left[L_{x_i} + S_{x_i} , L_{x_j} + S_{x_j}\right] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \left(L_{x_k} + S_{x_k}\right) \qquad (6\text{-b})$$

Donc $\vec{L} + \vec{S}$ est un opérateur de moment cinétique.

Exercice : montrer que $\vec{L} \times \vec{S}$ possède la même propriété.

(ii) Prenons pour $\mathcal{E}$ l'espace habituel à 3 dimensions et considérons une rotation de vecteur (⋆) infinitésimal $\delta\vec{a}$. Comme le montre la figure 1, cette rotation transforme un vecteur quelconque $\vec{V}$ en un vecteur $\vec{V}'$ donné par :

$$\vec{V}' = \vec{V} + \delta\vec{a} \times \vec{V} = (\mathbb{1} + \delta\vec{a}\times)\, \vec{V} \qquad (7)$$

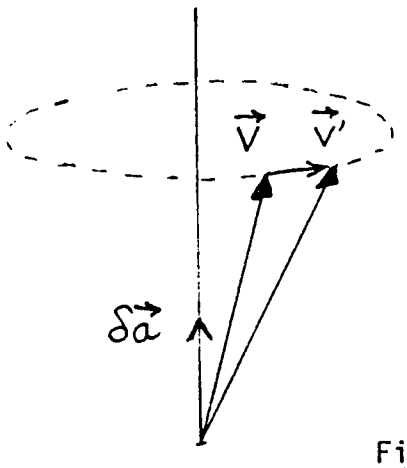


Fig. 1

Désignons par $\vec{u}$ le vecteur unitaire $\vec{a}/a$ et par $\delta\phi$ l'angle infinitésimal de rotation :

$$\delta\vec{a} = \vec{u}\, \delta\phi \qquad (8)$$

La relation (7) exprime que l'opérateur de rotation infinitésimale $\mathcal{R}$ est donné par

$$\mathcal{R}\,(\delta\vec{a}) = \mathcal{R}_{\vec{u}}\,(\delta\phi) = \mathbb{1} + \delta\vec{\alpha} \times \qquad (9)$$

(⋆) Le vecteur $\vec{a}$ d'une rotation est par définition porté par l'axe de rotation et de longueur a égale à l'angle de rotation (la direction de $\vec{a}$ détermine l'axe autour duquel l'angle de rotation est positif).

Introduisons les vecteurs unitaires $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$ et $\vec{e}_z$ des 3 axes de coordonnées ; notons δa_x, δa_y, δa_z les composantes de $\delta\vec{a}$ sur ces axes, u_x, u_y, u_z celles de $\vec{u}$. Nous avons :

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(\delta\vec{a}) &= \mathbb{1} + \delta a_x \, \vec{e}_x \times \\ &\quad + \delta a_y \, \vec{e}_y \times \\ &\quad + \delta a_z \, \vec{e}_z \times \\ &= \mathbb{1} + \delta a_x \, \mathfrak{M}_x + \delta a_y \, \mathfrak{M}_y + \delta a_z \, \mathfrak{M}_z \\ &= \mathbb{1} + \delta\vec{a}.\vec{\mathfrak{M}} \end{aligned} \qquad (10)$$

où $\vec{\mathfrak{M}}$ désigne l'ensemble de 3 matrices suivant :

$$\mathfrak{M}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathfrak{M}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathfrak{M}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (11)$$

Il est facile de vérifier que :

$$\left[\mathfrak{M}_{x_i}, \mathfrak{M}_{x_j}\right] = \sum_k \varepsilon_{ijk} \mathfrak{M}_{x_k} \qquad (12)$$

de sorte que, si nous posons :

$$J_{x_i} = i\hbar \, \mathfrak{M}_{x_i} \qquad (13)$$

l'opérateur $\vec{J}$ est un "opérateur de moment cinétique" agissant dans l'espace tridimensionnel habituel $\mathcal{E}_{(3)}$. Les matrices écrites en (11) étant réelles et antisymétriques, on voit immédiatement que J_x, J_y et J_z sont associés à des matrices hermitiques.

1 - Quelques propriétés utiles

On vérifie sans peine que :

$$\begin{aligned}&\left[a_x J_x + a_y J_y + a_z J_z \, , \, b_x J_x + b_y J_y + b_z J_z\right] \\ &\quad = i\hbar \, (a_x b_y - a_y b_x) J_z \\ &\quad + i\hbar \, (a_y b_z - a_z b_y) J_x \\ &\quad + i\hbar \, (a_z b_x - a_x b_z) J_z \end{aligned} \qquad (14)$$

relation que nous pouvons écrire de façon plus condensée :

$$[\vec{a} \cdot \vec{J} \, , \, \vec{b} \cdot \vec{J}] = i\hbar \, (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{J} \qquad (15)$$

Sous cette forme, nous voyons que les axes de coordonnées Oxyz ne jouent aucun rôle privilégié : avec un système d'axes orthonormé quelconque Ox'y'z', les relations de commutation entre composantes de $\vec{J}$ restent les mêmes.

Il est commode pour la suite d'introduire les opérateurs :

$$J_{\pm} = J_x \pm i \, J_y \qquad (16)$$

On a :

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar \, J_{\pm} \qquad (17\text{-a})$$

$$J_+ \, J_- = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar \, J_z \qquad (17\text{-b})$$

$$J_- \, J_+ = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar \, J_z \qquad (17\text{-c})$$

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2} (J_+ \, J_- + J_- \, J_+) + J_z^2 \qquad (17\text{-d})$$

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 $j \geqslant 0$. Quant à celles de J_z, nous les écrirons $m\hbar$ ($m \gtrless 0$).

(ii) Dans l'espace des états, on peut prendre une base orthonormée 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).

(☆) Nous ne donnons pas ici la démonstration de ces propriétés classiques, qui fait partie du programme de la maîtrise. On pourra la trouver dans tout ouvrage de mécanique quantique, par exemple la référence (13), chapitre VI, § C.

(iii) On a :

$$-j < m < +j \qquad (18)$$

Cette égalité peut être montrée à partir du fait que le carré de la norme des kets $J_+ |k, j, m\rangle$ 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) A tout ket $|k, j, m\rangle$, l'action 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 :

$$m = j \quad , j - 1 \quad , j - 2 \quad , -j + 1 \quad , -j$$

L'action de J_- (respectivement de J_+) sur chacun de ces kets donne le ket suivant de la famille (le précédent pour J_+), sauf sur le dernier (le premier pour J_+) sur lequel son action donne zéro.

(vii) Le nombre 2j est entier. Par suite :

. soit j est entier, ce qui est alors également vrai pour m ;
. soit j est "demi-entier" (une fraction du type p/2 où p est impair et positif), ce qui est alors aussi vrai pour m.

Introduisons alors l'ensemble d'opérateurs $K(\vec{a})$, dépendant de 3 paramètres réels a_x, a_y et a_z, condensés dans la notation $\vec{a}$:

$$\begin{aligned} K(\vec{a}) &= K(a_x, a_y, a_z) \\ &= a_x J_x + a_y J_y + a_z J_z \\ &= \vec{a} \cdot \vec{J} \end{aligned} \qquad (19)$$

L'ensemble de ces opérateurs constitue une algèbre (☆) $\mathcal{A}$ (sur le corps des réels) de dimension 3, si l'on définit la loi de composition interne de produit par un commutateur :

$$K(\vec{a}) * K(\vec{b}) = \frac{1}{i}\,[K(\vec{a}),\ K(\vec{b})]$$

$$= \hbar\ K(\vec{a} \times \vec{b}) \qquad (20)$$

(nous avons utilisé la relation (15)).

2 - Sous-espaces irréductibles

Nous allons maintenant définir une notion importante, celle de sous-espace irréductible vis-à-vis de l'ensemble des opérateurs $K(\vec{a}) = \vec{a} \cdot \vec{J}$ de l'algèbre $\mathcal{A}$.

Soit $\overline{\mathcal{E}}$ un sous-espace de l'espace $\mathcal{E}$ où agissent ces opérateurs. Nous supposons $\mathcal{E}$ stable (on dit aussi "globalement invariant") sous leur action, c'est-à-dire que :

$$|\overline{\psi}\rangle \in \overline{\mathcal{E}} \ \Rightarrow\ K(\vec{a})\ |\overline{\psi}\rangle \in \overline{\mathcal{E}} \qquad (21)$$

Si maintenant $\mathcal{E}$ peut s'écrire comme la somme directe

$$\overline{\mathcal{E}} = \overline{\overline{\mathcal{E}}}_1 + \overline{\overline{\mathcal{E}}}_2 \qquad (22)$$

de deux sous-espaces non-vides dont l'un au moins ($\overline{\overline{\mathcal{E}}}_1$ ou $\overline{\overline{\mathcal{E}}}_2$) est également stable sous l'effet de tous les opérateurs $K(\vec{a})$, l'espace $\overline{\mathcal{E}}$ est dit réductible (par rapport à l'ensemble $\mathcal{A}$ d'opérateurs). Si une telle décomposition est impossible, il est dit irréductible.

(☆) *Rappelons que, par définition, un ensemble $\mathcal{A}$ constitue une algèbre si $\mathcal{A}$ est un espace vectoriel dans lequel on a défini une loi supplémentaire de composition interne (produit noté *) bilinéaire et distributive par rapport à l'addition. En tout, 3 lois de composition, dont 2 internes, sont donc définis dans $\mathcal{A}$: multiplication par un scalaire λ, addition et multiplication internes.*

Supposons $\bar{\mathcal{E}}$ réductible et choisissons dans $\bar{\bar{\mathcal{E}}}_1$, stable sous l'action des opérateurs $K(\vec{a})$, une base orthonormée que nous prenons pour les p_1 premiers kets d'une base orthonormée $\{|\phi_k\rangle\}$ de $\bar{\mathcal{E}}$ (p_1 désigne la dimension de $\bar{\bar{\mathcal{E}}}_1$). Examinons alors l'allure des matrices $M(\vec{a})$ associées aux opérateurs $K(\vec{a})$; le fait que $\bar{\bar{\mathcal{E}}}_1$ soit supposé stable entraîne que :

$$M(\vec{a}) = \begin{pmatrix} \text{//} & 0 \\ 0 & \text{//} \end{pmatrix} \qquad (23)$$

où les zones hachurées symbolisent les éléments qui peuvent être non-nuls (l'hermiticité de la matrice impose que la nullité de tout élément en dessous de la diagonale principale entraîne celle d'un autre élément au dessus de cette diagonale). La matrice $M(\vec{a})$ est donc diagonalisée "par morceaux".

Remarques :

(i) Les matrices M n'ont la forme (23) que dans certaines bases particulières ; la réductibilité d'un espace ne se voit pas toujours du premier coup d'œil sur les matrices associées aux opérateurs dans une base quelconque.

(ii) Une matrice M donnée est toujours diagonalisable, puisqu'hermitique. Vis-à-vis d'une matrice unique, $\bar{\mathcal{E}}$ est donc toujours réductible (en somme directe de sous-espaces de dimension un).

Mais, pour la notion de réductibilité qui nous intéresse, le problème est la diagonalisation par morceaux simultanée de tous les $M(\vec{a})$ dans une même base (et non une base dépendant de $\vec{a}$).

Si $\bar{\mathcal{E}}$ est réductible, on peut donc le décomposer en deux sous-espaces stables $\bar{\bar{\mathcal{E}}}_1$ et $\bar{\bar{\mathcal{E}}}_2$; ces derniers peuvent éventuellement être eux-mêmes décomposés en somme directe de sous-espaces plus petits, etc...

Par application répétée de cette procédure, on aboutit au bout d'un certain temps à des espaces qui sont tous irréductibles (ceci arrive nécessairement au plus tard quand tous les sous-espaces sont de dimension un). Ces sous-espaces seront notés $\mathcal{E}_\tau$:

$$\overline{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_{\tau_1} \oplus \mathcal{E}_{\tau_2} \oplus \ldots \oplus \mathcal{E}_{\tau_k} \qquad (24)$$

Si la dimension de $\overline{\mathcal{E}}$ est infinie, cette somme peut éventuellement être également infinie.

Remarque :

Il n'est pas évident que cette série d'espaces $\mathcal{E}_\tau$ soit unique. Ce point sera discuté plus bas et nous verrons qu'effectivement les sous-espaces $\mathcal{E}_\tau$ peuvent, en général, dépendre de la façon dont la réduction de $\overline{\mathcal{E}}$ est effectuée.

3 - Base standard

Comme le montre la relation (16), il est évidemment équivalent de dire que $\mathcal{E}_\tau$ est globalement invariant sous l'action de toute composante J_u de $\vec{J}$ sur un vecteur u, ou sous l'action des opérateurs $K(\vec{a})$. Il est également équivalent de considérer l'invariance par rapport aux 3 opérateurs J_z, J_+ et J_- qui, par combinaison linéaire, permettent d'engendrer J_u.

Le sous-espace irréductible $\mathcal{E}_\tau$ étant stable 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 $\mathcal{E}_\tau$ et obtenir un certain nombre de valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ où $j = j_1, j_2$, 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, $\mathcal{E}_\tau$ 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 $K(\vec{a})$, et la représentation serait réductible.

Donc j a une valeur unique dans $\mathcal{E}_\tau$. A partir de maintenant, ce sous-espace sera noté $\mathcal{E}(\tau, j)$.

Soit $|\tau, j, m\rangle$ un ket de $\mathcal{E}(\tau, j)$, 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_-, qui sont vecteurs propres de J_z avec les valeurs propres $m\hbar$ ($m = j, j - 1, j - 2, \ldots - j$). Ces kets appartiennent à $\mathcal{E}(\tau, j)$ [invariant sous l'action de $J\pm$] et engendrent un sous-espace de $\mathcal{E}(\tau, j)$ qui n'est autre que $\mathcal{E}(\tau, j)$ lui même. En effet, ce sous-espace est invariant par construction sous l'action de J_z, J_+ et J_-, donc de tout opérateur $K(\vec{a})$. C'est donc un sous-espace invariant de $\mathcal{E}(\tau, j)$ et, ce dernier étant irréductible, ce ne peut être que $\mathcal{E}(\tau, j)$ 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 :

$$J_{\pm} |\tau, j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j + 1) - m(m \pm 1)}\ |\tau, j, m \pm 1\rangle \qquad (25)$$

Calculons pour cela la norme des deux membres de cette égalité. Il vient (puisque J_- est l'adjoint de J_+) :

$$\langle\tau, j, m|J_{\mp} J_{\pm}|\tau jm\rangle =$$

$$\hbar^2[j(j + 1) - m(m \pm 1)]\ \langle\tau, j, m \pm 1|\tau, j, m \pm 1\rangle \qquad (26)$$

Or, d'après (^{19}-b) et (^{19}-c), le premier membre de cette égalité vaut :

$$[j(j + 1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \mp m\hbar^2]\ \langle\tau, j, m|\tau, j, m\rangle$$

$$= \hbar^2[j(j + 1) - m(m \pm 1)] \qquad (27)$$

(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 (^{25}) peuvent donc nous fournir une base orthonormée de $\mathcal{E}(\tau, j)$; elles nous permettent de passer d'un ket $|\tau, j, m\rangle$ quelconque de cette base aux kets de valeurs

voisines de m (*).

En résumé, les propriétés des kets $|\tau, j, m\rangle$ que nous avons définis sont :

$$\begin{cases} \vec{J}^2 \, |\tau, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 \, |\tau, j, m\rangle \\ J_z \, |\tau, j, m\rangle = m\hbar \, |\tau, j, m\rangle \\ J_\pm \, |\tau, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \, |\tau, j, m \pm 1\rangle \end{cases} \tag{28}$$

On a, de plus, la relation d'orthogonalité :

$$\langle \tau, j, m | \tau', j', m' \rangle = \delta_{\tau\tau'} \, \delta_{jj'} \, \delta_{mm'} \tag{29}$$

[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 vecteurs propres d'opérateurs hermitiques lorsqu'ils sont associés à des valeurs propres différentes] et celle de fermeture :

$$\sum_{t,j,m} |\tau, j, m\rangle \langle \tau, j, m| = \mathbb{1} \tag{30}$$

[cette relation exprime que la somme des projecteurs sur les espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$ est l'opérateur identité].

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 :

(*) *Il faut en fait vérifier que si la relation (25) 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 (19-b) et (19-c).*

. Les éléments de matrice de J_x, J_y et J_z sont immédiatement donnés par (^{28}), compte tenu de la définition (^{18}) 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 $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$ etc] et les mêmes propriétés vis-à-vis du moment cinétique total $\vec{J}$: ils sont globalement invariants, et les formules (^{18}) permettent de calculer les matrices associées à tout opérateur J_u ou $K(\vec{a})$ à partir de la donnée du seul nombre j.

. 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, ... 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 :

$$|k_1, k_2, \ldots, k_i, \ldots ; j, m\rangle$$

à K_1, K_2, ..., K_i, $\vec{J}^2$ et J_z forment une base standard, à condition de fixer leurs phases relatives par :

$$J_{\pm}|k_1, k_2, \ldots, k_i, \ldots ; jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\,|k_1, k_2, \ldots, k_i, \ldots ; j, m\rangle \qquad (^{31})$$

On notera que, pour pouvoir écrire cette égalité, il ne suffit pas que $[J_z, K_i] = 0$, mais il faut également que $[J_\pm, K_i] = 0$. 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 $\mathcal{E}(\tau, j)$, 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 réprésentation 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], $\mathcal{E}(\tau, j)$ 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 $\mathcal{E}(\tau, j)$ trouvés, ni sur les représentations irréductibles trouvées.

Dans le cas général, la valeur propre $j(j+1)\hbar^2$ peut être $(2j+1) \times q(j)$ fois dégénérée [où $q(j)$ entier], et on trouvera nécessairement $q(j)$ sous-espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$ associés à la même valeur de j [le nombre τ prend $q(j)$ valeurs distinctes]. Par suite, la représentation de dimension $(2j+1)$ apparaîtra toujours $q(j)$ fois, indépendamment de la façon dont la décomposition a été effectuée. Cependant, les sous-espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$ peuvent, eux, dépendre de cette décomposition. Prenons par exemple, deux d'entre eux, $\mathcal{E}(\tau_1, j)$ et $\mathcal{E}(\tau_2, j)$, 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 orthonormés (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 $\mathcal{E}(\tau_1, j)$ et $\mathcal{E}(\tau_2, j)$; ces deux nouvelles familles engendrent deux sous-espaces $\mathcal{E}(\tau'_1, j)$ et $\mathcal{E}(\tau'_2, j)$ 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.

B - OPERATEURS DE ROTATION

1 - Définition, propriétés simples

Revenons sur l'exemple d'opérateur de moment cinétique

$$\vec{J} = i\hbar\,\vec{\mathcal{M}}$$

agissant dans l'espace habituel à 3 dimensions et introduit en ([13]). La composante

$$J_u = i\hbar\,\mathcal{M}_u$$

sur un vecteur unitaire quelconque étant hermitique, on voit facilement que l'opérateur

$$e^{-i\phi J_u/\hbar} = e^{\phi\,\mathcal{M}_u} = \mathbb{1} + \phi\,\mathcal{M}_u + \tfrac{1}{2}(\phi\,\mathcal{M}_u)^2 + \ldots \qquad ([32]\text{-a})$$

est unitaire (le paramètre ϕ est supposé réel) :

$$e^{i\phi J_u/\hbar}\;\; e^{-i\phi J_u/\hbar} = \mathbb{1} \qquad ([32]\text{-b})$$

En fait, cet opérateur est simplement l'opérateur $\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)$ de rotation d'un angle ϕ autour de $\vec{u}$. Pour des angles $d\phi$ infinitésimaux, ceci découle de la définition même de $\vec{\mathcal{M}}$ et $\vec{J}$ puisque, au premier ordre en $d\phi$:

$$e^{d\phi\,\mathcal{M}_u} = \mathbb{1} + d\phi\,\mathcal{M}_u + \ldots = \mathbb{1} + d\phi\;\vec{u}.\vec{\mathcal{M}} + \ldots \qquad ([33])$$

qui coïncide bien avec le second membre de ([10]). D'autre part, la rotation d'angle $\phi + d\phi$ autour de O peut être obtenue par produit d'une rotation d'angle ϕ et d'une autre d'angle $d\phi$ autour du même axe :

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi + d\phi) &= \mathcal{R}_{\vec{u}}(d\phi)\;\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\\ &= [\,\mathbb{1} + d\phi\,\mathcal{M}_u]\;\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\end{aligned} \qquad ([34]\text{-a})$$

Donc :

$$\frac{d}{d\phi}\,\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi) = \mathcal{M}_u\,\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi) \qquad ([34]\text{-b})$$

avec la "condition initiale" :

$$\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi = 0) = \mathbb{1} \qquad ([34]\text{-c})$$

Il est facile de vérifier que $e^{\phi\,\mathcal{M}_u}$ satisfait ces équations. Donc :

$$\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi) = e^{\phi\,\mathcal{M}_u} = e^{-i\phi J_u/\hbar} \qquad ([35]\text{-a})$$

Si l'on introduit le vecteur

$$\vec{a} = \phi \vec{u} \qquad (35\text{-b})$$

cette relation devient :

$$\mathcal{R}(\vec{a}) = e^{\vec{a}.\vec{m}} = e^{-i\vec{a}.\vec{J}/\hbar} \qquad (35\text{-c})$$

Revenons maintenant au cas général où $\vec{J}$ est un opérateur de moment cinétique quelconque. Par exponentiation, on peut associer à tout opérateur hermitique

$$\phi J_u = \vec{a}.\vec{J}$$

un opérateur unitaire :

$$R(\vec{a}) = e^{-iK(\vec{a})/\hbar} = e^{-i\vec{a}.\vec{J}/\hbar}$$
$$= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}(\vec{a}.\vec{J}) + \frac{1}{2\hbar^2}(\vec{a}.\vec{J})^2 + .. \qquad (36\text{-a})$$

qui sera aussi noté :

$$R_{\vec{u}}(\phi) = e^{-i\phi J_u/\hbar} \qquad (36\text{-b})$$

Nous avons :

$$R^{\dagger}(\vec{a}) = R^{-1}(\vec{a}) = R(-\vec{a}) \qquad (36\text{-c})$$

Prolongeant ce que nous avons obtenu dans un cas particulier, nous appellerons "opérateurs de rotation" les opérateurs R.

Dans les chapitres ultérieurs de ce polycopié, cette dénomination sera justifiée plus en détail. Cependant, dès ici, nous pouvons remarquer que les opérateurs R peuvent être utilisés pour effectuer une rotation sur le vecteur $\vec{a}$. En effet, nous formons l'opérateur hermitique :

$$K(\vec{b}) = \vec{b}.\vec{J} \qquad (37\text{-a})$$

en un autre opérateur hermitique par l'opération unitaire $\mathcal{R}(\vec{a})$ en posant

$$K' = R(\vec{a})\, K(\vec{b})\, R^{\dagger}(\vec{a}) \qquad (37\text{-b})$$

Lorsque $\vec{a}$ est un vecteur infinitésimal $\delta\vec{a}$:

$$R(d\vec{a}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\, d\vec{a}.\vec{J} + .. \qquad (38\text{-a})$$

et d'après (^{15}) :

$$K' = [\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} d\vec{a}.\vec{J}]\ [\vec{b}.\vec{J}]\ [\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} d\vec{a}.\vec{J}]$$

$$= \vec{b}.\vec{J} - \frac{i}{\hbar} [d\vec{a}.\vec{J}, \vec{b}.\vec{J}] + O(\delta a^2)$$

$$= \vec{b}.\vec{J} + (d\vec{a} \times \vec{b}).\vec{J}$$

$$= \vec{b}'.\vec{J} \qquad (^{38}\text{-b})$$

avec :

$$\vec{b}' = (\mathbb{1} + d\vec{a} \times)\ \vec{b} = \mathcal{R}(d\vec{a})\ \vec{b} \qquad (^{38}\text{-c})$$

Donc, K' appartient à l'algèbre $\mathcal{A}$:

$$K' = K(\vec{b}') \qquad (^{39})$$

et le paramètre $\vec{b}$ a subi la rotation infinitésimale écrite en (^{38}-c).

Par intégration comme en (^{34}), on peut ensuite passer à des rotations finies, et ainsi montrer que, quel que soit $\vec{a}$:

$$K' = R(\vec{a})\ [\vec{b}.\vec{J}]\ R^{\dagger}(\vec{a})$$

$$= \vec{b}'.\vec{J} = K(\vec{b}') \qquad (^{40}\text{-a})$$

avec :

$$\vec{b}' = \mathcal{R}(\vec{a})\ \vec{b} \qquad (^{40}\text{-b})$$

L'algèbre $\mathcal{A}$ est donc stable sous l'action des transformations unitaires construites à partir de ses propres opérateurs.

Remarque :

Les opérateurs R peuvent être utilisés également pour transformer d'autres opérateurs R, si l'on pose :

$$R' = R(\vec{a})\ R(\vec{b})\ R^{\dagger}(\vec{a}) \qquad (^{41}\text{-a})$$

$$= R(\vec{a}) \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\hbar\ \vec{b}.\vec{J})^n}{n!} \right\} R^{\dagger}(\vec{a})$$

Or :

$$R(\vec{a})\ [\vec{b}.\vec{J}]^n\ R^{\dagger}(\vec{a})$$

$$= R(\vec{a})\ [\vec{b}.\vec{J}]\ R^{\dagger}(\vec{a}) \times R(\vec{a})\ [\vec{b}.\vec{J}]\ R^{\dagger}(\vec{a}) \times ..$$

$$= (R(\vec{a})\ [\vec{b}.\vec{J}]\ R^{\dagger}(\vec{a}))^n = (\vec{b}'.\vec{J})^n \qquad (^{41}\text{-b})$$

de sorte que :

$$R' = R(\vec{b}') = e^{-i\vec{b}'.\vec{J}/\hbar} \qquad (41\text{-c})$$

l'ensemble $\mathcal{G}$ des opérateurs unitaires R est donc stable, comme l'algèbre $\mathcal{A}$.

2 - Structure de groupe

Rappelons qu'un groupe est un ensemble muni d'une loi de composition interne telle que

. tout élément du groupe ait un inverse
. il existe un élément neutre
. la propriété d'associativité soit vérifiée.

Pour l'ensemble $\mathcal{G}$ des opérateurs $R(\vec{a})$, il nous faut montrer que le produit de deux opérateurs R est encore un opérateur R (loi fermée) :

$$R(\vec{b})\ R(\vec{a}) = R(\vec{c}) \qquad \forall\ \vec{a},\vec{b} \qquad (42)$$

Alors, l'inverse sera évidemment $R(-\vec{a})$ et l'élément neutre $R(\vec{a} = \vec{o})$.

Lorsque $\vec{b}$ est parallèle à $\vec{a}$, la relation (42) est vérifiée si

$$\vec{c} = \vec{a} + \vec{b}$$

et la démonstration est immédiate.

Supposons maintenant $\vec{b}$ de direction quelconque, mais infinitésimal ; nous choisissons la direction de $\vec{a}$ comme axe Oz. Le problème est alors de calculer le produit :

$$R(d\vec{b})\ R(a\vec{e}_z) = [1 - \frac{i}{\hbar}\, d\vec{b}.\vec{J}]\ e^{-iaJ_z/\hbar} \qquad (43\text{-a})$$

où

$$d\vec{b}.\vec{J} = db_z\, J_z + \frac{db+}{2}\, J_- + \frac{db-}{2}\, J_+ \qquad (43\text{-b})$$

Nous avons utilisé les définitions (18) de $J_\pm$ et posé :

$$db_\pm = db_x \pm i db_y \qquad (43\text{-c})$$

D'après (28), nous obtenons :

$$\begin{aligned} R(d\vec{b})\ R(a\vec{e}_z)\ |\tau, j, m\rangle \\ = e^{-ima} \Big\{ & [1 - imdb_z]\ |\tau, j, m\rangle \\ & - \frac{i}{2}\, db_+ \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\ |\tau, j, m-1\rangle \\ & - \frac{i}{2}\, db_- \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\ |\tau, j, m+1\rangle \Big\} \end{aligned} \qquad (44)$$

Calculons d'autre part :

$$R(\vec{a} + \delta\vec{a}) \; |\tau, j, m\rangle \qquad \vec{a} = a\vec{e}_z$$

Nous obtenons, au premier ordre en δa :

$$R(\vec{a}+\delta\vec{a}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n [a\, J_z + (\delta\vec{a}.\vec{J})]^n$$

$$= R(\vec{a})$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \Big\{ (a\, J_z)^{n-1} \, (\delta\vec{a}.\vec{J})$$

$$+ (a\, J_z)^{n-2} \, (\delta\vec{a}.\vec{J}) \, (a\, J_z)$$

$$+ \ldots$$

$$+ (\delta\vec{a}.\vec{J}) \, (\vec{a}\, J_z)^{n-1} \Big\} + O(\delta a^2)$$

(45)

Posons

$$\delta a_{\pm} = \delta a_x \pm i\, \delta a_y \tag{46-a}$$

Alors

$$\delta\vec{a}.\vec{J} = \delta a_z \, J_z + \frac{\delta a_+}{2} J_- + \frac{\delta a_-}{2} J_+ \tag{46-b}$$

et, dans le second membre de (45), le terme en δa_z donne :

$$\delta a_z \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n a^{n-1} \, (m\hbar)^n \, n|\tau, j, m\rangle$$

$$= -i\delta a_z \, m \, e^{-iam} \, |\tau, j, m\rangle \tag{47-a}$$

Celui en δa_+ donne (☆) :

$$\frac{\delta a_+}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n a^{n-1} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \; (\hbar)^n$$

$$\times \Big\{ (m-1)^{n-1} + (m-1)^{n-2} \, m + \ldots + m^{n-1} \Big\} \, |\tau, j, m-1\rangle$$

(☆) Nous utilisons la relation

$$x^n - y^n = (x - y) \, (x^{n-1} + x^{n-2} \, y + \ldots + y^{n-1})$$

avec

$$x = m \qquad y = m-1$$

$$= \frac{\delta a_+}{2} \frac{1}{a} \left[e^{-ima} - e^{-i(m-1)a} \right] \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \; |\tau, j, m-1\rangle$$

$$= \frac{\delta a_+}{2} e^{-ima} \left[\frac{1-e^{ia}}{a} \right] \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \; |\tau, j, m-1\rangle \qquad (47\text{-b})$$

Enfin, le terme en δa_- donne de façon analogue :

$$\frac{\delta a_-}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n a^{n-1} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \; (\hbar)^n$$

$$\times \left\{ (m+1)^{n-1} + (m+1)\, m + \ldots + m^{n-1} \right\} |\tau, j, m+1\rangle$$

$$= \frac{\delta a_-}{2} e^{-ima} \left[\frac{e^{-ia}-1}{a} \right] \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \; |\tau, j, m+1\rangle \qquad (47\text{-c})$$

Nous voyons alors que l'identification avec le second membre de (44) est possible; si nous posons :

$$\begin{cases} \delta a_z = db_z \\ \delta a_\pm = \dfrac{\pm ia}{e^{\pm ia}-1} \, db_\pm \end{cases} \qquad (48\text{-a})$$

nous avons alors :

$$R(d\vec{b}) \; R(\vec{a}) = R(\vec{a} + \delta\vec{a}) \qquad (48\text{-b})$$

[Comme $(\delta a_+)^* = \delta a_-$, le vecteur $\delta\vec{a}$ est bien réel]. La loi de composition est donc bien fermée lorsque $\vec{b}$ est infinitésimal (un des opérateurs R est infiniment proche de $\mathbb{1}$). On vérifie bien sur (48) que si $a \to 0$,

$$\delta\vec{a} \to d\vec{b}$$

comme prévisible ; de même, si $d\vec{b}$ est parallèle à $\vec{a}$, $\delta b_\pm$ est nul, et l'on trouve $\delta\vec{a} = d\vec{b}$, ce qui était également prévisible.

Pour démontrer que la loi de composition est également fermée lorsque $\vec{b}$ est fini, nous allons procéder par intégration. Il est commode d'écrire la relation (48-a) sous la forme :

$$\delta\vec{a} = \bar{\bar{f}}(\vec{a}).d\vec{b} \qquad (48\text{-c})$$

où $\bar{\bar{f}}$ désigne un opérateur agissant dans l'espace habituel, associé à une matrice 3 x 3 dont on peut calculer les éléments à partir de (48-a).

Commençons par donner le schéma de la démonstration, qui sera ensuite précisée plus bas. Si l'on impose à $\vec{b}$ un premier accroissement

infinitésimal $d\vec{b}_1$ (en partant de $\vec{b} = \vec{0}$), les relations (^{48}) donnent :

$$R(d\vec{b}_1)\ R(\vec{a}) = R(\vec{a} + \delta\vec{a}_1) \qquad (^{49}\text{-a})$$

à condition de poser : $\delta\vec{a}_1 = \bar{\bar{f}}(\vec{a}).d\vec{b}_1$ $(^{49}\text{-b})$

Mais la même opération peut être recommencée à partir de la nouvelle valeur $\vec{a} + \delta\vec{a}_1$; en effet, si l'on choisit un accroissement $d\vec{b}_2$ et si l'on pose :

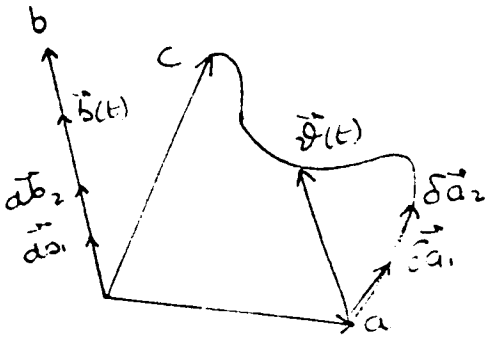
$$\delta\vec{a}_2 = \bar{\bar{f}}(\vec{a} + \delta\vec{a}_1).d\vec{b}_2 \qquad (^{49}\text{-c})$$

on a de même : $R(d\vec{b}_2)\ R(\vec{a} + \delta\vec{a}_1) = R(\vec{a} + \delta\vec{a}_1 + \delta\vec{a}_2)$ $(^{49}\text{-d})$

Or, le premier membre de cette égalité est égal d'après (^{49}-a) à $R(d\vec{b}_2)\ R(d\vec{b}_1) \times R(\vec{a})$. Si maintenant $d\vec{b}_1$ et $d\vec{b}_2$ sont choisis parallèles, le produit $R(d\vec{b}_2)\ R(d\vec{b}_1)$ vaut simplement $R(d\vec{b}_1 + d\vec{b}_2)$ et l'on obtient :

$$R(d\vec{b}_1 + d\vec{b}_2)\ R(\vec{a}) = R(\vec{a} + \delta\vec{a}_1 + \delta\vec{a}_2)$$

De proche en proche, on peut ainsi arriver au produit $R(\vec{b})\ R(\vec{a})$, comme schématisé sur la figure.



De façon plus précise, on peut introduire un paramètre t réel (que l'on peut interpréter comme le temps), variant entre 0 et 1 de sorte que le vecteur

$$\vec{b}'(t) = t\,\vec{b} \qquad (^{50}\text{-a})$$

varie entre 0 et $\vec{b}$ en prenant des accroissements toujours parallèles. Le vecteur $\vec{\vartheta}(t)$ est, d'autre part, défini par l'équation différentielle

$$\frac{d}{dt}\vec{\vartheta}(t) = \bar{\bar{f}}[\ \vec{a} + \vec{\vartheta}(t)\ ].\vec{b} \qquad (^{50}\text{-b})$$

avec la condition initiale : $\vec{\vartheta}(t = 0) = \vec{0}$ $(^{50}\text{-c})$

On a, quel que soit t : $d\vec{\vartheta} = \bar{\bar{f}}[\ \vec{a} + \vec{\vartheta}\ ].d\vec{b}'$ $(^{50}\text{-d})$

et la comparaison avec (^{49}-b) et (^{49}-c) montre que $d\vec{\vartheta}$ correspond bien aux accroissements δa_1 , δa_2 , etc... Changeons dans (^{48}-b) $\vec{a}$ en $\vec{a} + \vec{\vartheta}$ et $d\vec{b}$ en $d\vec{b}'$ pour écrire : $R(d\vec{b}')\ R(\vec{a} + \vec{\vartheta}(t)) = R(\vec{a} + \vec{\vartheta} + d\vec{\vartheta})$ $(^{50}\text{-e})$

Donc :
$$d\{\ R(\vec{a} + \vartheta(t))\ \} = [\ R(d\vec{b}') - \mathbb{1}\ ]\ R(\vec{a} + \vec{\vartheta}(t))$$
$$= [\ -\frac{i}{\hbar}(\vec{b}.\vec{J})dt\ ]\ R(\vec{a} + \vec{\vartheta}(t)) \qquad (^{50}\text{-f})$$

Par intégration, on obtient (★) : $R(\vec{a} + \vec{\vartheta}(t)) = R(\vec{b}'(t))\ R(\vec{a})$ $(^{50}\text{-g})$

et donc, pour t = 1 : $R(\vec{c}) = R(\vec{b})\ R(\vec{a})$

avec : $\vec{c} = \vec{a} + \vec{\vartheta}(1)$.

(★) *On vérifie immédiatement que (^{50}-f) est obtenu par dérivation de (^{50}-g) par rapport à t.*

3 - Matrices de réprésentation du groupe

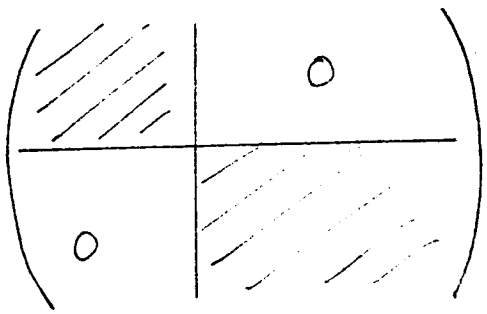
Soit $\{|u_n>\}$ une base de l'espace & où agissent les opérateurs J_u. Dans cette base, les opérateurs unitaires $R(\vec{a})$ sont associés à des matrices M d'éléments :

$$M_{nn'}(\vec{a}) = <u_n|e^{-i\vec{a}.\vec{J}/\hbar}|u_{n'}> \qquad (51)$$

Les matrices M ont la dimension de l'espace &, éventuellement infinie ; Elles sont unitaires si la base $\{|u_n>\}$ est choisie orthonormée. Nous les appellerons "matrices de rotation".

Au produit de deux opérateurs R correspond le produit des matrices M correspondantes. Ces matrices sont régulières (⋆). On dit qu'elles fournissent une représentation du groupe $\mathcal{G}$.

La représentation est dite réductible si, par un changement de base, on peut mettre toutes ces matrices sous une forme diagonale par blocs :



laissant invariants deux sous-espaces orthogonaux. Dans le cas contraire, elle est dite irréductible . Comme plus haut, on note que la question est de diagonaliser par blocs l'ensemble des matrices du groupe (et non chaque matrice isolément) par un changement de base unique ; la réductibilité n'est donc pas la règle générale.

La notion de représentation d'un groupe a été définie ici pour un groupe $\mathcal{G}$ particulier, celui des opérateurs $R(\vec{a})$; elle s'étend cependant à tous les groupes, et nous y reviendrons dans les chapitres ultérieurs.

(⋆) $M^{-1}(\vec{a})$ existe et est égale à $M(-\vec{a})$; le déterminant de ces matrices n'est pas nul .

Prenons un sous-espace irréductible $\mathcal{E}(\tau, j)$. Etant stable sous l'action des J_u, il l'est également sous l'action des opérateurs

$$R_{\vec{u}}(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n [\phi J_u]^n \qquad (52\text{-a})$$

Les sous-espaces $\mathcal{E}(\tau, j)$ fournissent donc le moyen de réduire la représentation des matrices $M_{nn'}$. Les représentations obtenues sont d'ailleurs irréductibles. En effet, si tout sous-espace invariant sous l'action des J_u l'est également sous l'action des opérateurs $R_{\vec{u}}(\phi)$, l'inverse est également vrai ; il suffit pour s'en convaincre, de considérer les opérateurs particuliers :

$$R_{\vec{u}}(d\phi) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} d\phi \, J_u \qquad (52\text{-b})$$

les relations

$$|\psi\rangle \in \bar{\bar{\mathcal{E}}} \qquad R_{\vec{u}}(d\phi) \; |\psi\rangle \in \bar{\bar{\mathcal{E}}} \qquad (52\text{-c})$$

entraînant nécessairement

$$J_u \; |\psi\rangle \in \bar{\bar{\mathcal{E}}} \qquad (52\text{-d})$$

Les notions d'irréductibilité par rapport à $\mathcal{A}$ ou à $\mathcal{G}$ sont donc équivalentes.

4 - Construction explicite des matrices

Dans une base orthonormée standard $\{|\tau, j, m\rangle\}$, les éléments de matrice seront notés :

$$R^{[j]}_{mm'}(\vec{a}) = \langle \tau, j, m \mid e^{-i\vec{a}.\vec{J}/\hbar} \mid \tau, j, m' \rangle \qquad (53\text{-a})$$

Utilisant (^{28}) et (^{52}-a), on constate qu'ils dépendent de j, m et m', mais pas de τ (et qu'ils seraient nuls si le bra et le ket étaient repérés par des valeurs différentes des indices j ou τ). Lorsque j est fixé et que m et m' varient (entre +j et -j), on obtient des matrices $R^{[j]}$ de dimension $(2j + 1)(2j + 1)$, qui fournissent des représentations irréductibles du groupe $\mathcal{G}$.

La relation (^{53}-a) est équivalente à :

$$R(\vec{a}) \; |\tau, j, m\rangle = \sum_{m'} R^{[j]}_{m'm}(\vec{a}) \; |\tau, j, m'\rangle \qquad (53\text{-b})$$

Construisons explicitement les matrices $(R^{[j]})$ dans des cas simples, c'est-à-dire pour les valeurs les plus petites de j. Pour cela, il suffit de choisir une valeur de j, d'utiliser les relations standard (^{28}) pour calculer les matrices associées à J_+ , J_- et J_z, donc celles associées à J_x, J_y et J_z ou J_u pour $\vec{u}$ quelconque. Par exponentiation, on obtient ensuite les matrices R elles-mêmes.

a) j = 0 (moment cinétique nul)

Cette valeur de j ne nous conduit qu'à la représentation dite "triviale", de dimension 1. En effet, m ne peut être que nul [relation (^{20})] et les formules (^{28}) donnent :

$$(J_u) = (0) \qquad (54\text{-a})$$

Pour les opérateurs de rotation, on vérifie immédiatement que :

$$\left(R^{[0]}_{\vec{u}}(\phi) \right) = (1) \qquad (54\text{-b})$$

quels que soient $\vec{u}$ et ϕ .

b) j = 1/2

Les matrices sont alors des matrices 2 x 2. On obtient immédiatement (✯) :

$$(J_z) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (55\text{-a})$$

$$J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad J_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (55\text{-b})$$

Donc, d'après la définition de $J_\pm$:

$$(J_x) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (J_y) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad (55\text{-c})$$

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 x 2, multipliée par $3\hbar^2/4$.

(✯) Par convention, et quelle que soit la valeur de j, nous rangeons toujours les vecteurs de base par ordre de m décroissant :

$$|\tau, j, j\rangle, |\tau, j, j-1\rangle, |\tau, j, j-2\rangle, \ldots, |\tau, j, -j\rangle$$

Passons maintenant aux opérateurs de rotation finie. Par exemple, par exponentiation de (^{55}-a), on trouve sans difficultés :

$$\left(R_z(\phi) \right) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \qquad (^{56}\text{-a})$$

De même, pour une rotation autour de Ou, où l'opérateur infinitésimal est :

$$J_u = u_x J_x + u_y J_y + u_z J_z$$

On peut utiliser les propriétés des matrices de Pauli [$\sigma_u^2 = 1$] pour obtenir :

$$\left(R^{[1/2]}_{\vec{u}}(\phi) \right) = (e^{-i\phi J_u/\hbar}) = \cos\frac{\phi}{2} - \frac{2i}{\hbar}\sin\frac{\phi}{2}\,\vec{u}.\vec{J}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} - i\,u_z \sin\frac{\phi}{2} & (-i\,u_x - u_y)\sin\frac{\phi}{2} \\ (-i\,u_x + u_y)\sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} + i\,u_z \sin\frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \qquad (^{56}\text{-b})$$

Remarque :

Dans notre raisonnement, nous avons procédé par conditions nécessaires, montrant quelle forme doivent avoir des représentations irréductibles du groupe $\mathcal{G}$. Réciproquement, il est donc utile de vérifier que les matrices obtenues conviennent effectivement ; mais il est trivial de vérifier que les matrices (^{55}) satisfont aux relations de commutation requises. On peut également contrôler que les opérateurs $e^{-i\phi J_u/\hbar}$ constituent bien un groupe (comme nous l'avons établi plus haut), car la relation (^{56}-b) donne la matrice unitaire 2 x 2 de déterminant 1 la plus générale.

c) $j = 1$

La dimension de la représentation est 1 dans ce cas et [cf note précédente pour l'ordre des vecteurs de base] :

$$(^{57}\text{-a}) \qquad (J_z) = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (J_x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (J_y) = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Par un raisonnement analogue à celui qui vient d'être fait dans le cas où $j = 1/2$, on trouve :

$$\left(R^{[1]}_{\vec{u}_z}(\phi) \right) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{+i\phi} \end{pmatrix} \qquad (^{57}\text{-b})$$

et, par exemple :

$$\left(R^{[1]}_{\vec{u}_y}(\phi)\right) = \begin{pmatrix} (1+\cos\phi)/2 & -\sin\phi/\sqrt{2} & (1-\cos\phi)/2 \\ \sin\phi/\sqrt{2} & \cos\phi & -\sin\phi/\sqrt{2} \\ (1-\cos\phi)/2 & \sin\phi/\sqrt{2} & (1+\cos\phi)/2 \end{pmatrix} \qquad (57\text{-c})$$

De façon analogue, on pourrait construire la matrice $(R^{[1]}_{\vec{u}}(\phi))$ pour $\vec{u}$ quelconque.

Les matrices ainsi obtenues sont en fait bien connues : nous allons voir qu'elles ne sont autres que les matrices de rotation $(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi))$ dans l'espace habituel, écrites simplement dans une base différente.

Un tel résultat était prévisible ; dans l'espace habituel $\mathcal{E}_{(3)}$ à 3 dimensions, nous avons défini plus haut l'action d'un opérateur $J = i\hbar\,\vec{\mathcal{M}}$ satisfaisant aux relations de commutation d'un moment cinétique. Tout le raisonnement que nous effectuons ici par un espace $\mathcal{E}$ quelconque s'applique donc à $\mathcal{E}_{(3)}$ et, en conséquence :

$$\mathcal{E}_{(3)} = \sum_{\oplus} \mathcal{E}(\tau, j)$$

Quelles sont les valeurs de j possibles à priori, la dimension totale de l'espace étant 3 ? Nous pouvons avoir :

3 fois $j = 0$
ou 1 fois $j = 0$, 1 fois $j = 1/2$
ou 1 fois $j = 1$

Les deux premières possibilités sont exclues par le fait qu'il n'existe pas de direction (réelle ou complexe) dans $\mathcal{E}_{(3)}$ qui reste invariante sous l'action de toutes les rotations. Nous avons donc une fois $j = 1$ et les matrices de rotation $(\mathcal{R})$ sont irréductibles. Elles ne peuvent donc être que les matrices que nous venons de construire, à un changement de base près (matrices semblables).

On peut effectuer de façon explicite le changement de base (complexe) qui 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 § D suivant. Nous allons donc appliquer dans l'espace habituel la même procédure

que celle qui nous a conduit aux expressions (^{57}) 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 [relations (^{11})] l'expression des rotations infinitésimales, et en particulier :

$$\mathcal{R}_{\vec{u}_z}(\delta\phi) = 1 + \delta\phi\, \mathfrak{M}_z \qquad (^{58}\text{-a})$$

où :

$$\mathfrak{M}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (^{58}\text{-b})$$

Comme dans un espace $\mathcal{E}(\tau, j)$, diagonalisons l'opérateur de rotation infinitésimale autour de Oz. Il est facile de diagonaliser (^{58}-b) et on obtient la base (de vecteurs définis à un facteur de phase près) :

$$\begin{cases} |\vec{e}_+\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left[|\vec{e}_x\rangle + i|\vec{e}_y\rangle\right] \\ |\vec{e}_o\rangle = |\vec{e}_z\rangle \\ |\vec{e}_-\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left[|\vec{e}_x\rangle - i|\vec{e}_y\rangle\right] \end{cases} \qquad (^{59})$$

Il nous reste, comme en (^{25}), à définir la phase relative des vecteurs de base. L'opérateur qui correspond ici à J_+ est ici :

$$i\hbar\, \mathfrak{M}_+ = i\hbar\, (\mathfrak{M}_x + i\, \mathfrak{M}_y) \qquad (^{60}\text{-a})$$

où $\mathfrak{M}_x$ et $\mathfrak{M}_y$ sont les matrices écrites en (^{11}), [le $i\hbar$ s'introduit conformément à (^{13})]. On obtient dans la base initiale $|\vec{e}_x\rangle$, $|\vec{e}_y\rangle$, $|\vec{e}_z\rangle$:

$$i\hbar\, \mathfrak{M}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -i \\ 1 & i & 0 \end{pmatrix} \qquad (^{60}\text{-b})$$

Par suite :

$$\begin{cases} i\hbar\, \mathfrak{M}_+|\vec{e}_+\rangle = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}\left[|\vec{e}_z\rangle - |\vec{e}_z\rangle\right] = 0 \\ i\hbar\, \mathfrak{M}_+|\vec{e}_z\rangle = \hbar\left[-|\vec{e}_x\rangle - i|\vec{e}_y\rangle\right] = -\hbar\sqrt{2}|\vec{e}_+\rangle \\ i\hbar\, \mathfrak{M}_+|\vec{e}_-\rangle = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}\left[|\vec{e}_z\rangle + |\vec{e}_z\rangle\right] = \hbar\sqrt{2}|\vec{e}_o\rangle \end{cases} \qquad (^{60}\text{-c})$$

Pour obtenir exactement les relations (^{57}-a), nous sommes conduits à prendre la base :

$$|\vec{e}_{+1}\rangle = -|\vec{e}_{+}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\vec{e}_x\rangle + i|\vec{e}_y\rangle\right]$$

$$|\vec{e}_0\rangle = |\vec{e}_z\rangle$$

$$|\vec{e}_{-1}\rangle = |\vec{e}_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\vec{e}_x\rangle - i|\vec{e}_y\rangle\right] \qquad (^{61}\text{-a})$$

(c'est la même que la précédente, à un changement près de signe du premier vecteur).

Compte tenu de l'expression (^{11}), des matrices $\mathfrak{M}$ 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 :

$$\mathfrak{M}_x|\vec{e}_{+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathfrak{M}_x\left[|\vec{e}_x\rangle + i|\vec{e}_y\rangle\right] = -\frac{i}{\sqrt{2}}|\vec{e}_z\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}|\vec{e}_0\rangle$$

$$\mathfrak{M}_x|\vec{e}_0\rangle = \mathfrak{M}_x|\vec{e}_z\rangle = -|\vec{e}_y\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}\left[|\vec{e}_{+1}\rangle + |\vec{e}_{-1}\rangle\right]$$

$$\mathfrak{M}_x|\vec{e}_{-1}\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\mathfrak{M}_x\left[|\vec{e}_x\rangle - i|\vec{e}_y\rangle\right] = -\frac{i}{\sqrt{2}}|\vec{e}_0\rangle \qquad (^{61}\text{-b})$$

de sorte que $\mathfrak{M}_x$ devient, dans la nouvelle base :

$$\tilde{\mathfrak{M}}_x = -\frac{i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (^{61}\text{-c})$$

Cette expression, multipliée par $i\hbar$, redonne bien la matrice de J_x écrite en (^{57}-a). Un calcul tout à fait analogue permettrait de vérifier la même propriété pour $\tilde{\mathfrak{M}}_y$ 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 $(\mathfrak{R}_{\vec{u}}(\phi))$ deviennent identiques aux matrices $R^{[J=1]}_{\vec{u}}(\varphi)$.

Nous aurons besoin plus loin de la matrice S de changement de base qui permet de passer des $|\vec{e}_x\rangle$, $|\vec{e}_y\rangle$, $|\vec{e}_z\rangle$ aux $|\vec{e}_{+1}\rangle$, $|\vec{e}_0\rangle$, $|\vec{e}_{-1}\rangle$.

Cette matrice s'écrit :

$$S = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (62\text{-a})$$

Rappelons que, par convention, la matrice de changement de base contient dans ses colonnes les composantes des nouveaux vecteurs de base sur les anciens :

$$(\vec{e}_{+1} \quad \vec{e}_o \quad \vec{e}_{-1}) = (\vec{e}_x \quad \vec{e}_y \quad \vec{e}_z) \begin{pmatrix} S \end{pmatrix} \qquad (62\text{-b})$$

S est une matrice unitaire

$$S^\dagger = S^{-1} \qquad (62\text{-c})$$

Dire que les matrices $(\mathfrak{R})$ s'identifient aux matrices $(R^{[j=1]})$ par le changement de base considéré, revient à écrire :

$$(R^{[j=1]}_{\vec{u}}(\phi)) = (S^{-1})\,(\mathfrak{R}_{\vec{u}}(\phi))\,(S) \qquad (63\text{-a})$$

ou, inversement :

$$(\mathfrak{R}_{\vec{u}}(\phi)) = (S)\,(R^{[j=1]}_{\vec{u}}(\phi))\,(S^{-1}) \qquad (63\text{-b})$$

C - REUNION DE PLUSIEURS SOUS-SYSTEMES

(composition des moments cinétiques).

Considérons deux systèmes physiques $\mathcal{S}_1$ et $\mathcal{S}_2$ et le système physique $\mathcal{S}$ constitué par l'ensemble des deux précédents. Si $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ désignent les espaces des états associés à $\mathcal{S}_1$ et $\mathcal{S}_2$ respectivement, celui associé à $\mathcal{S}$ s'écrit :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \qquad (64\text{-a})$$

Nous savons que l'action d'un opérateur de moment cinétique [c'est-à-dire satisfaisant les relations de commutation (4)] $\vec{J}_1$ a été définie dans $\mathcal{E}_1$, et que de même, l'action de $\vec{J}_2$ a été définie dans $\mathcal{E}_2$. On vérifie alors immédiatement que :

(i) $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ sont encore des opérateurs de moment cinétique lorsqu'ils sont considérés comme des opérateurs (prolongés) agissant dans &.

(ii) l'opérateur

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \qquad (64\text{-b})$$

est également un opérateur de moment cinétique. Nous l'appellerons "moment cintétique total".

1 - Position du problème

Nous pouvons définir des groupes $\mathcal{G}_1$ et $\mathcal{G}_2$ d'opérateurs de rotation agissant respectivement dans $\&_1$ ou $\&_2$ ou, par prolongement, dans & :

$$R_1(\vec{a}_1) = \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{a}_1 . \vec{J}_1 \right\} \in \mathcal{G}_1$$

$$R_2(\vec{a}_2) = \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{a}_2 . \vec{J}_2 \right\} \in \mathcal{G}_2 \qquad (65\text{-a})$$

Nous pouvons également introduire les opérateurs :

$$R(\vec{a}) = \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{a} . \vec{J} \right\}$$

$$= R_1(\vec{a}_1 = \vec{a}) \times R_2(\vec{a}_1 = \vec{a}) \in \mathcal{G} \qquad (65\text{-b})$$

ou l'ensemble, plus large (puisque $\vec{a}_1$ et $\vec{a}_2$ ne sont pas nécessairement égaux) d'opérateurs :

$$T(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = R_1(\vec{a}_1) \times R_2(\vec{a}_2) \qquad (65\text{-c})$$

Il est aisé de calculer le produit de deux opérateurs T et de vérifier que l'ensemble des T constitue un groupe noté :

$$\mathcal{G}_1 \circledast \mathcal{G}_2$$

dont les éléments dépendent de 6 paramètres réels (les composantes de $\vec{a}_1$ et $\vec{a}_2$). Le groupe $\mathcal{G}$ des opérateurs $R(\vec{a})$ constitue un sous-groupe de $\mathcal{G}_1 \circledast \mathcal{G}_2$ (*) :

$$\mathcal{G} \subset \mathcal{G}_1 \circledast \mathcal{G}_2 \qquad (66\text{-a})$$

comme, d'ailleurs, les groupes $\mathcal{G}_1$ et $\mathcal{G}_2$:

$$\mathcal{G}_1 \subset \mathcal{G}_1 \circledast \mathcal{G}_2 \qquad \mathcal{G}_2 \subset \mathcal{G}_1 \circledast \mathcal{G}_2 \qquad (66\text{-b})$$

(*) $\mathcal{G}$ est obtenu lorsque $\vec{a}_1 = \vec{a}_2$; les sous-groupes $\mathcal{G}_1$ et $\mathcal{G}_2$ lorsque $\vec{a}_2 = 0$ ou $\vec{a}_1 = 0$ respectivement.

Les espaces des états $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ peuvent être décomposés en somme directe d'espaces irréductibles :

$$\mathcal{E}_1 = \sum_{\substack{\oplus \\ \tau_1 j_1}} \mathcal{E}(\tau_1, j_2) \qquad \mathcal{E}_2 = \sum_{\substack{\oplus \\ \tau_2 j_2}} \mathcal{E}(\tau_2, j_2) \tag{67-a}$$

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 par produit tensoriel, s'écrit :

$$\mathcal{E} = \sum_{\substack{\oplus \\ \tau_1 \tau_2 j_1 j_2}} \mathcal{E}(\tau_1, \tau_2 ; j_1, j_2) \tag{67-b}$$

où :

$$\mathcal{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2) = \mathcal{E}(\tau_1, j_1) \otimes \mathcal{E}(\tau_2, j_2) \tag{67-c}$$

Ce sous-espace $\mathcal{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2)$ de $\mathcal{E}$ est engendré par les kets :

$$|\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2 \, m_1 m_2\rangle = |\tau_1 j_1 m_1\rangle \otimes |\tau_2 j_2 m_2\rangle \tag{67-d}$$

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.

$\mathcal{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2)$ est invariant sous l'action de toute fonction de $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$, en particulier sous celle du moment cinétique total $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$. En d'autres termes, cet espace est invariant sous l'action des opérateurs de $\mathcal{G}_{j_1}$, $\mathcal{G}_{j_2}$ et de $\mathcal{G}_{j_1} \otimes \mathcal{G}_{j_2}$. A l'intérieur de $\mathcal{E}(\tau_1 \tau_2 ; j_1 j_2)$, l'opérateur $T(\vec{a}_1, \vec{a}_2)$ a pour éléments de matrice :

$$T^{[j_1, j_2]}_{m_1 m_2 ; m'_1 m'_2}(\vec{a}_1, \vec{a}_2) =$$

$$\langle \tau_1 j_1 m_1 \, ; \, \tau_2 j_2 m_2 | e^{-i\vec{a}_1 . \vec{J}_1 / \hbar} e^{-i\vec{a}_2 . \vec{J}_2 / \hbar} | \tau_1 j_1 m'_1 \, ; \, \tau_2 j_2 m'_2 \rangle$$

$$= R^{[j_1]}_{m_1 m'_1}(\vec{a}_1) \qquad R^{[j_2]}_{m_2 m'_2}(\vec{a}_2) \tag{68-a}$$

matrice simplement obtenue par produit tensoriel des matrices $\left(R^{[j_1]}(\vec{a}_1)\right)$ et $\left(R^{[j_2]}(\vec{a}_2)\right)$; la première de ces égalités est équivalente à :

$$R_1(\vec{a}_2) \; R_2(\vec{a}_2) \; |\tau_1, j_1, m_1 \, ; \, \tau_2, j_2, m_2\rangle$$

$$= \sum_{m'_1 m'_2} \left(T^{[j_1, j_2]}_{m'_1 m'_2 ; m_1 m_2}(\vec{a}_1, \vec{a}_2) \right)$$

$$|\tau_1 \, , j_1, m'_1 ; \tau_2, j_2, m'_2\rangle$$

(68-b)

Les matrices T sont inversibles et, au produit d'opérateurs T, correspond le produit des matrices (comme au § B-3) ; nous dirons qu'elles fournissent une "représentation" du groupe $\mathcal{G}_{j_1} \otimes \mathcal{G}_{j_2}$.

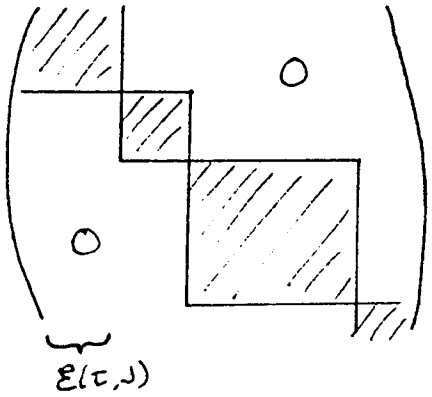
Cette représentation est, de plus, irréductible. En effet, un sous-espace $\mathcal{E}(\tau_1, \tau_2 ; j_1, j_2)$ qui serait globalement invariant sous l'action de tous les opérateurs du groupe produit serait en particulier invariant sous l'influence des opérateurs infinitésimaux (associés à $\delta\phi_1$ 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 $|\psi_{\tau_1\tau_2 j_1 j_2}\rangle$ 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 (^{65}-c).

Revenons maintenant au groupe $\mathcal{G}_j$. Il est clair que ce groupe, sous-groupe de $\mathcal{G}_{j_1} \otimes \mathcal{G}_{j_2}$, est du même type que $\mathcal{G}_{j_1}$ et $\mathcal{G}_{j_2}$ eux-mêmes ; ses éléments dépendent aussi de 3 paramètres réels et peuvent être engendrés à partir d'un opérateur de moment cinétique $\vec{J}$. L'ensemble $\mathcal{G}_j$ est donc un groupe d'opérateurs de rotation auquel tous les raisonnements du § B précédent sont applicables. Comme pour $\mathcal{G}_{j_1} \otimes \mathcal{G}_{j_2}$, les matrices T fournissent une représentation [il suffit de faire $\vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}$ dans (^{68})] que nous appellerons "représentation produit". Le problème qui nous intéresse ici est de savoir si cette représentation est réductible ou non (☆) ; dans l'affirmative, nous désirons décomposer $\mathcal{E}(\tau_1\ \tau_2\ j_1\ j_2)$ en sous-espaces irréductibles. En d'autres termes, nous voulons effectuer sur la représentation de $\mathcal{G}_j$ les mêmes opérations qu'au § B-3 et 4 précédents.

(☆) *Diagonaliser par blocs les matrices de $\mathcal{G}_j$ n'implique pas nécessairement la même diagonalisation pour toutes les matrices de $\mathcal{G}_{j_1} \otimes \mathcal{G}_{j_2}$, dont $\mathcal{G}_j$ est un sous-ensemble. Donc, la représentation peut être réductible vis-à-vis de $\mathcal{G}_j$ sans l'être vis-à-vis de $\mathcal{G}_{j_1} \otimes \mathcal{G}_{j_2}$.*

Si l'on peut réduire la représentation produit, c'est qu'il existe une autre base de $\mathcal{E}(\tau_1\tau_2 \; ; \; j_1 j_2)$ où :

$$(\mathcal{R}(\vec{a})) \; = \; (\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)) \; =$$



(69-a)

avec :

$$\mathcal{E}(\tau_1\tau_2 \; ; \; j_1 j_2) \; = \; \sum_{\tau, \, J} \oplus \; \mathcal{E}(\tau, \, J) \qquad (69\text{-b})$$

[nous simplifions la notation $\mathcal{E}(\tau_1\tau_2 \; ; \; \tau \; J)$, qui serait plus complète, en $\mathcal{E}(\tau, \, J)$].

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]), 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 $M\hbar$ de l'opérateur :

$$J_z \; = \; J_{1z} + J_{2z} \qquad (70\text{-a})$$

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 :

$$M = m_1 + m_2 \qquad (70\text{-b})$$

Le même raisonnement donne facilement les valeurs de J possibles. A toute représentation irréductible dans $\mathcal{E}(\tau, J)$ est associée une fois et une seule toute valeur de M égale à J, J - 1, J - 2, ..., -J. Donc, 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 :

$$J = \begin{cases} j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 - 1 \\ j_1 + j_2 - 1 \\ \vdots \\ |j_1 - j_2| + 1 \\ |j_1 - j_2| \end{cases} \qquad (71)$$

Chaque valeur de J n'étant réalisée qu'une seule fois, l'indice τ est en fait inutile (☆). On vérifie que la somme des dimensions des espaces $\mathcal{E}(J)$ est bien égale à celle de l'espace de départ :

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{|j_1+j_2|} (2J + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \qquad (72)$$

Nous voyons donc que $\vec{J}^2$ et J_z forment un E.C.O.C. (☆☆) dans $\mathcal{E}(\tau_1\tau_2 ; j_1j_2)$. Nous avions déjà l'ensemble des deux opérateurs J_{1z} et J_{2z}.

(☆) Il se trouve que, dans le cas du groupe des opérateurs de rotation, la décomposition d'une représentation produit tensoriel de représentation irréductible ne fait jamais apparaître plus d'une fois chaque réprésentation irréductible. Ce n'est pas toujours le cas pour un groupe quelconque.

(☆☆) Un E.C.O.C. est un "ensemble complet d'observables qui commutent" (voir par exemple, la référence [13], § D-3-b.

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 la "base couplée" des kets $|J, M\rangle$, associée au premier ?

Le raisonnement effectué plus haut montre qu'on peut poser :

$$|J = j_1 + j_2, \quad M = j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2, m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle \qquad (73)$$

Par action de :

$$J_- = J_{1-} + J_{2-}$$

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 $\&(J = j_1+j_2)$.

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 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 :

$$\langle j_1j_2j_1\ J - j_1|\ J\ J\rangle \text{ réel} > 0 \qquad (74)$$

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 (^{69}-b) du sous-espace $\&(\tau_1\tau_2 ; j_1j_2)$ sous la forme :

$$\&(\tau_1\tau_2 ; j_1j_2) = \bigoplus_{J = |j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} \&(J) \qquad (75\text{-a})$$

Chaque $\&(J)$ est engendré par les $2J + 1$ kets $|J, M\rangle$ de la base standard associés à la valeur correspondante de J et à $M = J, J - 1, J - 2, \ldots -J$. Le fait que l'indice τ de (^{69}-b) est inutile tient au fait que, dans la décomposition de la représentation produit tensoriel (^{67}-c), il se trouve que chaque valeur de J permise apparaît une seule fois. De façon symbolique,

on peut écrire :

$$\left(R^{[j_1]} \right) \otimes \left(R^{[j_2]} \right) = \bigoplus_{J = |j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} \left(R^{[J]} \right) \qquad (75\text{-b})$$

En ce qui concerne les kets $|J, M\rangle$ de la "base couplée", leurs relations de transformations sont plus simples que celles de la "base découplée" $|\tau_1 j_1 m_1 ; \tau_2 j_2 m_2\rangle$. En effet, les relations (^{68}) donnent, lorsque $\vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}$:

$$R(\vec{a}) \, |\tau_1, j_1, m_1 ; \tau_2, j_2, m_2\rangle = \sum_{m'_1 m'_2} \left(R^{[j_1]}(\vec{a}) \right)_{m'_1 m_1} \left(R^{[j_2]}(\vec{a}) \right)_{m'_2 m_2} |\tau_1, j_1, m'_1 ; \tau_2, j_2, m'_2\rangle \qquad (76\text{-a})$$

alors que, pour la base couplée, une seule matrice (R) suffit à effectuer la rotation :

$$\boxed{R(\vec{a}) \, |J_1 \, M\rangle = \sum_{M'} \left(R^{[J]}(\vec{a}) \right)_{M'M} |J_1 \, M'\rangle} \qquad (76\text{-b})$$

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 des groupes $\mathcal{G}$ de rotation.

(ii) Ils sont réels :

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J\ M\rangle = \langle J\ M | j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \qquad (77)$$

(cette propriété vient de ce que les coefficients qui apparaissent par action de $J_{\pm}$, J_z sont réels).

(iii) Règles de sélection :

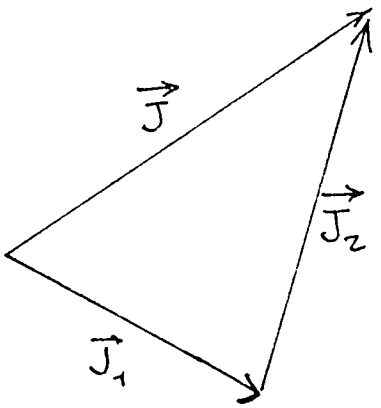
$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$ ne peut être non-nul que si :

. $M = m_1 + m_2$

. $|j_1 + j_2| \geq J \geq |j_1 - j_2|$ (règle du triangle, cf fig. 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.



(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 :

$$\sum_{m_1 + m_2 = M} \langle J\ M | j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J'\ M'\rangle = \delta_{JJ'}\, \delta_{MM'} \qquad (78\text{-a})$$

et :

$$\sum_{M = m_1 + m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J\ M\rangle \langle J\ M | j_1 j_2 m'_1 m'_2\rangle = \delta_{m_1 m'_1}\, \delta_{m_2 m'_2} \qquad (78\text{-b})$$

$J_1 + J_2 \geq J \geq |J_1 - J_2|$

(v) Lien avec les matrices de rotation. On a :

$$\left(R^{[j_1]} \right)_{m_1 m'_1} \left(R^{[j_2]} \right)_{m_2 m'_2} =$$

$$\sum_{J = |j_1 - j_2|}^{J = j_1 + j_2} \sum_{M,\, M'} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J\ M \rangle \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | J\ M' \rangle \left(R^{[J]} \right)_{MM'} \qquad (79\text{-a})$$

et, inversement :

$$\delta_{JJ'} \left(R^{[J]} \right)_{MM'} = \sum_{m_1 m'_1} \sum_{m_2 m'_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J\ M \rangle \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | J' M' \rangle \left(R^{[j_1]} \right)_{m_1 m'_1} \left(R^{[j_2]} \right)_{m_2 m'_2} \qquad (79\text{-b})$$

Exercices :

(i) Calculer l'élément de matrice :

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | e^{-i\phi\, \vec{J}.\vec{u}/\hbar} | j_1 j_2 m'_1 m'_2 \rangle$$

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 $|j_1 j_2 m_1 m_1\rangle$ et $|j_1 j_2 m'_1 m'_2\rangle$ sur la base $|J, M\rangle$ et démontrer la formule (^{79}-a).

Pour démontrer la formule (^{79}-b) , partir de :

$$\langle J, M | e^{-i\phi\, \vec{J}.\vec{u}/\hbar} | J, M' \rangle$$

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 :

$$\begin{aligned}
&\langle j_1 j_2 j_1 (J - j_1) | J, J \rangle \quad \text{réel} \geqslant 0 \\
&\langle j_1 j_2 j_1 (M - j_1) | J, M \rangle \quad \text{réel} \geqslant 0 \qquad (80\text{-a}) \\
&\langle j_2 j_1 m_2 m_1 | J, M \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J\ M \rangle \\
&\langle j_1 j_2 - m_1 - m_2 | J, -M \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J\ M \rangle
\end{aligned}$$

et les relations de récurrence :

$$\sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}\ \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J, M \pm 1\rangle =$$
$$\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)}\ \langle j_1 j_2 (m_1 \mp 1) m_2 | J\ M\rangle$$
$$+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)}\ \langle j_1\ j_2\ m_1\ (m_2 \mp 1) | J\ M\rangle \qquad (80\text{-b})$$

De ces relations, on déduit que :

$$\langle j\ j\ m\ -\ m | 0,\ 0\rangle \ =\ (-1)^{j\ -\ m}/\sqrt{2j+1} \qquad (80\text{-c})$$

Cette dernière égalité, qui donne les coefficients correspondants à un moment cinétique J = 0 (avec $j_1 = j_2 = j$), nous sera utile au § suivant.

Exercice :

Démontrer les relations (^{80}-b) et (^{80}-c).

Remarque :

On peut appliquer plusieurs fois les raisonnements de ce § C et composer 3, 4, ... moments cinétiques ; voir le § B-3 du chapitre VI du polycopié (coefficients 3j et 6j de Wigner).

D - TRANSFORMATION DES OBSERVABLES

Une observable B est un opérateur hermitique à spectre complet (tout vecteur $|\psi\rangle$ peut être décomposé sur les vecteurs propres de B). Nous avons déjà introduit en (^{37}-b) l'opérateur K', transformé d'un opérateur $K(\vec{a})$ par l'opération unitaire $R(\vec{a})$. Pour une observable B quelconque, nous poserons :

$$B' \ =\ R(\vec{a})\ B\ \ R^{\dagger}(\vec{a}) \qquad (81\text{-a})$$

B' est également hermitique, puisque :

$$(B')^{\dagger} \ =\ [\ R^{\dagger}(\vec{a})]^{\dagger}\ B^{\dagger}\ \ R^{\dagger}(\vec{a}) \ =\ B' \qquad (81\text{-b})$$

D'autre part, si le paramètre $\vec{a}$ est infinitésimal (rotation R infinitésimale), on obtient :

$$B' \ =\ (1 - \frac{i}{\hbar}\, d\vec{a}.\vec{J})\ B\ (1 + \frac{i}{\hbar}\, d\vec{a}.\vec{J}) + O(da^2)$$
$$= B - \frac{i}{\hbar}\,[\,d\vec{a}.\vec{J},\ B] \ + O(da^2)$$
$$= B - \frac{i}{\hbar}\, d\phi\ [\,J_u,\ B] \ + O(d\phi^2) \qquad (81\text{-c})$$

C'est donc le commutateur de B avec une composante de $\vec{J}$ qui apparaît dans ce cas.

Composons successivement deux transformations unitaires (finies ou infinitésimales) $R(\vec{a})$ et $R(\vec{b})$; il vient :

$$B'' = R(\vec{b})\, B'\, R^{\dagger}(\vec{b})$$
$$= R(b)\, R(\vec{a})\, B\, R^{\dagger}(\vec{a})\, R^{\dagger}(\vec{b}) \qquad (82\text{-a})$$

Donc, si l'on introduit l'opérateur produit :

$$R(\vec{c}) = R(\vec{b})\, R(\vec{a}) \qquad (82\text{-b})$$

On peut écrire :

$$B'' = R(\vec{c})\, B\, R^{\dagger}(\vec{c}) \qquad (83)$$

C'est donc bien l'opérateur produit $R(\vec{c})$ qui donne le produit successif des deux transformations.

1 - Opérateurs de rotation dans l'espace des observables

L'ensemble des opérateurs B constitue une espace vectoriel(☆) $\mathcal{F}$, de dimension N^2 si l'espace $\mathcal{E}$ lui-même est de dimension finie N. Par exemple, si $\mathcal{E}$ est l'espace des états d'un spin 1/2, tout opérateur B agissant dans $\mathcal{E}$ peut s'écrire :

$$B = \alpha \mathbb{1} + \beta \sigma_x + \gamma \sigma_y + \delta \sigma_z \qquad (84)$$

(où σ_x , σ_y et σ_z sont les matrices de Pauli) ; c'est donc une combinaison linéaire de 4 opérateurs indépendants, qui engendrent l'espace $\mathcal{F}$.

De façon plus générale, si $\{|u_n\rangle\}$ désigne une base orthonormée dans $\mathcal{E}$, on a :

$$B = \sum_{mn} |u_m\rangle \langle u_m|\, B\, |u_n\rangle \langle u_n|$$
$$= \sum_{mn} b_{mn}\, Q_{mn} \qquad (85\text{-a})$$

avec, par définition :

$$Q_{mn} = |u_m\rangle \langle u_n| \qquad (85\text{-b})$$

(☆) Cet espace est défini sur le corps des réels si on ne considère que des opérateurs B hermitiques ; nous renonçons à partir de maintenant, à cette condition (espace sur le corps des complexes).

et

$$b_{mn} = \langle u_m | B | u_n \rangle \qquad (85\text{-c})$$

Les b_{mn} apparaissent ainsi comme les composantes de B sur la "base d'opérateurs" Q_{mn}, engendrant l'espace $\mathcal{H}$.

Lorsque B sera considéré comme un vecteur de $\mathcal{H}$, nous l'écrirons :

$$|B \gg \quad \in \mathcal{H} \qquad (86\text{-a})$$

la double notation ket étant destinée à rappeler qu'il s'agit en fait d'opérateurs agissant dans $\mathcal{E}$.

Dans $\mathcal{H}$, on peut définir l'action d'opérateurs linéaires $\hat{\hat{C}}$

$$|B' \gg = \hat{\hat{C}} \quad |B \gg \qquad (86\text{-b})$$

Par exemple, si B' est donné par (81-a), on définit ainsi "l'opérateur de rotation" $\hat{\hat{R}}$:

$$\hat{\hat{R}}(\vec{a})|\ B \gg \ = \ |B' \gg$$

$$= \ |\ R(\vec{a})\ B\ \ R^{\dagger}(\vec{a}) \gg \qquad (87\text{-a})$$

Lorsque $\vec{a}$ est infinitésimal, on obtient la rotation infinitésimale dont l'effet, d'après (81-c), est donné par :

$$\hat{\hat{R}}(d\vec{a})|\ B \gg \ = \ |B \gg - \frac{i}{\hbar} |\ [d\vec{a}.\vec{J},\ B] \gg \qquad (87\text{-b})$$

que nous pouvons encore écrire :

$$\hat{\hat{R}}\ (d\vec{a})|\ B \gg \ = \ (\hat{\hat{1}} - \frac{i}{\hbar}\ d\vec{a}.\vec{\mathcal{J}})\ |\ B \gg \qquad (87\text{-c})$$

en définisant l'action de $\vec{J}$ par (pour simplifier, nous abandonnons la notation $\hat{\ }$ pour $\vec{\mathcal{J}}$) :

$$d\vec{a}.\vec{\mathcal{J}}\ |\ B \gg \ = \ |[d\vec{a}.\vec{J},\ B] \gg \qquad (87\text{-d})$$

ou encore :

$$\mathcal{J}_u\ |\ B \gg \ = \ |\ [J_u, B] \gg \qquad (87\text{-e})$$

Cette définition fait de $\vec{\mathcal{J}}$ un opérateur de moment cinétique.

En effet :

$$\mathcal{J}_x\ \mathcal{J}_y\ |\ B \gg \ = \ |\left[J_x,\ [J_y,\ B]\right] \gg$$

$$\mathcal{J}_y\ \mathcal{J}_x\ |\ B \gg \ = \ |\left[J_y,\ [J_x,\ B]\right] \gg \qquad (88\text{-a})$$

mais l'identité de Jacobi donne :

$$\left[J_x, [J_y, B]\right] + \left[J_y, [B, J_x]\right] + \left[B, [J_x, J_y]\right] = 0 \qquad (88\text{-b})$$

de sorte que :

$$\begin{aligned} [\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y] \mid B \gg \; &= \mid \left[[J_x, J_y], B\right] \gg \\ &= i\hbar \mid [J_z, B] \gg \\ &= i\hbar \, \mathcal{J}_z \mid B \gg \end{aligned} \qquad (88\text{-c})$$

B étant quelconque, nous obtenons par permutation circulaire des axes les relations de commutation standard :

$$[\mathcal{J}_{x_i}, \mathcal{J}_{x_j}] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} \, \mathcal{J}_{x_k} \qquad (89)$$

Nous pouvons donc transposer à $\mathcal{F}$ tous les raisonnements faits précédemment dans &. Nous allons en particulier introduire des sous-espaces irréductibles $\mathcal{F}(\tau, K)$ qui sont l'analogue des $\&(\tau, j)$; en principe, K peut être entier ou demi-entier, mais seul le premier cas nous intéresse en pratique. Les valeurs K = 0 et K = 1 nous conduiront à l'un de ces opérateurs scalaires et vectoriels respectivement ; nous envisagerons ensuite des valeurs plus élevées de K (opérateurs tensoriels irréductibles).

2 - Opérateurs scalaires et vectoriels

a - Opérateurs scalaires (K = 0)

Lorsque K = 0, un sous-espace $\mathcal{F}(\tau, K)$ n'a qu'une dimension. L'opérateur B correspondant au "ket" unique qui l'engendre, est invariant dans toute rotation :

$$B = R(\vec{a}) \, B \, R^{+}(\vec{a}) \qquad \forall \vec{a} \qquad (90\text{-a})$$

ou encore (rotations infinitésimales) :

$$[\vec{J}, B] = 0 \qquad (90\text{-b})$$

On montre facilement que les deux relations (90) sont équivalentes ; un opérateur B les satisfaisant est dit "opérateur scalaire".

b - Opérateurs vectoriels (K = 1)

Lorsque K = 1, le sous-espace $\mathcal{F}(\tau, K)$ possède 3 dimensions ;

Nous avons donc 3 opérateurs qui se transforment linéairement les uns dans les autres par rotation.

Un exemple en est $\vec{J}$ lui-même, puisque nous avons montré en (^{40}) que :

$$R(\vec{a})\,[\vec{b}.\vec{J}]\;R^{\dagger}(\vec{a}) = [\vec{b}'.\vec{J}] \qquad (^{91}\text{-a})$$

avec :

$$\vec{b}' = \mathcal{R}(\vec{a})\,\vec{b} \qquad (^{91}\text{-b})$$

Ces relations montrent bien que toute combinaison linéaire des composantes de $\vec{J}$ est transformée en une autre combinaison linéaire du même type sous l'effet de l'opérateur $R(\vec{a})$ [aucune direction $\vec{b}$ ne restant invariante dans toute rotation, le sous-espace d'opérateurs correspondant est bien irréductible].

(i) Définition

De façon générale, nous prendrons les relations (^{91}) comme définition générale d'un opérateur vectoriel $\vec{V}$, en écrivant :

$$R(\vec{a})\,[\vec{b}.\vec{V}]\;R^{\dagger}(\vec{a}) = \vec{b}'.\vec{V} \qquad (^{91}\text{-c})$$

$\vec{b}'$ étant toujours donné par (^{91}-b). Nous vérifierons plus bas que cette définition est bien équivalente à imposer que les composantes de $\vec{V}$ engendrent un sous-espace irréductible $\mathcal{F}(\tau, K = 1)$. Si l'on développe (^{91}-b) suivant :

$$b'_{x_j} = \sum_i (\mathcal{R}(\vec{a}))_{ji}\, b_{x_i}$$

il vient, par identification des termes en b_{x_i} dans (^{91}-c) :

$$R(\vec{a})\,V_{x_i}\;R^{\dagger}(\vec{a}) = \sum_j (\mathcal{R}(\vec{a}))_{ji}\,V_{x_j} \qquad (^{91}\text{-d})$$

qui peut constituer une définition équivalente d'un opérateur vectoriel $\vec{V}$. D'autres définitions, toujours équivalentes, sont données par :

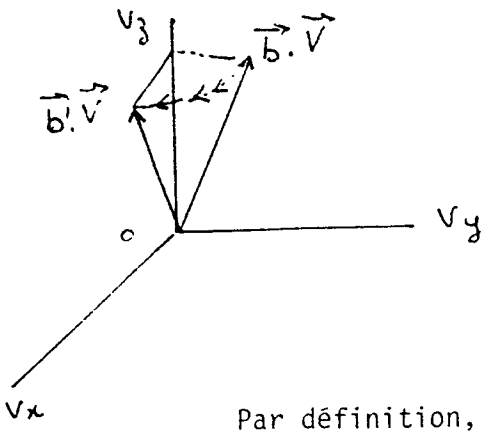
$$\begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \\ V_z' \end{pmatrix} = \left(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\right)^{-1} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \qquad (^{91}\text{-e})$$

c'est-à-dire, si $\vec{V}'$ symbolise l'ensemble des 3 opérateurs V_x' , V_y' et V_z' :

$$\vec{V}' = \mathcal{R}^{-1}_{\vec{u}}(\phi)\,\vec{V} \qquad \vec{V} = \mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\,\vec{V}' \qquad (^{91}\text{-f})$$

Remarque : La matrice $(\mathcal{R})$ permet également de passer de $\vec{V}$ à $\vec{V}'$ puisque, en transposant (^{91}-e), il vient : $(V_x' \; V_y' \; V_z') = (V_x \; V_y \; V_z)(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi))$ (^{91}-g)

Il faut prendre garde dans ce type de calculs, à ne pas intervertir $\mathcal{R}$ et $\mathcal{R}^{-1}$. La situation est schématisée sur la figure, où tout opérateur $\vec{b}.\vec{V}$ est défini comme une combinaison linéaire de V_x , V_y , V_z (axes de la figure). La définition (^{91}-c) montre que l'effet d'une rotation de l'opérateur $\vec{b}.\vec{V}$ revient simplement sur cette figure à effectuer une rotation ordinaire de $\vec{b}$ (la figure est faite dans le cas particulier où Oz est l'axe de rotation).



Par définition, le "vecteur" $\vec{V}'$ symbolyse l'ensemble des 3 opérateurs $V_x' = \vec{e}_x.\vec{V}$, $V_y' = \vec{e}_y.\vec{V}$ et $V_z' = \vec{e}_z.\vec{V}$, où $\vec{e}'_{x,y,z} = \mathcal{R}\,\vec{e}_{x,y,z}$. Le produit scalaire ne dépendant que de la position relative des vecteurs, on a également $V_x' = (\mathcal{R}^{-1}\vec{e}'_x).(\mathcal{R}^{-1}\vec{V}) = \vec{e}_x.(\mathcal{R}^{-1}\vec{V})$ [et des relations semblables pour les composantes y et z], ce qui conduit à écrire $\vec{V}' = \mathcal{R}^{-1}\,\vec{V}$ comme en (^{91}-f).

(ii) Rotations infinitésimales

Sous l'effet d'un opérateur de rotation infinitésimale $R(d\vec{a}) = R(\vec{u}d\phi)$, $\vec{V}$ devient $\vec{V}'$ donné par :

$$\vec{V}' = (1 - d\phi\,\vec{u}\,x)\,\vec{V}$$
$$= \vec{V} - d\phi\,\vec{u}\,x\,\vec{V} \qquad (^{92}\text{-a})$$

Comparant à la formule générale (^{81}-c), nous obtenons la condition pour que $\vec{V}$ soit vectoriel sous la forme :

$$[\,J_u, \vec{V}\,] = -i\hbar\,\vec{u}\,x\,\vec{V} \qquad (^{92}\text{-b})$$

Par linéarité, on peut encore obtenir la définition équivalente :

$$[\,(\vec{J}.\vec{u}), (\vec{V}.\vec{w})\,] = i\hbar\,(\vec{u}\,x\,\vec{w}).\,\vec{V} \qquad (^{92}\text{-c})$$

Une dernière façon de définir un opérateur vectoriel $\vec{V}$ est d'expliciter les composantes de cette égalité, ce qui donne :

$$[\,J_x, V_x\,] = 0$$
$$[\,J_x, V_y\,] = i\hbar\,V_z$$
$$[\,J_x, V_z\,] = -i\hbar\,V_y \qquad (^{92}\text{-d})$$

(à ces trois relations, on ajoute les 6 autres obtenues par permutation circulaire des indices x, y et z).

(iii) Composantes standard

Pour vérifier que les 3 composantes de $\vec{V}$ engendrent bien un sous-espace irréductible $\mathfrak{H}(\tau, K = 1)$, nous devons trouver une "base standard", constituée de combinaisons linéaires indépendantes de V_x, V_y et V_z, se transformant par rotation les unes dans les autres suivant les matrices $(R^{[j=1]})$. Mais, nous avons déjà remarqué en (^{63}) que :

$$(R^{[j=1]}) = (S^{-1})\ (\mathfrak{R})\ (S)$$

$$(\mathfrak{R}) = (S)\ (R^{[j=1]})\ (S^{-1})$$

où la matrice (S) est donnée par (^{62}-a), (à partir de maintenant, nous sous-entendons les notations $\vec{u}$ et ϕ). Nous voyons donc que, par un changement de base dans l'espace des composantes de $\vec{V}$, les rotations seront décrites par les matrices $(R^{[j=1]})$, au lieu des matrices $(\mathfrak{R})$. La définition que nous avons prise d'un opérateur vectoriel correspond bien à celle d'un espace $\mathfrak{H}(\tau, K = 1)$.

Effectuons explicitement ce changement de base ; ce calcul nous sera utile pour la suite. Si les composantes V_x, V_y, V_z se tranforment par rotation suivant les matrices $(\mathfrak{R})$ [relation (^{91}-g)] les opérateurs V_{+1}, V_0 et V_{-1} définis par :

$$(V_{+1}\ V_0\ V_{-1}) = (V_x\ V_y\ V_z)\ (S) \qquad (^{93}\text{-a})$$

se transformeront suivant les $(R^{[j=1]})$, puisque :

$$\begin{aligned}(V_{+1}'\ V_0'\ V_{-1}') &= R\,(V_{+1}\ V_0\ V_{-1})\ R^{\dagger} \\ &= R\,(V_x\ V_y\ V_z)\ R^{\dagger}\ (S) \\ &= (V'_x\ V'_y\ V'_z)\ (S) \\ &= (V_x\ V_y\ V_z)\ (\mathfrak{R})\ (S) \\ &= (V_{+1}\ V_0\ V_{-1})\ (S^{-1})\ (\mathfrak{R})\ (S)\end{aligned} \qquad (^{93}\text{-b})$$

ce qui donne d'après (^{63}-a) :

$$(V_{+1}'\ V_0'\ V_{-1}') = (V_{+1}\ V_0\ V_{-1})\ (R^{[j=1]}) \qquad (^{93}\text{-c})$$

Les composantes V_{+1} V_0 et V_{-1} de $\vec{V}$ sont appelées "composantes standard" de l'opérateur vectoriel $\vec{V}$. Explicitons (^{93}-a) ; nous obtenons [relation (^{62}-a)] :

$$\begin{cases} V_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} [V_x + i V_y] \\ V_0 = V_z \\ V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} [V_x - i V_y] \end{cases} \qquad (^{94}\text{-a})$$

Ces composantes sont également notées V_m avec m = +1, 0, -1.

Pour la relation (^{93}-c), elle s'écrit :

$$R\, V_m\, R^{\dagger} = \sum_{m'} (R^{[j=1]})_{m'm}\, V_{m'} \qquad (^{94}\text{-b})$$

(nous sous-entendrons à partir de maintenant, les paramètres $\vec{u}$ et ϕ), qui est l'analogue de :

$$R\, |j = 1, m> = \sum_{m'} (R^{[j=1]})_{m'm}\, |j = 1, m'>$$

Rappelons la définition (^{53}-a) des $(R^{[j=1]})_{m'm}$:

$$(R^{[j]})_{m'm} = < j, m' | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} J_u \right\} | j, m >$$

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.

Remarque :

On peut noter l'analogie entre la formule (^{62}-b) de définition d'une nouvelle base (complexe) dans l'espace habituel et la définition (^{93}-a) des composantes standard. Il faut cependant prendre garde au fait que :

$$\begin{aligned} \vec{V} &= V_x \vec{e}_x + V_y \vec{e}_y + V_z \vec{e}_z \\ &= V_{-1} \vec{e}_{+1} + V_0 \vec{e}_0 + V_{+1} \vec{e}_{-1} \end{aligned} \qquad (^{94}\text{-c})$$

(V_{+1} est associé à $\vec{e}_{-1}$, V_{-1} à $\vec{e}_{+1}$).

3 - Généralisation : opérateurs tensoriels irréductibles

a) Définition, relations fondamentales

Par définition, un "opérateur tensoriel irréductible" $T^{(K)}$ est un ensemble de $(2K+1)$ opérateurs, appelés "composantes standard", qui se transforment par rotation suivant la matrice $(R^{[j=K]})$. Nous noterons $T^{(K)}_Q$ ces composantes, avec :

$$Q = K, K-1, K-2, \ldots -K+1, -K$$

Le nombre K est appelé ordre de l'opérateur irréductible. L'opérateur $T^{(K)}_Q$ correspond au "double ket"

$$|\tau, K, Q\gg \quad \text{analogue de } |\tau, j=K, m=Q\rangle$$

et les $(2K+1)$ composantes de $T^{(K)}$ fournissent donc une base standard dans un sous-espace irréductible $\mathcal{E}(\tau, K)$.

Les relations générales ([28]) s'écrivent ici (à partir de maintenant, nous abandonnons l'indice τ pour alléger les notations) :

$$\begin{cases} J_z\,|K, Q\gg = Q\hbar\,|K, Q\gg \\ J_\pm\,|K, Q\gg = \hbar\sqrt{K(K+1)-Q(Q\pm1)}\;|K, Q\pm1\gg \end{cases} \qquad (95\text{-a})$$

qui sont équivalentes à [relation (87-e)] :

$$\begin{cases} [J_z, T^{(K)}_Q] = Q\hbar\,T^{(K)}_Q \\ [J_\pm, T^{(K)}_Q] = \hbar\sqrt{K(K+1)-Q(Q\pm1)}\;T^{(K)}_{Q\pm1} \end{cases} \qquad (95\text{-b})$$

Pour des rotations finies, l'égalité (53-b) donne ici :

$$\boxed{R(\vec{a})\,T^{(K)}_Q\,R^\dagger(\vec{a}) = \sum_{Q'}\,(R^{[j=K]}(\vec{a}))_{Q'Q}\,T^{(K)}_{Q'}} \qquad (95\text{-c})$$

L'une quelconque des relations (95) peut être prise comme définition des composantes d'un opérateur tensoriel irréductible $T^{(K)}$.

b) Produit de deux opérateurs tensoriels irréductibles

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 :

$$T^{(K_1)}_{Q_1} \quad W^{(K_2)}_{Q_2} \qquad \begin{array}{l} -K_1 \leqslant Q_1 \leqslant K_1 \\ -K_2 \leqslant Q_2 \leqslant K_2 \end{array} \qquad (^{96}\text{-a})$$

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 :

$$R\, T^{(K_1)}_{Q_1} \quad W^{(K_2)}_{Q_2} \quad R^{\dagger} = R\, T^{(K_1)}_{Q_1} \quad R^{\dagger} \quad R \quad T^{(K_2)}_{Q_2} \quad R^{\dagger}$$

$$= \sum_{Q'_1 Q'_2} (R^{[K_1]})_{Q'_1 Q_1} \, (R^{[K_2]})_{Q'_2 Q_2} \, T^{(K_1)}_{Q'_1} \, T^{(K_2)}_{Q'_2} \qquad (^{96}\text{-b})$$

Les opérateurs écrits en (^{96}-a) se transforment donc par rotation comme des produits tensoriels de kets $|J=K_1,\ M=Q_1 > \otimes\ |J=K_2,\ M=Q_2 >$ [relation (^{76}-a)]. Nous sommes donc ramenés au problème de la composition des moments cinétiques. En conséquence, nous pouvons affirmer que les opérateurs $Z^{(K)}_{Q}$ définis par :

$$Z^{(K)}_{Q} = \sum_{Q_1+Q_2=Q} < K_1\ K_2\ Q_1\ Q_2 | K\ Q > T^{(K_1)}_{Q_1} \ W^{(K_2)}_{Q_2}$$

$$K = K_1 + K_2,\ K_1 + K_2 - 1,\ \ldots,\ |K_1 - K_2|$$

$$Q = K_1\ K-1,\ \ldots\ \ldots \qquad \ldots\ ,\ -Q \qquad (^{97}\text{-a})$$

se transforment par rotation de façon plus simple, comme les kets de la base couplée $|J=K,\ M=Q >$ [relation (^{76}-b)]. On a donc :

$$R\, Z^{(K)}_{Q} \quad R^{\dagger} = \sum_{Q'} (R^{[K]})_{Q'Q} \, Z^{(K)}_{Q'} \qquad (^{97}\text{-b})$$

et les 2K+1 opérateurs $Z^{(K)}_{Q}$ associés à une même valeur de K donnent un opérateur tensoriel irréductible.

Inversement, les produits (^{96}-a) s'expriment en fonction des nouveaux opérateurs sous la forme :

$$T^{(K_1)}_{Q_1} \ W^{(K_2)}_{Q_2} = \sum_{K,Q} < K_1\ K_2\ Q_1\ Q_2\ |K\ Q > Z^{(K)}_{Q} \qquad (^{97}\text{-c})$$

On voit donc apparaître une somme d'opérateurs tensoriels irréductibles dont l'ordre va de $|K_1-K_2|$ à $K_2 + K_2$.

Les égalités (^{97}) permettent de simplifier bien des calculs lorsque 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 tensoriels irréductibles du même ordre. On utilise alors (^{80}-c) pour écrire le produit scalaire de deux opérateurs $T^{(K)}$ et $Z^{(K)}$:

$$T^{(K)} \cdot W^{(K)} = \sum_Q (-1)^Q \, T^{(K)}_Q \, W^{(K)}_{(-Q)} \qquad (^{98})$$

[La suppression du $(-1)^K (2K+1)^{-1/2}$ de (^{80}-c) assure que, si K = 1, on retrouve le produit scalaire ordinaire de deux vecteurs ; cf. (^{101})].

c) Hermiticité

L'opérateur $T^{(K)}$ est dit hermitique si

$$[T^{(K)}_Q]^\dagger = (-1)^Q \, T^{(K)}_{-Q} \qquad (^{99})$$

Par exemple, si $\vec{V}$ est hermitique ($V_x = V_x^\dagger$, ...), on a :

$$\begin{cases} [\, V_{+1} \,]^\dagger = -\dfrac{1}{\sqrt{2}} (V_x - iV_y) = -V_{-1} \\ [\, V_0 \,]^\dagger = V_0 \\ [\, V_{-1} \,]^\dagger = \dfrac{1}{\sqrt{2}} (V_x + iV_y) = -V_{+1} \end{cases}$$

et on vérifie bien (^{99}). Une justification plus générale de la relation (^{99}) peut être donnée si l'on introduit les composantes cartésiennes du tenseur $T^{(K)}$ [cf. chapitre VII, § B du polycopié], auxquelles on impose l'hermiticité.

d) Exemples

Prenons deux opérateurs vectoriels (K = 1) notés $\vec{V}$ et $\vec{W}$, et construisons par produit d'autres opérateurs tensoriels. Les relations (^{80}) nous donnent :

$$\begin{cases} |2, 2> = |1\ 1\ 1\ 1> \\ |2, 1> = \dfrac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 1\ 0> + \dfrac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 0\ 1> \\ |2, 0> = \dfrac{1}{\sqrt{6}} |1\ 1\ 1\ -1> + \dfrac{2}{\sqrt{6}} |1\ 1\ 0\ 0> + \dfrac{1}{\sqrt{6}} |1\ 1\ -1\ 1> \\ |2, -1> = \dfrac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 0\ -1> + \dfrac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ -1\ 0> \\ |2, -2> = |1\ 1\ -1\ -1> \end{cases}$$

$$\begin{cases} |1,\ 1> \ = \ \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 1\ 0> - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 0\ 1> \\ |1,\ 0> \ = \ \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 1\ -1> - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ -1\ 1> \\ |1,\ -1> \ = \ \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ 0\ -1> - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\ 1\ -1\ 0> \end{cases}$$

$$|0,\ 0> \ = \ \frac{1}{\sqrt{3}} |1\ 1\ 1\ -1> - \frac{1}{\sqrt{3}} |1\ 1\ 0\ 0> + \frac{1}{\sqrt{3}} |1\ 1\ -1\ 1> \qquad (100)$$

égalités qui nous permettent de construire 3 tenseurs, K = 2, 1 et 0.

(i) K = 0

Nous obtenons :

$$T^{(K=0)}_{(Q=0)} = \frac{1}{\sqrt{3}} [\ V_{+1}\ W_{-1} - V_o\ W_o + V_{-1}\ W_{+1}\ ]$$

$$= - \frac{1}{\sqrt{3}} [\ V_x\ W_x + V_y\ W_y + V_z\ W_z\ ]$$

$$= - \frac{1}{\sqrt{3}} \vec{V}.\vec{W} \qquad (101)$$

L'opérateur scalaire (invariant par rotation) que nous obtenons est donc simplement proportionnel au produit scalaire $\vec{V}.\vec{W}$.

(ii) K = 1

$$T^{(K=1)}_{1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{+1}W_o - V_oW_{+1}) = - \frac{1}{2} [\ V_xW_z - V_zW_x + i(V_yW_z - V_zW_y)]$$

$$T^{(K=1)}_{o} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{+1}W_{-1} - V_{-1}W_{+1}) = - \frac{i}{\sqrt{2}} [\ V_yW_x - V_xW_y\ ]$$

$$T^{(K=1)}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_oW_{-1} - V_{-1}W_o) = \frac{1}{2} [\ V_zW_x - V_xW_z - i(V_zW_y - V_yW_z)\ ]$$

$$(102\text{-a})$$

On reconnaît alors les composantes de l'opérateur :

$$\vec{K} = \vec{V} \times \vec{W} \qquad (102\text{-b})$$

et on voit que :

$$T^{(K=1)}_{1} = \frac{i}{\sqrt{2}}\ K_{+1}$$

$$T_{o}^{(K=1)} = \frac{i}{\sqrt{2}} K_o$$

$$T_{-1}^{(K=1)} = \frac{i}{\sqrt{2}} K_{-1} \qquad (^{102}\text{-c})$$

En d'autres termes :

$$T^{(K=1)} = \frac{i}{\sqrt{2}} \vec{K} = \frac{i}{\sqrt{2}} \vec{V} \times \vec{W} \qquad (^{102}\text{-d})$$

Les relations de commutation de cet opérateur avec le moment cinétique total $\vec{J}$ sont celles d'un opérateur vectoriel.

(iii) $K = 2$

$$T_{2}^{(2)} = V_{+1} \; W_{+1}$$

$$T_{1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_{+1} \; W_o + V_o \; W_{+1})$$

$$T_{o}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} (V_{+1} \; W_{-1} + 2V_o \; W_o + V_{-1} \; W_{+1})$$

$$T_{-1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (V_o \; W_{-1} + V_{-1} \; W_o)$$

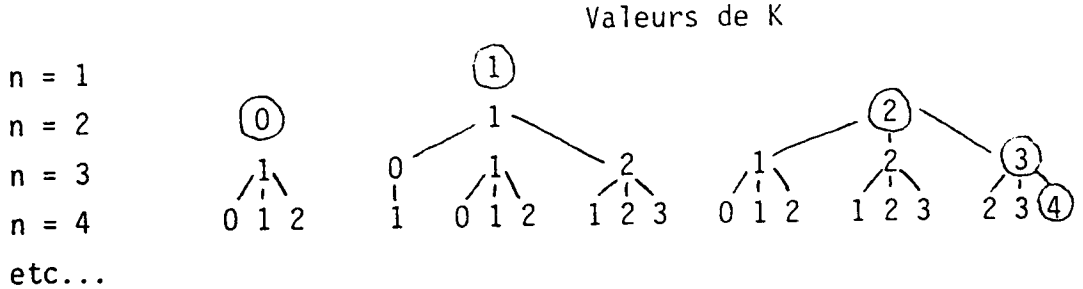
$$T_{-2}^{(2)} = V_{-1} \; W_{-1} \qquad (^{103}\text{-a})$$

L'expression de $T_{o}^{(2)}$ peut être mise sous la forme :

$$T_{o}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} [\; 3V_z \; W_z - \vec{V}.\vec{W} \;] \qquad (^{103}\text{-b})$$

Remarque :

On peut de même, multiplier successivement 3, 4, ... opérateurs vectoriels, et obtenir des valeurs de K de plus en plus élevées. Le tableau suivant résume la situation :



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.

E - THEOREME DE WIGNER-ECKART

Le théorème de Wigner-Eckart donne une relation très utile concernant l'élément de matrice (☆) :

$$< \tau, J, M \,|T^{(K)}_{Q}|\, \tau' , J', M' >$$

d'un opérateur tensoriel irréductible $T^{(K)}_{Q}$ dans une base standard. Nous allons voir que cet élément de matrice est proportionnel au coefficient de Clebsch-Gordan

$$< J\ M \,|J'\ K\ M'\ Q >$$

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 entraîne l'existence de <u>règles de sélection</u> : 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 :

$$T^{(K)}_{Q} \,|\tau', J', M' >$$

devient :

$$R\ T^{(K)}_{Q}\ R^{\dagger}\ R\ |\tau', J', M' >$$

Dans cette expression, $R\ T^{(K)}_{Q}\ R^{\dagger}$ est connu (transformation d'un opérateur tensoriel irréductible), ainsi que $R\ |\tau', J', M' >$ (transformation des kets d'une base standard). Par suite, par un raisonnement analogue à celui que nous avons déjà effectué (au § D-3-b par exemple),

---

(☆) Nous effectuons ici un très léger changement de notations, écrivant J et M (nombres quantiques du moment cinétique total du système) au lieu de j et m.

on voit que la transformation des kets $T^{(K)}_{Q}|\tau', J', M'>$ se fait comme celle de produits tensoriels $|J = K, M = Q> \otimes |J', M'>$. Ceci nous conduira à coupler $\vec{J}'$ et $\vec{K}$ pour former $\vec{J}'' = \vec{J}' + \vec{K}$, et faire apparaître des états $|k, J = J'', M''>$ grâce aux coefficients de Clebsch-Gordan $< J' K M' Q | J'' M'' >$. Il ne nous restera alors plus qu'à effectuer un produit scalaire par $< \tau, J, M|$. 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 $< J' K M' Q | J'' M'' >$, 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 $< \tau, J, M|k, J'', M'' >$; puis nous démontrerons le théorème lui-même.

a) Lemme

Considérons deux ensembles, de 2J+1 et 2J+1 vecteurs :

$|\tau, J, M>$ $\qquad$ $M = J, J-1, \ldots \quad -J$

$|k, J'', M''>$ $\qquad$ $M'' = J'', J''-1, \ldots \quad -J''$

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 ([28]). Dans ces conditions, nous allons montrer que le produit scalaire $< \tau, J, M|k, J'', M'' >$

- 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.

(☆) *Les notations différentes $|\tau, J, M>$ et $|k, J'', M''>$ sont utilisées pour insister sur le fait que ces kets n'appartiennent pas nécessairement à une même base standard (la décomposition de $|k, J'', M''>$ sur les $|\tau, J, M>$ peut faire intervenir plusieurs valeurs de τ).*

• Insérons l'opérateur

$$J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \qquad (104\text{-a})$$

entre $< \tau\ J\ M|$ et $|k\ J\ M >$. Il vient :

$$< \tau, J, M\ |J_+ J_-\ |k, J, M > = (< \tau, J, M\ |J_+)\ \ (J_-\ |k, J, M >)$$

$$= \hbar^2 [\ J(J+1) - M(M-1)\ ]\ < \tau, J, M-1\ |k, J, M-1 > \qquad (104\text{-b})$$

puisque les $|\tau, J, M >$ et les $|k, J, M >$ satisfont aux relations d'une base standard. D'autre part, l'égalité (^{104}-a) donne, puisque $|k, J, M >$ est vecteur propre de $\vec{J}^2$ et J_z :

$$< \tau, J, M\ |J_+ J_-|\ k, J, M > = < \tau, J, M\ |k, J, M > \hbar^2 [\ J(J+1) - M^2 \pm M\ ] \qquad (105)$$

La comparaison de (^{104}-b) et (^{105}) montre que :

$$< \tau, J, M\ |k, J, M > = < \tau\ , J, M-1\ |k, J, M-1 > \qquad (106)$$

et le lemme est démontré.

Remarque :

Une autre façon d'établir cette propriété est d'utiliser le "lemme de Schur".

Démontrons maintenant le théorème de Wigner-Eckart lui-même. Pour cela, écrivons les lois de transformation des kets $T^{(K)}_Q |\tau', J', M' >$ on obtient :

$$R\ T^{(K)}_Q\ |\tau', J', M' > =$$

$$R\ T^{(K)}_Q\ \ R^\dagger\ \ R\ |\tau', J', M' >$$

$$= \sum_{Q'} \sum_{M''} (R^{[K]})_{Q'Q} (R^{[J']})_{M''M'}\ T^{(K)}_{Q'}\ |\tau', J', M'' > \qquad (107\text{-a})$$

ce qui montre que les kets considérés se transforment de la même façon que des produits tensoriels

$$|J = K, M = Q > \otimes |J', M' > \qquad (107\text{-b})$$

Par suite, on peut utiliser la théorie générale de la composition des moments cinétiques et introduire les kets $|k, J'', M'' >$ donnés par :

$$|k, J'', M'' > = \sum_{Q\, M'''} < J' \; K \; M''' \; Q | J'' \; M'' > T^{(K)}_{Q} |\tau', J', M''' > \qquad (108\text{-a})$$

où $< J' \; K \; M''' \; Q | J'' \; M'' >$ est un coefficient de Clebsch-Gordan. Ces kets se transforment simplement comme ceux d'une base standard, c'est-à-dire suivant la relation :

$$R|k, J'', M'' > = \sum_{M'''} \left(R^{[J'']} \right)_{M''' \, M''} |k, J'', M''' > \qquad (108\text{-b})$$

La démonstration est la même que celle de la formule (^{76}-b) à partir de la définition des kets $|JM >$, ou de (^{97}-b) à partir de (^{97}-a).

Explicitons cette démonstration à titre d'exercice. On peut écrire, d'après la définition (^{108}-a) de $|k, J'', M'' >$:

$$R|k, J'', M'' > = \sum_{Q\, M'''} < J' \; K \; M''' \; Q | J'' \; M'' > \; R \; T^{(K)}_{Q} |\tau', J', M''' > \qquad (109\text{-a})$$

c'est-à-dire, compte tenu de (^{107}-a), et de la relation inverse de (^{108}-a) [relation (^{110}) ci-dessous] :

$$R|k, J'', M'' > = \sum_{QQ'\, M'M'''} < J' \; K \; M''' \; Q \; | J'' \; M'' > \left(R^{[K]} \right)_{Q'Q} \left(R^{[J']} \right)_{M'M'''} \sum_{M} < J' \; K \; M' \; Q' \; | J'' \; M > | \; k, J'', M > \qquad (109\text{-b})$$

La formule (^{79}-b) [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 :

$$R|k, J'', M'' > = \sum_{M} \left(R^{[J'']} \right)_{MM''} |k, J'', M >$$

qui est bien équivalent à (^{108}-b).

Si l'on inverse l'égalité (^{108}-a), on obtient (en tirant parti du fait que les coefficients $< J' \; K \; M''' \; Q \; | J'' \; M'' >$ définissent un changement de base orthogonal) :

$$T^{(K)}_{Q} \; |\tau', J', M' > = \sum_{J''M''} < J' \; K \; M' \; Q \; | J'' \; M'' > |k, J'' \; M'' > \qquad (110)$$

Le fait que les $|k, J'', M''>$ se transforment comme les kets d'une base standard permet d'appliquer le lemme établi plus haut :

$$<\tau, J, M|k, J'', M''> = \delta_{JJ''}\,\delta_{MM''} \times [\text{ facteur indépendant de } M\ ]$$

On pose :

$$<\tau, J, M|k, J'', M''> = \delta_{JJ''}\,\delta_{MM''}\,\frac{1}{\sqrt{2J+1}}<\tau, J||T^{(K)}||\tau', J'> \qquad (111)$$

où le $(2J+1)^{-1/2}$ est introduit par pure convention ; la quantité $<\tau, J||T^{(K)}||\tau', J'>$ 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 (^{110}) par le bra $<\tau, J, M|$, il vient :

$$\boxed{\begin{aligned}&<\tau, J, M|T^{(K)}_{Q}|\,\tau', J', M'> \\ &\quad = <J\ M|J'\ K\ M'\ Q>\,\frac{<\tau, J||T^{(K)}||\tau', J'>}{\sqrt{2J+1}} \\ &\quad = (-1)^{J-M}\begin{pmatrix} J & K & J' \\ -M & Q & M' \end{pmatrix}<\tau, J||T^{(K)}||\tau', J'>\end{aligned}} \qquad (112)$$

Cette égalité constitue le théorème de Wigner-Eckart. Le nombre $<\tau J||T^{(K)}||\tau', J'>$ 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 (^{112}), celle des $(2J+1)(2J'+1)(2K+1)$ valeurs des éléments de matrices des opérateurs $T^{(K)}_{Q}$, 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 (☆) :

$$<\tau, J||T^{(K)}||\tau', J'> = (-1)^{J-J'}<\tau', J'||T^{(K)}||\tau, J>^{*} \qquad (113)$$

(☆) La simplicité de la relation (^{113}) justifie l'introduction arbitraire du coefficient $\sqrt{2J+1}$ dans (^{111}) ; de plus, dans la deuxième égalité (^{112}), ce coefficient disparaît.

En effet, si $T^{(K)\dagger}_{Q} = (-1)^{Q}\, T^{(K)}_{-Q}$ [cf. (^{99})], alors :

$$< \tau, J, M|T^{(K)\dagger}_{Q}|\tau', J', M' > = (-1)^{Q} \frac{1}{\sqrt{2J+1}} < J, M|J' \; K \; M' \; -Q > < \tau J||T^{(K)}||\tau' \; j' > \qquad (^{114}\text{-a})$$

Par ailleurs, cet élément de matrice vaut (définition d'un opérateur adjoint) :

$$< \tau', J', M'|T^{(K)}_{Q}|\; \tau, J, M >^{*} = \frac{1}{\sqrt{2J'+1}} < J', M'|J \; K \; M \; Q > < \tau' \; J'||T^{(K)}||\tau \; J >^{*} \qquad (^{114}\text{-b})$$

et comme [cf. chapitre VI du polycopié, relation (VI-116)] :

$$< J' \; M'|J \; K \; M \; Q > = (-1)^{J-J'+Q} \sqrt{\frac{2J'+1}{2J+1}} < J \; M|J' \; K \; M' \; -Q > \qquad (^{115})$$

il en découle immédiatement (^{113}).

2 - Applications et exemples

a) Opérateurs scalaires

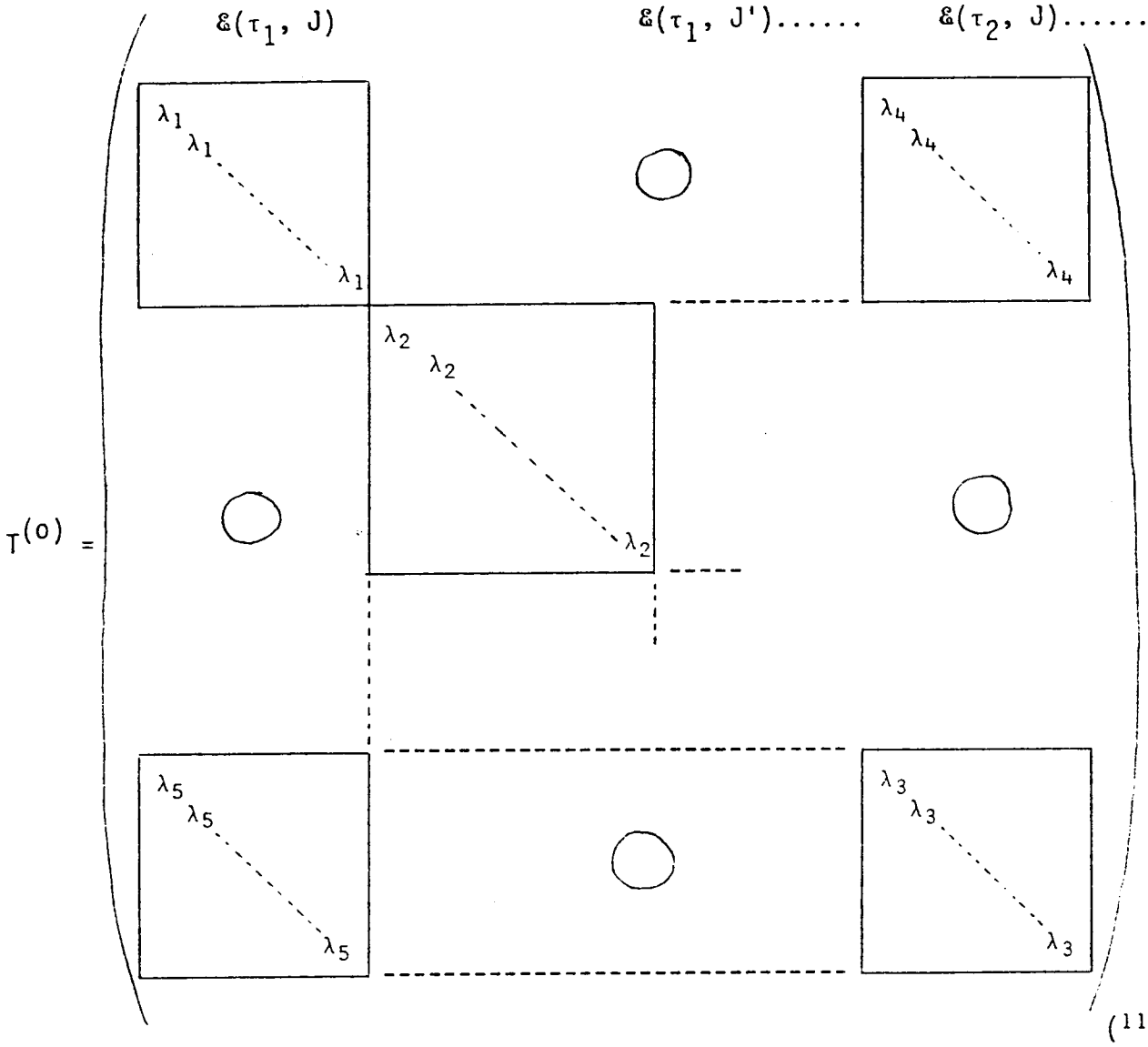
Lorsque K = 0, on dit que l'opérateur $T^{(K)}$ est scalaire (opérateur invariant par rotation qui commute avec toutes les composantes du moment cinétique total $\vec{J}$). Le coefficient de Clebsch-Gordan qui apparaît dans l'expression (^{112}) du théorème de Wigner-Eckart s'écrit ici :

$$< J \; M \; |J' \; 0 \; M' \; 0 > = \delta_{JJ'} \; \delta_{MM'} \qquad (^{116})$$

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 $\mathcal{E}(\tau, J)$, 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 ? Dans chaque $\mathcal{E}(\tau, J)$, $T^{(0)}$ 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 $T^{(o)}$ est contenue dans le coefficient ([116]). Il n'est pas impossible que $T^{(o)}$ 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 :



([117])

Considérons maintenant deux opérateurs scalaires $T_a^{(o)}$ et $T_b^{(o)}$. A l'intérieur de chaque $\&(\tau, J)$, ils sont représentés par des matrices scalaires $\lambda_a(\tau) \times (1)$ et $\lambda_b(\tau) \times (1)$, de sorte que, si l'on pose :

$$c_{ab}(\tau) = \lambda_a(\tau) / \lambda_b(\tau)$$

il vient :

$$T_a^{(o)} = c_{ab}(\tau)\, T_b^{(o)} \qquad (118\text{-a})$$

Donc, $T_a^{(o)}$ et $T_b^{(o)}$ sont proportionnels [tous leurs éléments de matrice dans $\&(\tau, J)$ sont dans un même rapport $c_{ab}(\tau)$] ; quel que soit l'état $|\psi_\tau>$ du système physique appartenant à $\&(\tau, J)$, on a :

$$< T_a^{(o)} > = < \psi_\tau \mid T_a^{(o)} \mid \psi_\tau >$$

$$= c_{ab}(\tau) < T_b^{(o)} >$$

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 $\&(\tau, J)$ donné, on s'expose à des erreurs [cf. remarque (i) ci-dessous] . Il est en général inexact de dire que $T_a^{(o)}$ et $T_b^{(o)}$ sont proportionnels dans l'espace des états & total [somme directe de tous les $\&(\tau, J)$] ; d'ailleurs, le coefficient de proportionnalité $\lambda_a(\tau) / \lambda_b(\tau)$ dépend du sous-espace $\&(\tau, J)$ considéré.

Remarques :

(i) Une façon d'éviter tout risque d'erreur est de ne jamais écrire de relation du type (118-a) et de la remplacer par :

$$P(\tau, J)\, T_a^{(o)}\, P(\tau, J) = c_{ab}(\tau)\, P(\tau, J)\, T_b^{(o)}\, P(\tau, J) \qquad (118\text{-b})$$

où $P(\tau, J)$ est le projecteur orthogonal sur le sous-espace $\&(\tau, J)$. 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 :

$$T_a^{(o)}\, T_b^{(o)}$$

Il est facile de vérifier que cet opérateur est aussi scalaire. On peut être

tenté d'écrire que, dans $\mathcal{E}(\tau, J)$, cet opérateur est proportionnel à :

$$c_{ab}(\tau) \left[T_b^{(o)} \right]^2$$

Cette égalité semblerait découler directement de (^{118}-a) ; elle est cependant fausse. En réalité, il faut écrire :

$$\langle \tau, J, M | T_a^{(o)} T_b^{(o)} | \tau, J, M \rangle = \sum_{\tau'} \langle \tau, J, M | T_a^{(o)} | \tau', J, M \rangle \langle \tau', J, M | T_b^{(o)} | \tau, J, M \rangle \qquad (^{119})$$

[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 $T_a^{(o)}$ et $T_b^{(o)}$ entre espaces $\mathcal{E}(\tau, J)$ 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 $T_a^{(o)} = \vec{J}^2$] .

(iii) Les éléments de matrice de deux opérateurs scalaires $T_b^{(o)}$ 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 (^{119}), 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 $T_b^{(o)2}$.

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 (^{94}-a), 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 :

$$M' = M + Q \qquad (120\text{-a})$$

$$J' = J+1,\ J,\ J-1 \qquad (120\text{-b})$$

(si ces deux égalités ne sont pas vérifiées simultanément, l'élément de matrice est nul). Pour l'élément de matrice $< \tau, J, M \,|T^{(K=1)}_{x_i}|\, \tau', J', M' >$, il obéit encore à la règle de sélection (^{120}-b) ; la règle (^{120}-a) doit être remplacée par :

$$M' = M \pm 1 \quad \text{si } x_i = x \text{ ou } y \quad (i = 1, 2)$$

$$M' = M \quad \text{si } x_i = z \quad (i = 3) \qquad (120\text{-c})$$

A l'intérieur d'un sous-espace $\&(\tau, J)$ 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

$$< \tau, J||\vec{V}||\tau, J >$$

C'est un nombre réel si $\vec{V}$ est hermitique [égalité (^{113})] .

Les règles de sélection (^{120}) montrent que la matrice représentant V_z dans $\&(\tau, J)$ 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 $< J\ 1\ M\ 0\ |J\ M >$, 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 $\&(\tau, J)$ est, pour chacune de leurs composantes (cartésiennes ou standard), toujours égal au rapport de leurs éléments de matrices réduits. Si l'on pose :

$$\alpha_{ab}(\tau) = \frac{< \tau, J||\vec{V}_a||\tau, J >}{< \tau, J||\vec{V}_b||\tau, J >} \qquad (121\text{-a})$$

(☆) *Rappelons que nous rangeons les vecteurs de la base standard par valeurs décroissantes de M.*

on peut écrire, à l'intérieur de $\mathcal{E}(\tau, J)$:

$$\vec{V}_a = \alpha_{ab}(\tau)\ \vec{V}_b \qquad (121\text{-b})$$

Cette égalité est à prendre avec les mêmes précautions que (118-a) : elle ne concerne que l'action de $\vec{V}_a$ et $\vec{V}_b$ restreinte à un sous-espace $\mathcal{E}(\tau, J)$ et il est plus correct d'écrire :

$$P(\tau, J)\ \vec{V}_a\ P(\tau, J) = \alpha_{ab}(\tau)\ P(\tau, J)\ \vec{V}_b\ P(\tau, J) \qquad (121\text{-c})$$

[rappelons que $P(\tau, J)$ désigne le projecteur orthogonal sur $\mathcal{E}(\tau, J)$] .

On peut choisir pour $\vec{V}_b$ l'opérateur moment cinétique total $\vec{J}$ lui-même, qui commute avec $P(\tau, J)$. La relation (121-c) devient alors pour un opérateur vectoriel $\vec{V}$ quelconque :

$$P(\tau, J)\ \vec{V}\ P(\tau, J) = \alpha_V(\tau)\ P(\tau, J)\ \vec{J} \qquad (122\text{-a})$$

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 $\vec{J}$:

$$P(\tau, J)\ \vec{J}.\vec{V}\ P(\tau, J) = \alpha_V(\tau)\ P(\tau, J)\ \vec{J}^2 \qquad (122\text{-b})$$

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 :

$$< \vec{J}.\vec{V} >_{\tau,J}\ P(\tau, J)$$

où la constante $< \vec{J}.\vec{V} >_{\tau,J}$ désigne la valeur commune de tous les éléments diagonaux dans $\mathcal{E}(\tau, J)$ de l'opérateur $\vec{J}.\vec{V}$ [en d'autres termes, quel que soit le ket normé $|\psi>$ appartenant à $\mathcal{E}(\tau, J)$, la valeur moyenne $<\psi|\vec{J}.\vec{V}|\psi>$ est égale à la constante $< \vec{J}.\vec{V} >_{\tau, J}$] . Pour finir, l'égalité (122-b) donne :

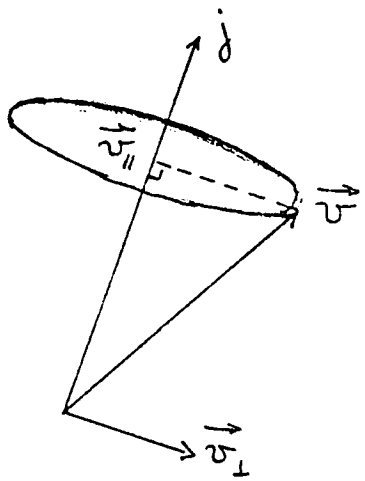
$$\alpha_V(\tau) = \frac{< \vec{J}.\vec{V} >_{\tau, J}}{J(J+1)\ \hbar^2} \qquad (122\text{-c})$$

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 le 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 :

$$\vec{v}_{//} = \vec{J} \times \frac{\vec{v}.\vec{J}}{\vec{J}^2} \qquad (123)$$

de $\vec{v}$ sur $\vec{J}$ [voir figure] ; 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 $\vec{J}$ (⋆).



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 $\&(\tau, J)$ 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 (100), [ou des formules (103)], l'opérateur hermitique $\overline{\overline{J}}^{(K=2)}$ de composantes standard :

(⋆) *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.*

$$\overline{\overline{J}}^{(2)}_{\pm 2} = (J_{\pm 1})^2 = (J_{\pm})^2 / 2$$

$$\overline{\overline{J}}^{(2)}_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (J_{\pm 1} J_0 + J_0 J_{\pm 1}) = \frac{}{+} (J_{\pm} J_z + J_z J_{\pm}) / \sqrt{2}$$

$$\overline{\overline{J}}^{(2)}_{0} = \frac{1}{\sqrt{6}} (J_{+1} J_{-1} + 2J_0^2 + J_{-1} J_{+1}) = (3J_z^2 - \vec{J}^2) / \sqrt{6}$$

(124)

Tous les tenseurs $T^{(K=2)}$ seront proportionnels à ce tenseur $\overline{\overline{J}}^{(K=2)}$, dans $\&(\tau, J)$. La valeur moyenne $< \overline{\overline{J}}^{(2)} >$ de ce tenseur [c'est-à-dire les 5 valeurs moyennes des composantes $\overline{\overline{J}}^{(2)}_Q$] sera appelée "alignement" du système physique (par opposition à "orientation" qui désigne la valeur moyenne de $\vec{J}$). Le coefficient de Clebsch-Gordan $< J\ 2\ M'Q\ |J\ M >$ qui apparaît grâce au théorème de Wigner-Eckart montre que l'alignement ne peut être non-nul que dans un espace $\&(\tau, J)$ où $J \geqslant 1$ (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].

COMPLEMENT I-A :
POINTS DE VUE D'EULER ET DE LAGRANGE
EN MECANIQUE CLASSIQUE

-:-

Le but de ce complément est d'exposer deux points de vue différents qui peuvent être utilisés en mécanique classique pour décrire un ensemble de particules se déplaçant dans l'espace des phases : celui d'Euler et celui de Lagrange. Ils présentent une certaine analogie avec, respectivement, les points de vue de Shrödinger et de Heisenberg en mécanique quantique. Comme le point de vue de Heisenberg, celui de Lagrange est mieux adapté aux calculs de valeurs moyennes à deux temps (fonctions de corrélation).

1 - POINT DE VUE D'EULER

Soit un système physique décrit, en formalisme hamiltonien, par N coordonnées q_i et N moments conjugués p_i. Son état dynamique est défini par la donnée d'un point de coordonées q_i et p_i dans un espace à 2N dimensions (6 si le système est constitué d'une particule unique) dit "espace des phases". Les équations de Hamilton donnent le mouvement de ce point :

$$\begin{cases} \dot{q}_i(t) = \dfrac{\partial}{\partial p_i} H\,[q_j(t)\,,\,p_j(t)\,;\,t\,] \\ \dot{p}_i(t) = -\dfrac{\partial}{\partial q_i} H\,[\,q_j(t)\,,\,p_j(t)\,;\,t\,] \end{cases} \qquad (1)$$

où $H\,[q_i\,,\,p_i\,;\,t\,]$ est l'hamiltonien du système.

Prenons maintenant un ensemble statistique de tels systèmes, défini à l'instant origine $t = t_o$ par une densité de probabilité dans l'espace des

phases $\rho(q_i, p_i, t_o)$; la probabilité que, à l'instant t_o, le point caractéristique du système soit dans un élément de volume

$$dq_1 \; dq_2 \; \ldots \; dq_N \; dp_1 \; dp_2 \; \ldots \; dp_N$$

centré en :

$$q_1, q_2, \ldots, q_N, p_1, p_2 \ldots p_N$$

est par définition :

$$d\mathcal{S} = \rho(q_1, q_2 \ldots q_N, p_1, p_2 \ldots p_N ; t) \times dq_1 \ldots dq_N \; dp_1 \ldots dp_N \qquad (2)$$

On a :

$$\int d^N q \int d^N p \; \rho(q_1, \ldots q_N, p_1 \ldots p_N ; t) = 1 \qquad (3)$$

où $\int d^N q$ et $\int d^N p$ sont des notations simplifiées pour $\int dq_1 \int dq_2 \ldots \int dq_N$ et $\int dp_1 \int dp_2 \ldots \int dp_N$ respectivement.

L'évolution du système est considérée comme certaine (la fonction H n'est pas aléatoire), et les probabilités n'interviennent que dans la définition de son état initial.

Dans l'espace des phases à 2N dimenstion, on peut considérer que ρ donne la densité d'un fluide ; la densité de courant associée sera alors un vecteur à 2N composantes :

$$\vec{J} \begin{cases} \rho(q_j, p_j ; t)\, \dot{q}_i = \rho(q_j, p_j ; t) \dfrac{\partial}{\partial p_i} H(q_j, p_j ; t) \\ \rho(q_j, p_j ; t)\, \dot{p}_i = -\rho(q_j, p_j ; t) \dfrac{\partial}{\partial q_i} H(q_j, p_j ; t) \end{cases} \qquad (4)$$

La loi de conservation des particules du fluide s'écrit (la notation $^{2N}\vec{\nabla}$ symbolise une divergence prise dans l'espace des phases, somme de 2N dérivées)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + {}^{2N}\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

Elle donne ici :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \sum_i \left\{ \frac{\partial}{\partial q_i} \left[\rho(q_j , p_j ; t) \frac{\partial}{\partial p_i} H(q_j , p_j ; t) \right] \right.$$

$$\left. - \frac{\partial}{\partial p_i} \left[\rho(q_j , p_j ; t) \frac{\partial}{\partial q_i} H(q_j , p_j ; t) \right] \right\} \qquad (5)$$

Les termes en $\partial^2 H / \partial q_i \partial p_i$ disparaissent et il reste :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial \rho}{\partial q_i} (q_j , p_j ; t) \frac{\partial H}{\partial p_i} (q_j , p_j ; t) +$$

$$+ \frac{\partial \rho}{\partial p_i} (q_j , p_j ; t) \frac{\partial H}{\partial q_i} (q_j , p_j ; t)$$

$$= \left\{ H(q_j , p_j ; t) , \rho(q_j , p_j ; t) \right\} \qquad (6)$$

[avec la définition (1-71) des crochets de Poisson] .

Calculons maintenant la dérivée totale par rapport au temps de ρ [on "accompagne" les particules et on mesure à chaque instant leur "densité" dans l'espace des phases] :

$$\frac{d}{dt} \rho = \frac{\partial}{\partial t} \rho + \sum_i \left(\dot{q}_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \rho + \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial \rho}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \rho + \left\{ \rho , H(t) \right\} \qquad (7)$$

Comme $\{\rho , H\} = - \{H , \rho\}$, il reste simplement

$$\frac{d}{dt} \rho = 0 \qquad (8)$$

Les particules du "fluide" s'écoulent sans que leur "densité" varie (elles occupent au cours du temps un volume constant de l'espace des phases).

Considérons enfin une grandeur $\mathcal{A}$ qui dépend des q_i et p_i et éventuellement explicitement du temps (par exemple l'énergie cinétique d'un ensemble de particules, leur énergie potentielle d'interaction, etc...) :

$$\mathcal{A}(q_i, p_i ; t)$$

La valeur moyenne de $\mathcal{A}$ est donnée par

$$\overline{\mathcal{A}}(t) = \int d^N q \int d^N p \quad \rho(q_i, p_i ; t) \quad \mathcal{A}(q_i, p_i ; t) \tag{9}$$

Compte tenu de (6), on a :

$$\frac{d}{dt} \overline{\mathcal{A}}(t) = \int d^N q \int d^N p \; [\{ H , \rho \} \mathcal{A} + \rho \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{A}] \tag{10}$$

Toutes les quantités introduites dans ce paragraphe 1 concernent le point de vue d'Euler ; on peut considérer que ρ, $\mathcal{A}$, etc... ont un indice $\mathcal{E}$ sous-entendu ($\mathcal{E}$ pour Euler).

2 - POINT DE VUE DE LAGRANGE

Le point de vue du §1 précédent est caractérisé par le fait que les intégrations se font sur des éléments de volume $d^N q$ et $d^N p$ relatives à la position du point caractéristique du système à l'instant t. Si l'on veut calculer des valeurs moyennes à deux temps, il faudrait dans un tel point de vue corréler les positions du système à des instants t et t' différents ; il est plus commode d'effectuer des intégrations sur les variables qui décrivent l'état initial du système à $t = t_o$. C'est ce que l'on fait dans le point de vue de Lagrange. La densité est alors indépendante du temps et donnée par

$$\rho^L(q_i^o, p_i^o) = \rho(q_i = q_i^o, p_i = p_i^o ; t = t_o) \tag{11}$$

[ρ est la fonction du §1]. De même, dans le point de vue de Heisenberg en mécanique quantique, le vecteur d'état $|\psi_H\rangle$ ne varie pas, la dépendance en temps étant reportée sur les opérateurs A_H.

La fonction $\mathcal{A}^L (q_i^o, p_i^o ; t)$ est par définition celle qui donne à l'instant t la contribution à la grandeur $\mathcal{A}$ des points de l'espace des phases qui étaient à l'instant t_o en q_i^o et p_i^o. En d'autres termes, si les

solutions des équations (1) satisfaisant aux conditions initiales

$$\begin{cases} q_j\ (t = 0) \ = \ q_j^{\,o} \\ p_j\ (t = 0) \ = \ p_j^{\,o} \end{cases} \tag{12}$$

s'écrivent :

$$\begin{cases} q_j\ (q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t) \\ p_j\ (q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t) \end{cases} \tag{13}$$

On définit :

$$\mathcal{A}^L\ (q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t) \ = \ \mathcal{A}[\,q_i(q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t)\ ,\ p_i(q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t)\ ;\ t\,] \tag{14}$$

Il est clair que la valeur moyenne de $\mathcal{A}$ résulte de la contribution des diverses valeurs initiales $q_i^{\,o}$ et $p_i^{\,o}$ possibles, et que :

$$\overline{\mathcal{A}}(t) \ = \ \int d^N q^o \int d^N p^o \ \rho^L(q_i^{\,o},\ p_i^{\,o})\ \mathcal{A}^L(q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t)$$

D'autre part, $\mathcal{A}^L$ dépend explicitement du temps même si ce n'est pas le cas de $\mathcal{A}$ lui-même, puisque d'après (14) et (1) :

$$\frac{\partial}{\partial t}\ \mathcal{A}^L\ (q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t) \ = \ \sum_i \left\{ \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial q_i}\ \frac{\partial H}{\partial p_i} \ - \ \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p_i}\ \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\} \ + \ \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t}$$

$$= \ \left\{ \mathcal{A}\ ,\ H(t) \right\} \ + \ \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t} \tag{16}$$

Dans le second membre de cette égalité, la dépendance en $q_i^{\,o}$ et $p_i^{\,o}$ est obtenue en remplaçant les q_j et p_j par leurs expressions (13).

Une valeur moyenne à deux temps se calcule aisément. En effet :

$$\mathcal{A}(t)\ \mathcal{B}(t') \ = \int d^N q^o \int d^N p^o \ \rho^N(q_i^{\,o},\ p_i^{\,o})$$

$$\text{x}\ \mathcal{A}^L\ (q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t)\ \mathcal{B}^L(q_i^{\,o},\ p_i^{\,o}\ ;\ t') \tag{17}$$

Le point de vue de Lagrange est donc l'analogue de celui de Heisenberg en mécanique quantique.

Remarque :

L'égalité (16) est "mixte" car elle donne la variation temporelle de $\mathscr{A}^L$ en fonction d'un crochet de Poisson des variables q_i et p_i, celles du point de vue d'Euler. Il est plus commode de n'utiliser dans le point de vue de Lagrange que les variables q_i^o et p_i^o, et donc d'introduire les crochets de Poisson correspondants :

$$\{ A^L , B^L \}_L = \sum_n \left(\frac{\partial A^L}{\partial q_n^o} \frac{\partial B^L}{\partial p_n^o} - \frac{\partial A^L}{\partial p_n^o} \frac{\partial B^L}{\partial q_n^o} \right) \qquad (18)$$

Nous allons voir que l'égalité (16) peut alors être réécrite :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathscr{A}^L (q_i^o, p_i^o ; t) = \left\{ \mathscr{A}^L (t) , H^L (t) \right\}_L + \frac{\partial \mathscr{A}}{\partial t} [q_j (q_i^o, p_i^o ; t) , p_j (q_i^o, p_i^o ; t) ; t] \qquad (19\text{-a})$$

ou encore, si $\mathscr{A}$ (en point de vue d'Euler) ne dépend pas du temps :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathscr{A}^L (q_i^o, p_i^o ; t) = \left\{ \mathscr{A}^L (t) , H^L (t) \right\}_L \qquad (19\text{-b})$$

Pour démontrer ces résultats, commençons par calculer les crochets de Poisson :

$$\left\{ q_i , q_j \right\}_L \qquad \left\{ p_i , p_j \right\}_L \qquad \left\{ q_i , p_j \right\}_L$$

Pour cela, prenons un système de valeurs des q_n^o et p_n^o, et faisons-les varier de δq_n^o et δp_n^o. Les accroissements correspondants $\delta q_i(t)$ et $\delta p_i(t)$ satisfont d'après les équations du mouvement (1) à :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \delta q_i(t) = \frac{\partial}{\partial p_i} \sum_k [\frac{\partial H}{\partial q_k} \delta q_k(t) + \frac{\partial H}{\partial p_k} \delta p_k (t)] \\ \frac{d}{dt} \delta p_i(t) = - \frac{\partial}{\partial q_i} \sum_k [\frac{\partial H}{\partial q_k} \delta q_k (t) + \frac{\partial H}{\partial p_k} \delta p_k (t)] \end{cases} \qquad (20)$$

Donc, les variations $\delta q_n^{\,o}$ et $\delta p_n^{\,o}$ entraînent des variations des δq et δp aux instants t et t+dt qui sont reliées par :

$$\delta q_i(t+dt) = \delta q_i(t) + dt \sum_k \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_k \, \partial p_i} \, \delta q_k(t) + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \, \partial p_i} \, \delta p_k(t) \right)$$

$$\delta p_i(t+dt) = \delta p_i(t) - dt \sum_k \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \, \partial q_k} \, \delta q_k(t) + \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \, \partial p_k} \, \delta p_k(t) \right) \qquad (21)$$

Par suite :

$$\frac{\partial}{\partial q_n^{\,o}} [q_i(t+dt)] = \frac{\partial}{\partial q_n^{\,o}} [q_i(t)] + dt \sum_k \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \, \partial p_i} \frac{\partial q_k}{\partial q_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \, \partial p_i} \frac{\partial p_k}{\partial q_n^{\,o}}$$

$$\frac{\partial}{\partial p_n^{\,o}} [q_i(t+dt)] = \frac{\partial}{\partial p_n^{\,o}} [q_i(t)] + dt \sum_k \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \, \partial p_i} \frac{\partial q_k}{\partial p_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \, \partial p_i} \frac{\partial p_k}{\partial p_n^{\,o}}$$

$$\frac{\partial}{\partial q_n^{\,o}} [p_i(t+dt)] = \frac{\partial}{\partial q_n^{\,o}} p_i(t) - dt \sum_k \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \, \partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial q_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \, \partial p_k} \frac{\partial p_k}{\partial q_n^{\,o}}$$

$$\frac{\partial}{\partial p_n^{\,o}} [p_i(t+dt)] = \frac{\partial}{\partial p_n^{\,o}} [p_i(t)] - dt \sum_k \left\{ \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \, \partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial p_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \, \partial p_k} \frac{\partial p_k}{\partial p_n^{\,o}} \right\} \qquad (22$$

On vérifie alors que :

$$\begin{aligned}
\{q_i(t+dt), q_j(t+dt)\}_L &= \sum_n \left\{ \frac{\partial}{\partial q_n^{\,o}} q_i(t+dt) \frac{\partial}{\partial p_n^{\,o}} q_j(t+dt) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial}{\partial p_n^{\,o}} q_i(t+dt) \frac{\partial}{\partial q_n^{\,o}} q_j(t+dt) \right\} \\
&= \{q_i(t), q_j(t)\}_L \\
&\quad + dt \sum_{nk} \left\{ \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_k \, \partial p_i} \frac{\partial q_k}{\partial q_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \, \partial p_i} \frac{\partial p_k}{\partial q_n^{\,o}} \right] \frac{\partial q_j}{\partial p_n^{\,o}} \right. \\
&\qquad \left. + \frac{\partial q_i}{\partial q_n^{\,o}} \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_k \, \partial p_j} \frac{\partial q_k}{\partial p_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \, \partial p_j} \frac{\partial p_k}{\partial p_n^{\,o}} \right] \right. \\
&\quad - [\text{termes où i et j sont permutés}] + O(dt^2) \\
&= \left\{ q_i(t), q_j(t) \right\}_L + O(dt^2) \qquad (23)
\end{aligned}$$

De la même façon, il vient :

$$\left\{p_i(t+dt),\ p_j(t+dt)\right\}_L = \left\{p_i(t),\ p_j(t)\right\}_L + 0(dt^2) \qquad (24)$$

Les crochets de Poisson considérés sont donc indépendants du temps. Comme pour $t = 0$: $q_i(=0) = q_i^{\,o}$, $p_i(=0) = p_i^{\,o}$, il vient donc :

$$\left\{q_i(t),\ q_j(t)\right\}_L = 0 \qquad (25\text{-a})$$

$$\left\{p_i(t),\ p_j(t)\right\}_L = 0 \qquad (25\text{-b})$$

Le crochet de Poisson croisé se calcule de façon analogue :

$$\left\{q_i(t+dt)\ ,\ p_j(t+dt)\right\}_L$$

$$= \sum_n \left\{ \frac{\partial}{\partial q_n^{\,o}}\ q_i(t+dt)\ \frac{\partial}{\partial p_n^{\,o}}\ p_j(t+dt) - \frac{\partial}{\partial p_n^{\,o}}\ q_i(t+dt)\ \frac{\partial}{\partial q_n^{\,o}}\ p_j(t+dt) \right\}$$

$$= \left\{q_i(t),\ p_j(t)\right\}_L$$

$$+ dt \sum_{kn} \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\ \partial p_i}\ \frac{\partial q_k}{\partial q_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k\ \partial p_i}\ \frac{\partial p_k}{\partial q_n^{\,o}} \right] \frac{\partial p_j}{\partial p_n^{\,o}}$$

$$- dt \sum_{kn} \frac{\partial q_i}{\partial q_n^{\,o}} \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_j\ \partial q_k}\ \frac{\partial q_k}{\partial p_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_j\ \partial p_k}\ \frac{\partial p_k}{\partial p_n^{\,o}} \right]$$

$$- dt \sum_{kn} \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\ \partial p_i}\ \frac{\partial q_k}{\partial p_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k\ \partial p_i}\ \frac{\partial p_k}{\partial p_n^{\,o}} \right] \frac{\partial p_j}{\partial q_n^{\,o}}$$

$$+ dt \sum_{kn} \frac{\partial q_i}{\partial p_n^{\,o}} \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_j\ \partial q_k}\ \frac{\partial q_k}{\partial q_n^{\,o}} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_j\ \partial p_k}\ \frac{\partial p_k}{\partial q_n^{\,o}} \right] + 0\ (dt^2)$$

$$= \left\{q_i(t)\ ,\ p_j(t)\right\}_L$$

$$+ dt \sum_k \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_j\ \partial q_k} \left\{q_k,\ q_i\right\}_L + \frac{\partial^2 H}{\partial p_k\ \partial p_i} \left\{p_k,\ p_j\right\}_L \right.$$

$$\left. + \frac{\partial^2 H}{\partial q_k\ \partial p_i} \left\{q_k,\ p_j\right\}_L + \frac{\partial^2 H}{\partial q_j\ \partial p_k} \left\{p_k,\ q_i\right\}_L \right] + 0\ (dt^2) \qquad (26)$$

Compte tenu des égalités (25), il reste :

$$\frac{d}{dt}\left\{q_i(t)\ ,\ p_j(t)\right\}_L = \sum_k \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_k\ \partial p_i}\left\{q_k,\ p_j\right\}_L - \frac{\partial^2 H}{\partial q_j\ \partial p_k}\left\{q_i,\ p_k\right\}_L\right] \qquad (27)$$

Les conditions initiales étant :

$$\left\{q_i(t=0)\ ,\ p_j(t=0)\right\}_L = \delta_{ij} \qquad (28)$$

il vient de même, la contribution au second membre de (27) de tous les termes $i \neq j$ étant nulle :

$$\left\{q_i(t)\ ,\ p_j(t)\right\}_L = \delta_{ij} \qquad (29)$$

Il ne nous reste maintenant plus qu'à évaluer la valeur de la quantité $\left\{A^L\ ,\ B^L\right\}_L$ définie en (18). Utilisant la définition (14) et le théorème de dérivation des fonctions de fonctions, nous obtenons :

$$\begin{aligned}\left\{A^L\ ,\ B^L\right\}_L = \sum_{\substack{n\\ij}} \Bigg\{ &\left[\frac{\partial A}{\partial q_i}\ \frac{\partial q_i}{\partial q_n}^{o} + \frac{\partial A}{\partial p_i}\ \frac{\partial p_i}{\partial q_n}^{o}\right]\left[\frac{\partial B}{\partial q_j}\ \frac{\partial q_j}{\partial p_n}^{o} + \frac{\partial B}{\partial p_j}\ \frac{\partial p_j}{\partial p_n}^{o}\right] \\ &- \left[\frac{\partial A}{\partial q_i}\ \frac{\partial q_i}{\partial p_n}^{o} + \frac{\partial A}{\partial p_i}\ \frac{\partial p_i}{\partial p_n}^{o}\right]\left[\frac{\partial B}{\partial q_j}\ \frac{\partial q_j}{\partial q_n}^{o} + \frac{\partial B}{\partial p_j}\ \frac{\partial p_j}{\partial q_n}^{o}\right] \\ = \sum_{ij} \Bigg[&\frac{\partial A}{\partial q_i}\ \frac{\partial B}{\partial q_j}\left\{q_i,\ q_j\right\}_L + \frac{\partial A}{\partial p_i}\ \frac{\partial B}{\partial q_j}\left\{p_i,\ q_j\right\}_L \\ &+ \frac{\partial A}{\partial q_i}\ \frac{\partial B}{\partial p_j}\left\{q_i,\ p_j\right\}_L + \frac{\partial A}{\partial p_i}\ \frac{\partial B}{\partial p_j}\left\{p_i,\ p_j\right\}_L\Bigg]\end{aligned} \qquad (30)$$

D'après (25) et (29), il vient :

$$\begin{aligned}\left\{A^L\ ,\ B^L\right\}_L &= \sum_i \left[\frac{\partial A}{\partial q_i}\ \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\ \frac{\partial B}{\partial q_j}\right] \\ &= \left\{A\ ,\ B\right\}\end{aligned} \qquad (31)$$

ou, au second membre, il faut remplacer les q_j et p_j par leurs expressions (13) en fonction des $q_n^{\,o}$ et $p_n^{\,o}$.

Un exemple simple : particule à une dimension soumise à une force $mg(t)$:

- Point de vue d'Euler :

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} - mg(t)\,x$$

$$\frac{d}{dt}x = \frac{p}{m} \qquad \frac{d}{dt}p = mg(t)$$

$$\begin{cases} p(t) = p_o + m\int_0^t dt'\ g(t') \\ x(t) = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\ g(t'') + \frac{p_o}{m}t + x_o \end{cases}$$

- Point de vue de Lagrange :

$$H^L(x_o, p_o\ ;\ t) = \frac{1}{2m}\left[p_o + m\int_0^t dt'\ g(t')\right]^2$$

$$- mg(t)\left[\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\ g(t'') + \frac{p_o}{m}\ t\ +\ x_o\right]$$

$$= \frac{p_o^{\,2}}{2m} - mg(t)\,x_o + p_o\left[\int_0^t dt'\ g(t') - t\,g(t)\right]$$

$$+\ F(t)$$

où : $$F(t) = m\left[\frac{1}{2}\left(\int_0^t dt'\ g(t')\right)^2 - \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\ g(t)\,g(t'')\right]$$

L'impulsion de la particule et sa position sont un point de vue de Lagrange :

$$p^L(p_o\ ;\ t) \;=\; p_o + m \int_0^t dt'\ g(t')$$

$$x^L(x_o,\ p_o\ ;\ t) = x_o + \frac{t}{m}\ p_o + \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\ g(t'')$$

On calcule :

$$\left\{x^L,\ H^L\right\}_L \;=\; \frac{p_o}{m} + \int_0^t dt'\ g(t') \;-\; t\ g(t) \;-\; \left(\frac{t}{m}\right)\left(-mg(t)\right)$$

$$= \frac{p_o}{m} + \int_0^t dt'\ g(t')$$

$$\left\{p^L,\ H^L\right\}_L \;=\; m\ g(t)$$

et on vérifie facilement que l'égalité (19-b) est bien satisfaite.

COMPLEMENT II - A

CLASSES RESIDUELLES D'UN SOUS-GROUPE ; GROUPE QUOTIENT

Soit H un sous-groupe de G. L'élément général de H sera noté h, celui de G noté g.

CLASSES RESIDUELLES A GAUCHE

A chaque sous-groupe H de G, on peut associer une façon de regrouper les éléments de G en classes C_0, C_1, C_2,... dites "classes résiduelles à gauche" de H, dont la réunion redonne le groupe G.

Considérons en effet deux éléments g et g' et supposons qu'il existe h et h' appartenant au sous-groupe H tels que :

$$g\,h = g'\,h' \qquad \text{(II-A-1)}$$

On définit ainsi une relation d'équivalence entre éléments g (en particulier on vérifie facilement que, du fait que H est un sous-groupe, la relation est transitive : g équivalent à g' et g' équivalent à g" entraîne que g est équivalent à g"). Les classes C sont alors définies comme les ensembles constitués par tous les éléments de G équivalents entre eux.

La classe C_0 sera choisie en y mettant tous les éléments de G équivalents à e, c'est-à-dire tous les éléments g tels que :

$$g\,h = e\,h' \qquad \text{(II-A-2)}$$

ou encore :

$$g = h'\,h^{-1} \in H \qquad \text{(II-A-3)}$$

Réciproquement, si $g \in H$, on peut écrire :

$$g\,g^{-1} = e \qquad \text{(II-A-4)}$$

qui est l'égalité (II-A-1) avec h = g, g' = e, h' = e. C_0 est donc simplement le sous-groupe H lui-même.

C_1 sera obtenu en choisissant un élément quelconque de G hors de C_0, et en lui associant tous les éléments équivalents, et ainsi de suite pour C_2, C_3, etc.

La relation (II-A-1) peut s'écrire :

$$g' = g\,h'' \qquad \text{(II-A-5)}$$

avec :

$$h'' = h\,h'^{-1} \in H \qquad \text{(II-A-6)}$$

Inversement, (II-A-5) redonne (II-A-1) si l'on pose $h' = e$ et $h = h''$. On peut donc dire que g et g' sont équivalents par H s'il existe $h'' \in H$ tel que (II-A-5) soit satisfaite.

On voit alors que, à chaque élément g, on peut associer par (II-A-5) autant d'éléments g' équivalents distincts qu'il y a d'éléments dans g. Donc, si H est fini et d'ordre p, chaque classe C contient le même nombre p d'éléments distincts.

Soit q le nombre de classes, N l'ordre du groupe fini G. Ce dernier étant la réunion des classes (disjointes) C_0, C_1, C_2,... on a :

$$N = p\,q \qquad \text{(II-A-7)}$$

Nous aboutissons donc au résultat suivant (théorème de Lagrange) : l'ordre d'un sous-groupe d'un groupe d'ordre fini N est un diviseur de l'entier N.

Remarques :

(i) On définit de même des classes résiduelles à droite associées à H. Elles sont en général distinctes des précédentes (sauf bien sûr si G est abélien).

(ii) Si H est un sous-groupe invariant, on démontre aisément que les classes résiduelles à droite et à gauche sont les mêmes [cf relation (II-10) du chapitre II].

(iii) Ne pas confondre classes résiduelles associées à H et classes de conjugaison (§ A-4 du chapitre II).

GROUPE QUOTIENT

Supposons maintenant que H est un sous-groupe invariant de G. Nous pouvons alors définir une loi de multiplication entre classes en appelant "classe produit" C_iC_j l'ensemble des éléments de la forme g_ig_j où $g_i \in C_i$, $g_j \in C_j$. Vérifions que l'on obtient ainsi une autre classe C_k [grâce au fait que H est invariant]. En effet, si g'_i et g'_j sont deux autres éléments de C_i et C_j respectivement, on a, d'après (II-A-5) :

$$\begin{aligned} g'_i &= g_i\,h_1 \\ g'_j &= g_j\,h_2 \end{aligned} \qquad \text{(II-A-8)}$$

et donc, en utilisant l'égalité (II-10) du chapitre II :

$$\begin{aligned} g'_i\, g'_j &= g_i\, h_1\, g_j\, h_2 \\ &= g_i\, g_j\, h'_1\, h_2 \\ &= g_i\, g_j\, h'' \end{aligned} \qquad \text{(II-A-9)}$$

Cette égalité exprime que le produit $g'_i\, g'_j$ est équivalent à $g_i\, g_j$. Réciproquement, on voit en prenant le même calcul à rebours que tous les éléments de C_k peuvent être ainsi obtenus.

Avec la loi de composition ainsi définie, l'inverse de la classe C_k sera la classe C_k^{-1} qui contient tous les éléments inverses de ceux de C_k (on vérifie que, si H est invariant, il constitue bien une classe C). L'élément neutre est la classe C_0, c'est-à-dire H lui-même.

L'ensemble des C constitue donc un groupe, qui est par définition le groupe quotient G/H.

Exercices :

(i) Montrer que, si l'on effectue le produit tensoriel $\mathcal{G} = G_1 \otimes G_2$, $\mathcal{H} = G_1 \otimes e_2$ est un sous-groupe invariant de $\mathcal{G}$ [e_2 est l'élément neutre de G_2]. Montrer que, pour les éléments de $\mathcal{G}$, la relation d'équivalence (II-A-1) devient particulièrement simple dans ce cas et que le groupe quotient $\mathcal{G}/\mathcal{H}$ est isomorphe à G_2.

(ii) On considère le groupe euclidien $\mathcal{E}_{(3)}$ des déplacements dans l'espace ponctuel réel à trois dimensions. $T_{(3)}$ désigne l'ensemble des translations dans l'espace réel.

Montrer que $T_{(3)}$ est un sous-groupe invariant de $\mathcal{E}_{(3)}$. Montrer que $\mathcal{E}_{(3)} / T_{(3)}$ est isomorphe au sous-groupe des rotations $R_{(3)}$.

COMPLEMENT III-A

FORME DE KILLING, OPERATEUR DE CASIMIR

Dans ce complément, nous allons construire, à partir des constantes de structure $C_{ij}^{\ k}$ du groupe, quelques quantités utiles : composantes K_{ij} d'un tenseur covariant K (forme de Killing), constantes de structure $\bar{C}_{ijk}$ antisymétriques et complètement covariantes, opérateur de Casimir. L'intérêt de ce dernier tient au fait que c'est un opérateur qui commute avec tous les opérateurs X_i. A la fin du complément, nous introduirons la notion de "représentation adjointe" à l'algèbre de Lie $\mathcal{L}$.

1 - FORME DE KILLING ; PRODUIT SCALAIRE ET CHANGEMENT DE BASE DANS $\mathcal{L}$

Les composantes K_{ij} du tenseur K sont définies en fonction des constantes de structure $C_{ij}^{\ k}$ (qui sont des nombres réels) par (*) :

$$K_{ij} = \sum_{kk'} C_{ik}^{\ k'} C_{jk'}^{\ k} \qquad (1)$$

On a évidemment :

$$K_{ij} = K_{ji} \qquad (2)$$

de sorte que la matrice (K) des coefficients K_{ij} est une matrice n x n symétrique et réelle

L'algèbre de Lie $\mathcal{L}$ est un espace vectoriel (sur les réels) dans lequel les n opérateurs X_i (i = 1,2,.., n) forment une base. Tout opérateur X de $\mathcal{L}$ peut s'écrire :

$$X = \sum_{i=i}^{n} \lambda^i X_i \qquad (3\text{-}\alpha)$$

(*) une définition différente, plus naturelle de K, est donnée au §4 (représentation adjointe)

où les λ^i sont des nombres réels. Lorsque nous considérerons X comme un vecteur de $\mathcal{L}$, nous le noterons $|X>>$; une égalité (3-a) s'écrira alors :

$$|X>> = \sum_{i=1}^{n} \lambda^i |X_i>> \qquad (3\text{-b})$$

La matrice (K) peut être utilisée pour introduire un produit scalaire dans $\mathcal{L}$, par :

$$<<X_i | X_j>> = K_{ij} \qquad (4)$$

Le produit scalaire de $|X>>$ par $|X'>>$ vaut donc :

$$<<X|X'>> = \sum_{ij} \lambda^i K_{ij} \lambda^j \qquad (5)$$

où les λ^j sont les composantes (réelles) de $|X'>>$. L'égalité (5) donne une forme bilinéaire et symétrique ($<<X|X'>> = <<X'|X>>$) des deux vecteurs réels $|X>>$ et $|X'>>$; on la désigne sous le nom de "forme de Killing".
On notera toutefois que, lorsque la structure du groupe G est quelconque, les valeurs propres de (K) ne sont pas nécessairement toutes de même signe ; en conséquence, le produit scalaire $<<X|X>>$ de $|X>>$ par lui-même peut être positif ou négatif.

Dans $\mathcal{L}$, on peut effectuer un changement de base, en passant des $|X_i>>$ aux $|\bar{X}_j>>$ définis par :

$$|\bar{X}_j>> = \sum_i S_j^{\ i} |X_i>> \qquad (6)$$

avec inversement :

$$|X_i>> = \sum_j (S^{-1})_i^{\ j} |\bar{X}_j>> \qquad (7)$$

On peut alors introduire les constantes de structure de groupe relatives à la base des $|\bar{X}>>$, c'est-à-dire les nombres $\bar{C}_{ij}^{\ k}$ tels que :

$$[\bar{X}_i, \bar{X}_j] = \sum_k \bar{C}_{ij}^{\ k} \bar{X}_k \qquad (8)$$

On vérifie alors facilement que les constantes de structure sont les composantes deux fois covariantes et une fois contravariantes (*) d'un tenseur d'ordre 3. En effet,

$$[\bar{X}_i, \bar{X}_j] = \sum_{\ell m} S_i^{\ \ell} S_j^{\ m} [X_\ell, X_m] =$$

(*) cf complément A-VII : "rappel sur les tenseurs"

$$= \sum_{\ell m p} S_i^{\ell}\ S_j^{m}\ C_{\ell m}{}^{p}\ X_p$$

$$= \sum_{\substack{\ell m p \\ k}} S_i^{\ell}\ S_j^{m}\ (S^{-1})_p{}^{k}\ \bar{X}_k \qquad (9)$$

de sorte que :

$$\bar{C}_{ij}{}^{k} = \sum_{\ell m p} S_i^{\ell}\ S_j^{m}\ (S^{-1})_p{}^{k}\ C_{\ell m}{}^{k} \qquad (10)$$

Si l'on introduit la matrice $(\bar{K})_{ij}$ à partir des $\bar{C}_{ij}{}^{k}$:

$$\bar{K}_{ij} = \sum_{kk'} \bar{C}_{ik}{}^{k'}\ \bar{C}_{jk'}{}^{k} \qquad (11)$$

(tenseur deux fois covariant obtenu par double contraction d'un tenseur d'ordre 6) et, si l'on calcule à partir de la définition (4) le produit scalaire $\langle\langle \bar{X}_i | \bar{X}_j \rangle\rangle$, on vérifie alors que :

$$\bar{K}_{ij} = \langle\langle \bar{X}_i \mid \bar{X}_j \rangle\rangle$$

Donc le produit scalaire qui a été défini dans $\mathcal{L}$ est indépendant de la base choisie (on peut, sans le changer, transformer linéairement les unes dans les autres les opérateurs X, ou encore les composantes de $\vec{a}$).

Il est clair qu'on simplifie les calculs en choisissant pour les effectuer une base orthogonale d'opérateurs X [c'est-à-dire une base où $(\bar{K})$ est diagonale]. Dans ces conditions, on peut même normer les opérateurs en les multipliant par des constantes convenables, de façon que toutes les valeurs propres de (K) vaillent ± 1 ou 0 :

$$\bar{K}_{ij} = \eta_i\ \delta_{ij} \quad \text{où} \quad \eta_i = \pm 1, 0 \qquad (12)$$

2 - CONSTANTES DE STRUCTURE TOTALEMENT ANTISYMETRIQUES

L'introduction des K_{ij} permet de définir les nouvelles constantes de structure (complètement covariantes) $\tilde{C}_{ij\ell}$ par :

$$\tilde{C}_{ij\ell} = \sum_k K_{\ell k}\ C_{ij}{}^{k} \qquad (13)$$

Ces constantes sont complètement antisymétriques (elles changent de signe si l'on permute deux indices quelconques, alors que cette propriété n'est valable que pour les deux indices i et j des constantes $C_{ij}{}^{k}$). En effet, d'après (1) :

$$\tilde{C}_{ij\ell} = \sum_{kmp} C_{ij}{}^{k}\ C_{kp}{}^{m}\ C_{\ell m}{}^{p} \qquad (14)$$

D'après la relation (43) du chapitre III :

$$\tilde{C}_{ij\ell} = -\sum_{kmp} \left[C_{jp}{}^{k}\ C_{ki}{}^{m} + C_{pi}{}^{k}\ C_{kj}{}^{m}\right]\ C_{\ell m}{}^{p}$$

$$= \sum_{kmp} \left[C_{ik}{}^{m}\ C_{\ell m}{}^{p}\ C_{jp}{}^{k} + C_{pi}{}^{k}\ C_{kj}{}^{m}\ C_{m\ell}{}^{p}\right] \qquad (15)$$

(puisque $C_{ik}{}^{m} = - C_{ki}{}^{m}$, $C_{\ell m}{}^{p} = - C_{m\ell}{}^{p}$). Sous cette forme, il est évident que les indices i, j et ℓ peuvent être échangés par permutation circulaire sans autre effet que de changer les dénominations des indices muets de sommation. D'autre part, l'égalité $C_{ij}{}^{k} = - C_{ij}{}^{k}$ entraîne $\tilde{C}_{ij\ell} = - C_{ji\ell}$. Par suite :

$$\tilde{C}_{ij\ell} = \tilde{C}_{j\ell i} = \tilde{C}_{\ell ij}$$

$$= -\tilde{C}_{ji\ell} = - \tilde{C}_{\ell ji} = - \tilde{C}_{i\ell j} \qquad (16)$$

Exercice

La transformation (12) revient à transformer l'indice k controvariant en un indice ℓ covariant.

Vérifier qu'on a effectivement : $\tilde{C}_{ij\ell} = \langle\langle X_\ell \,|\, [X_i, X_j] \rangle\rangle$ (17)

Remarque

Si l'on a choisi la base $|X_i\rangle\rangle$ où la matrice (K) est diagonale et où les éléments sont donnés par (11), alors (12) devient simplement :

$$\hat{C}_{ij\ell} = \eta_\ell\ C_{ij}{}^{\ell} \qquad (12')$$

où $\eta_\ell = +1, 0$ ou -1

3 - OPERATEUR DE CASIMIR

Nous allons maintenant supposer que la matrice (K) est inversible (aucune de ses valeurs propres n'est nulle) et introduire la matrice inverse $(\bar{H})$ (*) :

$$(H) = (K)^{-1} \tag{18}$$

D'après (12), les éléments $H^{k\ell}$ de matrice permettent d'obtenir les $C_{ij}{}^{k}$ en fonction des $\tilde{C}_{ijk}$:

$$C_{ij}{}^{k} = \sum_{\ell} H^{k\ell}\ \tilde{C}_{ij\ell} \tag{19}$$

Par ailleurs, comme (K), la matrice (H) est symétrique :

$$H^{k\ell} = H^{\ell k} \tag{20}$$

L'opérateur de Casimir C est alors défini par :

$$C = \sum_{mn} H^{mn}\ X_m X_n \tag{21}$$

C'est un opérateur qui est fonction quadratique des X_i. Calculons son commutateur avec X_j :

$$\begin{aligned}[C, X_j] &= \sum_{mn} H^{mn} \left\{ X_m [X_n, X_j] + [X_m, X_j] X_n \right\} \\ &= \sum_{mnk} H^{mn} \left\{ C_{nj}{}^{k}\ X_m X_k + C_{mj}{}^{k}\ X_k X_n \right\}\end{aligned} \tag{22}$$

Permutons dans le deuxième terme du second membre les indices muets m et n. Il vient, puisque (H) est symétrique :

$$\begin{aligned}[C, X_j] &= \sum_{mnk} H^{mn}\ C_{nj}{}^{k}\ [X_m X_k + X_k X_m] \\ &= \sum_{mnk\ell} H^{mn}\ H^{k\ell}\ \tilde{C}_{nj\ell}\ [X_m X_k + X_k X_m]\end{aligned} \tag{23}$$

Dans cette expression, le coefficient de l'opérateur symétrique $[X_m X_k + X_k X_m]$ vaut :

$$\sum_{n\ell} H^{mn}\ H^{k\ell}\ \tilde{C}_{nj\ell} \tag{24}$$

(*) On montre que la condition nécessaire et suffisante pour que (K) soit inversible est que le groupe considéré n'ait pas de sous-groupe de Lie invariant abélien (on dit que le groupe est semi-simple).

qui, d'après (16), est une quantité qui change de signe si l'on permute m et k. Par suite, le second membre de (22) est nul quelque soit j : l'opérateur de Casimir commute avec tous les éléments de l'algèbre de Lie $\mathcal{L}$.

Remarque

Si, dans $\mathcal{L}$, on a choisi une base d'opérateurs $\bar{X}_i$ où $(\bar{K})$ est diagonale et a la forme (12) [η_i = + 1 ou - 1, la valeur 0 étant exclue puisque nous avons supposé (K) inversible], l'opérateur de Casimir est simplement la somme (ou la différence) des opérateurs $\bar{X}_i^2$:

$$C = \sum_i \eta_i \, \bar{X}_i^2 \tag{25}$$

Exercices

Calculer les matrices (K),(H) et l'opérateur de Casimir C pour l'algèbre de Lie des groupes SU(2) et SO(3).

4 - REPRESENTATION ADJOINTE A L'ALGEBRE DE LIE

A tout opérateur A de l'espace vectoriel $\mathcal{L}$ on peut associer un opérateur $\mathcal{A}$ agissant dans $\mathcal{L}$ et dont l'action sur un vecteur quelconque X s'écrit :

$$\mathcal{A}\, X = [A, X] \tag{26}$$

c'est-à-dire :

$$\mathcal{A}\, |X>> = |[A, X]>> \tag{27}$$

$\mathcal{A}$ est quelquefois appelé "opérateur adjoint" à A.

Si nous développons A et X sur une base X_i :

$$\begin{cases} A = \sum_i a^i \, X_i \\ X = \sum_j \lambda^j \, X_j \end{cases} \tag{28}$$

nous obtenons :

$$\mathcal{A}\,|X\rangle\rangle = \sum_{ij} a^i \lambda^j \,|[X_i, X_j]\rangle\rangle$$

$$= \sum_{ijk} a^i \lambda^j \; C_{ij}{}^k \,|X_k\rangle\rangle \qquad (29)$$

Dans la base des $|X_k\rangle\rangle$, les éléments de matrice (mixtes) de $\mathcal{A}$ valent donc :

$$(\mathcal{A})_j{}^k = \sum_i a^i \; C_{ij}{}^k \qquad (30\text{-}o)$$

De même, pour l'opérateur $\mathcal{B}$ associé à $B \in \mathcal{L}$:

$$(\mathcal{B})_\ell{}^j = \sum_{i'} b^{i'} \; C_{i'\ell}{}^j \qquad (30\text{-}b)$$

où les $b^{i'}$ sont les composantes de B. Le produit

$$\mathcal{B}\mathcal{A}\,|X\rangle\rangle = |[B, [A, X]]\rangle\rangle \qquad (31)$$

sera donné par les éléments de la matrice associée à $(\mathcal{B}\mathcal{A})$:

$$(\mathcal{B}\mathcal{A})^k = \sum_j (\mathcal{B})_\ell{}^j (\mathcal{A})_j{}^k$$

$$= \sum_{iji'} a^i b^{i'} C_{ij}{}^k \; C_{i'\ell}{}^j \qquad (32)$$

On définit la trace d'un opérateur agissant dans l'espace vectoriel $\mathcal{L}$ comme la somme de ses éléments diagonaux. Dans le cas de l'opérateur $\mathcal{B}\mathcal{A}$, on obtient, compte tenu de (1)

$$\mathrm{Tr}\left\{\mathcal{B}\mathcal{A}\right\} = \sum_k (\mathcal{B}\mathcal{A})_k{}^k$$

$$= \sum_{ii'} a^i \; b^{i'} \; {}_{jk} \; C_{i'k}{}^j \; C_{ij}{}^k \qquad (33)$$

$$= \sum_{ii'} b^{i'} \; K_{i'i} \; a^i$$

Le produit scalaire bilinéaire défini en (4) n'est donc autre que la trace du produit $\mathcal{B}\mathcal{A}$:

$$\langle\langle A \,|\, B\rangle\rangle = \mathrm{Tr}\left\{\mathcal{B}\mathcal{A}\right\} = \mathrm{Tr}\left\{\mathcal{A}\mathcal{B}\right\} \qquad (34)$$

En particulier, l'égalité :

$$K_{ij} = \langle\langle X_i \mid X_j \rangle\rangle \, \mathrm{Tr} \left\{ \mathcal{X}_i \, \mathcal{X}_j \right\} \tag{35}$$

peut servir de définition plus naturelle du tenseur K (on part de l'opérateur dans $\mathcal{L}$ adjoint à chaque X_i).

La structure d'algèbre de $\mathcal{L}$ nous a ainsi permis de définir une correspondance entre vecteur $|A\rangle\rangle$ de $\mathcal{L}$ et opérateur $\mathcal{A}$ agissant dans $\mathcal{L}$. Cette correspondance est un homomorphisme : au produit de deux éléments de l'algèbre $\mathcal{L}$ (c'est-à-dire, par définition, au commutateur $|[A,B]\rangle\rangle \in \mathcal{L}$) est associé le commutateur des opérateurs $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$. En effet, si l'on écrit la définition du produit $\mathcal{AB}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{AB}\,X = \mathcal{A}\,(\mathcal{B}\,X) &= [A, \mathcal{B}\,X] \\ &= [A, [B, X]] \end{aligned} \tag{36}$$

et celle du produit $\mathcal{BA}$

$$\mathcal{BA}X = [B, [A, X]] \tag{37}$$

on obtient aisément grâce à l'égalité de Jacobi :

$$\begin{aligned} [\mathcal{A},\mathcal{B}]\,X &= [A, [S, X]] + [B, [A, X]] \\ &= [[A, B], X] \end{aligned} \tag{38}$$

Les matrices $(\mathcal{A})_{ij}$ sont donc telles que leur commutateur est associé au commutateur des opérateurs A correspondants. Une matrice $(\mathcal{A})$ est ainsi associée à chaque opérateur infinitésimal $M(\vec{\delta a})$ du groupe G ; on peut alors par intégration, associer des matrices $(\mathcal{M})$ aux matrices finies $M(\vec{a})$ du groupe. On obtient de cette façon une correspondance qui est une représentation du groupe, appelée "représentation adjointe à l'algèbre $\mathcal{L}$".

C O M P L E M E N T IV-A

DEMONSTRATION COMPLETE DE LA RELATION (IV-102)

Partons de l'égalité (IV-101) :

$$\sum_{\ell} \gamma_{\ell k} \, f_{ij}^{\ell} = \sum_{\ell} \gamma_{i\ell} \, f_{jk}^{\ell} \qquad (1)$$

Nous allons chercher à construire la quantité $\beta_{\ell k} \, C_{ij}^{\ell}$, où

$$\beta_{\ell k} = \gamma_{\ell k} - \gamma_{k\ell}$$

$$C_{ij}^{\ell} = f_{ij}^{\ell} - f_{ji}^{\ell}$$

Ecrivons la relation (1) en permutant les indices i et j :

$$\sum_{\ell} \gamma_{\ell k} \, f_{ji}^{\ell} = \sum_{\ell} \gamma_{j\ell} \, f_{ik}^{\ell} \qquad (2)$$

Intervertissons maintenant i et k dans (1), et écrivons les deux membres de l'égalité dans l'ordre inverse. Il vient :

$$\sum_{\ell} \gamma_{k\ell} \, f_{ji}^{\ell} = \sum_{\ell} \gamma_{\ell i} \, f_{kj}^{\ell} \qquad (3)$$

Cette égalité devient, si l'on permute i et j :

$$\sum_{\ell} \gamma_{k\ell} \, f_{ij}^{\ell} = \sum_{\ell} \gamma_{\ell j} \, f_{ki}^{\ell} \qquad (4)$$

Pour faire apparaître :

$$\beta_{\ell k} \, C_{ij}^{\ell} = (\gamma_{\ell k} - \gamma_{k\ell}) \, (f_{ij}^{\ell} - f_{ji}^{\ell}) \qquad (5)$$

Il faut sommer membre à membre les égalités (1) et (3), puis retrancher (2) et (4). Il vient ainsi :

$$\sum_{\ell} \beta_{\ell k} \; C_{ij}^{\ell} = \sum_{\ell} \left\{ \gamma_{i\ell} f_{jk}^{\ell} + \gamma_{\ell i} \; f_{kj}^{\ell} - \gamma_{j\ell} f_{ik}^{\ell} - \gamma_{\ell j} \; f_{ki}^{\ell} \right\} \qquad (6)$$

Pour faire apparaître $\sum_{\ell} \beta_{i\ell} \; C_{jk}^{\ell}$ au second membre de cette égalité, on ajoute et retranche la quantité $\sum_{\ell} \left\{ \gamma_{\ell i} \; f_{jk}^{\ell} + \gamma_{i\ell} f_{kj}^{\ell} \right\}$. Ce second membre devient alors :

$$\sum_{\ell} (\gamma_{i\ell} - \gamma_{\ell i})(f_{jk}^{\ell} - f_{kj}^{\ell}) + \sum_{\ell} \left\{ \gamma_{\ell i} f_{jk}^{\ell} + \gamma_{i\ell} f_{kj}^{\ell} - \gamma_{j\ell} f_{ik}^{\ell} - \gamma_{\ell j} \; f_{ki}^{\ell} \right\}$$

Or, d'après (1) :

$$\sum_{\ell} \gamma_{\ell i} \; f_{jk}^{\ell} = \sum_{\ell} \gamma_{j\ell} \; f_{ki}^{\ell} \qquad (7)$$

et :

$$\sum_{\ell} \gamma_{i\ell} f_{kj}^{\ell} = \sum_{\ell} \gamma_{\ell j} \; f_{ik}^{\ell} \qquad (8)$$

Donc, l'égalité (6) donne :

$$\sum_{\ell} \beta_{\ell k} \; C_{ij}^{\ell} = \sum_{\ell} (\gamma_{i\ell} - \gamma_{\ell i})(f_{jk}^{\ell} - f_{kj}^{\ell}) + \sum_{\ell} (\gamma_{j\ell} - \gamma_{\ell j})(f_{ki}^{\ell} - f_{ik}^{\ell})$$

$$= \sum_{\ell} \beta_{i\ell} C_{jk}^{\ell} + \sum_{\ell} \beta_{j\ell} \; C_{ki}^{\ell} \qquad (9)$$

Comme $\beta_{i\ell} = -\beta_{\ell i}$ et $\beta_{j\ell} = -\beta_{\ell j}$, l'égalité (IV-102) est démontrée.

C O M P L E M E N T IV-B

RELATIONS DE COMMUTATION ENTRE GENERATEURS INFINITESIMAUX ASSOCIES A DES REPRESENTATIONS PROJECTIVES DES GROUPES DE GALILEE ET DE POINCARE

-:-:-:-:-:-:-:-:-:-:-

Nous avons calculé au §C du Chapitre III les relations de commutation entre opérateurs des algèbres de Lie des groupes de Galilée et de Poincaré. Utilisant les égalités (IV-70) établies au Chapitre suivant, il est simple d'en déduire les relations de commutation entre générateurs infinitésimaux G agissant dans l'espace des états. Cependant, (IV-70) n'est valable que pour une représentation "vraie" (non-projective) et, physiquement, nous avons vu que les représentations projectives sont parfaitement acceptables (pas d'influence d'un facteur de phase globale du vecteur d'état sur les propriétés physiques du système). Il faut donc prendre la relation plus générale (IV-91) où apparaissent au second membre des coefficients :

$$\beta_{ij} = \gamma_{ij} - \gamma_{ji} \qquad (1)$$

dont l'effet est, en quelque sorte, d'étendre l'algèbre de Lie du groupe en lui adjoignant l'opérateur identité 1. Nous avons cependant vu à la fin du Chapitre IV que les β_{ij} ne sont pas quelconques, mais qu'ils doivent satisfaire à la relation [cf. (IV-102)] :

$$\sum_{\ell} \{\beta_{\ell i} \; C_{jk}^{\ell} + \beta_{\ell j} \; C_{ki}^{\ell} + \beta_{\ell k} \; C_{ij}^{\ell}\} = 0 \qquad (2)$$

où les C_{ij}^{k} sont les constantes de structure du groupe. Dans ce complément nous allons montrer qu'une telle relation permet d'éliminer un grand nombre des coefficients β, ou même tous dans certains cas. Nous verrons également comment introduire de façon très générale la notion d'opérateur de spin.

1 - GROUPE DE GALILEE

a - Généralités

Combinant les relations de commutation (III-99), qui donnent les constantes de structure $C_{ij}{}^{k}$, avec (IV-91), nous obtenons :

$$\begin{cases} [J_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} J_{x_k} + i\hbar A_{ij} & (3\text{-a}) \\ [J_{x_i}, P_{x_j}] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} P_{x_k} + i\hbar B_{ij} & (3\text{-b}) \\ [P_{x_i}, P_{x_j}] = i\hbar C_{ij} & (3\text{-c}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} [J_{x_i}, K_{x_j}] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} K_{x_k} + i\hbar N_{ij} & (4\text{-a}) \\ [P_{x_i}, K_{x_j}] = i\hbar M_{ij} & (4\text{-b}) \\ [K_{x_i}, K_{x_j}] = i\hbar Q_{ij} & (4\text{-c}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} [\vec{J}, H] = i\hbar \vec{V} & (5\text{-a}) \\ [\vec{P}, H] = i\hbar \vec{W} & (5\text{-b}) \\ [\vec{K}, H] = -i\hbar \vec{P} + i\hbar \vec{Z} & (5\text{-c}) \end{cases}$$

Dans ces égalités, les opérateurs $\vec{J}$, $\vec{P}$, $\vec{K}$, $-H$ correspondent aux opérateurs infinitésimaux $X_{\vec{J}}$, $X_{\vec{P}}$, $X_{\vec{K}}$ et X_H (*) . Par exemple :

$$X_{\vec{J}} \longleftrightarrow -\frac{i}{\hbar}\vec{J} \qquad (6)$$

(*) La raison pour laquelle c'est l'opérateur opposé à H, et non H lui-même, qui correspond à X_H tient au fait qu'il faut adopter le point de vue de Heisenberg dans l'association $X \Longrightarrow G$ (voir discussion du §1 du Complément V-B).

Les relations (3) et (4) sont écrites en sous-entendant au second membre une sommation sur k des termes en ε_{ijk} (sommation sur l'indice muet répété k) ; cette omission est naturelle du fait que la sommation comprend en fait soit un seul terme non-nul (si $i \neq j$), soit aucun (si $i = j$). Quant aux nombres A_{ij}, B_{ij}, ... et aux vecteurs $\vec{V}$, $\vec{W}$ et $\vec{Z}$, ils traduisent la présence des opérateurs scalaires introduits par le caractère projectif de la représentation. Le fait que $[J_x, J_y] = -[J_y, J_x]$ entraîne que $A_{12} = -A_{21}$; de façon générale, on voit facilement que les coefficients A_{ij} possèdent la propriété d'antisymétrie :

$$A_{ij} = -A_{ji}$$

(en particulier, les A_{ii} sont nuls). Si donc nous définissons un vecteur $\vec{A}$ par ses composantes (*) :

$$\begin{aligned} A_x &= A_{23} = -A_{32} \\ A_y &= A_{31} = -A_{13} \\ A_z &= A_{12} = -A_{21} \end{aligned} \qquad (7)$$

nous pouvons mettre les égalités (3-a) sous la forme :

$$[J_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,(J_{x_k} + A_{x_k}) \qquad (8)$$

On peut alors substituer à $\vec{J}$ l'opérateur $\vec{J}'$ défini par :

$$\vec{J}' = \vec{J} + \vec{A} \qquad (9)$$

ce qui revient à redéfinir $\vec{J}$ en lui ajoutant un opérateur diagonal (proportionnel à 1). Une telle opération ne change évidemment pas les commutateurs des premiers membres des relations (3) à (5), où l'on peut simplement remplacer $\vec{J}$ par $\vec{J}'$; par contre, elle fait disparaître la constante $\vec{A}$ du second membre de (3-a). Dans la suite, nous supposerons que cette redéfinition de $\vec{J}$ a été déjà effectuée ce qui évite d'introduire une nouvelle notation $\vec{J}'$.

On pourrait tenter d'éliminer de façon analogue les coefficients B et N par une simple redéfinition, mais le raisonnement précédent ne s'applique pas (en redéfinissant $\vec{P}$, ou $\vec{K}$, on ne fait disparaître que 3 sur 9 coefficients B ou N). Il nous faut donc recourir à une autre méthode fondée sur l'utilisation de la relation (2).

b - Groupe Eudidien (déplacements)

Commençons par étudier les relations (3) qui donnent les relations de commutation pour une représentation projective du groupe des déplacements géométriques (cf. Chapitre V). On remarque sur la relation (2), où l'on est

---

(*) *Un tenseur du second ordre antisymétrique est équivalent à un vecteur ; cf. Complément VII-A.*

libre de fixer des valeurs quelconques à i, j et k, que la méthode pour y faire apparaître un coefficient $\beta_{m_o p_o}$ est claire : il faut (par exemple) prendre $i = p_o$ et pour j et k deux indices tels que le commutateur des opérateurs associés ait une composante sur celui associé à m_o. Dans la sommation sur ℓ, le coefficient $\beta_{\ell i}$ prend ainsi la valeur cherchée avec un coefficient $C_{jk}^{m_o}$ non nul.

Pour obtenir une relation où intervienne $\beta_{P_x P_y}$, nous choisissons donc :

$$i \longleftrightarrow P_y$$

La seule relation de commutation (3) où $\vec{P}$ apparaisse au second membre est (3-b) ; nous posons donc :

$$j \rightsquigarrow P_z$$

$$k \rightsquigarrow J_y$$

ce qui revient à utiliser le fait que :

$$C_{P_z J_y}^{G} = -1 \quad \text{si} \quad G = P_x$$

$$= 0 \quad \text{pour tout autre G}$$

(G désigne l'un quelconque des opérateurs J_{x_i}, P_{x_j}, etc...). Dans (2), les termes en C_{ki}^{ℓ} font intervenir :

$$C_{J_y P_y}^{G}$$

qui sont nuls [X_{J_y} commute avec X_{P_y}] . Quant à ceux en C_{ij}^{ℓ}, ils sont également nuls puisqu'ils sont proportionnels à

$$C_{P_y P_z}^{G}$$

qui vaut zéro [X_{P_y} commute avec X_{P_z}] Il nous reste donc :

$$\beta_{P_x P_y} = C_{12} = 0 \qquad (10)$$

Par permutation circulaire des indices x, y et z, on voit ainsi que tous les C sont nuls.

Pour éliminer les constantes B_{ij} $(i \neq j)$, choisissons :

$$i \rightsquigarrow P_y$$

$$j \rightsquigarrow J_y$$

$$k \rightsquigarrow J_z$$

Comme :

$$C_{J_y J_z}^{G} = \begin{cases} 1 & \text{si } G = J_x \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$C_{J_z P_y}^{G} = \begin{cases} -1 & \text{si } G = P_x \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$C_{P_y J_y}^{G} = 0$$

il vient :

$$\beta_{J_x P_y} - \beta_{P_x J_y} = 0 \qquad (11\text{-a})$$

c'est-à-dire :

$$B_{12} = -B_{21} \qquad (11\text{-b})$$

On montre de même que tous les éléments non-diagonaux B sont antisymétriques. Une redéfinition de $\vec{P}$ analogue à celle de $\vec{J}$ permet alors d'éliminer tous les N_{ij} lorsque $i \neq j$.

Cherchons maintenant à éliminer les dernières constantes qui subsistent dans les équations (3), à savoir B_{ij}. Pour cela, choisissons la correspondance :

$i \rightsquigarrow J_x$
$j \rightsquigarrow J_y$
$k \rightsquigarrow P_z$

Comme :

$$C_{J_y P_z}^{G} = \begin{cases} 1 & \text{si } G = P_x \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$C_{P_z J_x}^{G} = \begin{cases} 1 & \text{si } G = P_y \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$C_{J_x J_y}^{G} = \begin{cases} 1 & \text{si } G = J_z \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

il vient :

$$\beta_{P_x J_x} + \beta_{P_y J_y} + \beta_{J_z P_z} = \beta_{P_x J_x} + \beta_{P_y J_y} - \beta_{P_z J_z} = 0 \qquad (12\text{.a})$$

Par permutation circulaire des indices x, y et z, on obtient de même :

$$\beta_{P_y J_y} + \beta_{P_z J_z} - \beta_{P_x J_x} = 0 \qquad (12\text{-b})$$

$$\beta_{P_z J_z} + \beta_{P_x J_x} - \beta_{P_y J_y} = 0 \qquad (12\text{-c})$$

Les trois équations linéaires (12) imposent aux $\beta_{P_i J_i}$ d'être nuls. Tous les opérateurs constants ont alors disparu des équations (3).

Nous voyons donc que, pour le groupe des déplacements géométriques, et moyennant une redéfinition éventuelle de $\vec{P}$ et $\vec{J}$ (addition de constantes), toute représentation projective se ramène à une "vraie" représentation.

c - Simplification maximale des relations de commutation

Continuons le même type de calcul pour les autres relations de commutation et, en premier lieu, débarrassons-nous des N_{ij} pour $i \neq J$. Posons pour cela :

$$\begin{cases} i \leftrightsquigarrow K_x \\ j \leftrightsquigarrow J_z \\ k \leftrightsquigarrow J_x \end{cases}$$

le fait que :

$$C_{J_z J_x}^{J_y} = +1$$

$$C_{J_x K_x}^{G} = 0$$

$$C_{J_z K_x}^{K_y} = -1$$

entraîne que :

$$\beta_{J_y K_x} - \beta_{K_y J_x} = 0$$

c'est-à-dire :

$$N_{12} = -N_{21}$$

Une redéfinition adéquate de $\vec{K}$, analogue à celle de $\vec{J}$ et $\vec{P}$, nous permet donc d'annuler les N_{ij} pour $i \neq j$.

Choisissons maintenant :

$$i \longleftrightarrow H$$

$$j \longleftrightarrow J_x$$

$$k \longleftrightarrow J_y$$

de façon à utiliser le fait que :

$$C_{J_y\, J_x}^{\;\;G} \qquad \begin{cases} 1 & \text{si } G = J_z \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Comme par ailleurs, parmi les trois opérateurs X_H, X_{J_x} et X_{J_y} les deux seuls qui ne commutent pas sont X_{J_x} et X_{J_y}, la relation (2) nous donne alors :

$$\beta_{J_z\, H} = V_z = 0 \qquad (13)$$

Donc $\vec{V}$ est nécessairement nul. Intuitivement, ceci se comprend bien car l'invariance par rotation serait violée par un choix de la direction de $\vec{V}$, nécessairement arbitraire. De façon analogue, le choix :

$$i \longleftrightarrow H$$

$$j \longleftrightarrow J_x$$

$$k \longleftrightarrow P_y$$

donne :

$$\beta_{P_z\, H} = W_z = 0 \qquad (14)$$

et $\vec{W}$ disparait donc pour les mêmes raisons que $\vec{V}$. Enfin, si l'on pose :

$$i \longleftrightarrow H$$

$$j \longleftrightarrow J_x$$

$$k \longleftrightarrow K_y$$

On obtient :

$$\beta_{K_z H}\, C_{J_x\, K_y}^{\;\;\;K_z} + \beta_{P_y\, J_x}\, C_{K_y\, H}^{\;\;\;P_y} = \beta_{K_z H} + \beta_{P_y\, J_x} = 0 \qquad (15)$$

Mais comme nous avons éliminé les $\beta_{P_y J_x}$ par une redéfinition de $\vec{P}$, il s'ensuit que :

$$\beta_{H K_z} = - Z_z = 0 \qquad (16)$$

Il ne reste maintenant qu'à examiner les relations (4-a), (4-b) et (4-c). Commençons par la dernière en posant :

$$i \longleftrightarrow K_x$$
$$j \longleftrightarrow J_x$$
$$k \longleftrightarrow K_z$$

Comme X_{K_z} et X_{K_x} commutent, ainsi que X_{K_x} et X_{J_x}, il vient :

$$\beta_{K_y K_x} = Q_{21} = 0 \qquad (17)$$

Par permutation circulaire de x, y et z, et comme K_x commute évidemment avec lui-même, les constantes Q sont ainsi éliminées.

En ce qui concerne (4-a), une redéfinition de $\vec{K}$ du même type que celle de $\vec{P}$ et $\vec{J}$ a permis d'éliminer tous les opérateurs constants N_{ij} lorsque $i \neq j$. Si nous posons dans (2) :

$$i \longleftrightarrow K_z$$
$$j \longleftrightarrow J_x$$
$$k \longleftrightarrow J_y$$

nous obtenons :

$$\beta_{J_z K_z} + \beta_{K_x J_x} + \beta_{K_y J_y} = - \beta_{K_z J_z} + \beta_{K_x J_x} + \beta_{K_y J_y} = 0 \qquad (18)$$

De façon analogue à (12), nous démontrons ainsi la nullité des coefficients N_{ii}.

Nous avons gardé la relation (4-b) pour la fin car, comme nous allons le voir, toutes les constantes M ne disparaissent pas. Celle d'entre elles qui concernent deux indices différents sont bien nulles ; par exemple, le choix :

$$i \longleftrightarrow P_x$$
$$j \longleftrightarrow J_x$$
$$k \longleftrightarrow K_z$$

donne :

$$\beta_{K_y P_x} = - M_{21} = 0 \qquad (19)$$

Mais si nous essayons d'appliquer la même méthode en prenant :

$$i \longleftrightarrow P_x$$
$$j \longleftrightarrow J_y$$
$$k \longleftrightarrow K_z$$

nous obtenons, (comme ni le commutateur de X_{J_y} et X_{K_z}, ni celui de X_{P_x} et X_{J_y} ne sont nuls) :

$$\beta_{K_x P_x} + \beta_{P_z K_z} = 0 \qquad (20)$$

Donc (par permutation circulaire) :

$$M_{xx} = M_{yy} = M_{zz} = M \qquad (21)$$

Les axes x, y et z étant équivalents, il n'est pas surprenant que ces trois valeurs soient égales. Par contre, il n'est pas possible de démontrer la nullité de M dans le cas général.

Remarque :

Ce résultat n'est pas étonnant : nous avons déjà vu que $\vec{K}$ est lié à la position du centre de masse du système quantique étudié. Or nous savons que, pour une particule sans spin par exemple

$$[X_i , P_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

qui correspond bien à :

$$M_{ij} \propto \delta_{ij}$$

Dans le §C du Chapitre IV on étudie l'espace des états d'une particule et l'on obtient une représentation projective du groupe de Galilée qui n'est pas équivalente à une "vraie" représentation (si la masse de la particule n'est pas nulle).

d - Algèbre de Lie après extension ; masse, énergie interne et spin

Réécrivons les relations de commutation obtenues :

$$[\ J_{x_i}\ ,\ J_{x_j}\ ] = i\hbar\ \varepsilon_{ijk}\ J_{x_k} \qquad (22\text{-a})$$

$$[\ J_{x_i}\ ,\ P_{x_j}\ ] = i\hbar\ \varepsilon_{ijk}\ P_{x_k} \qquad (22\text{-b})$$

$$[\ P_{x_i}\ ,\ P_{x_j}\ ] = 0 \qquad (22\text{-c})$$

$$[\ J_{x_i}\ ,\ K_{x_j}\ ] = i\hbar\ \varepsilon_{ijk}\ K_{x_k} \qquad (23\text{-a})$$

$$[\ P_{x_i}\ ,\ K_{x_j}\ ] = i\hbar\ M\ \delta_{ij} \qquad (23\text{-b})$$

$$[\ K_{x_i}\ ,\ K_{x_j}\ ] = 0 \qquad (23\text{-c})$$

$$[\ H\ ,\ \vec{J}\ ] = [\ H\ ,\ \vec{P}\ ] = 0 \qquad (24\text{-a,b})$$

$$[\ H\ ,\ \vec{K}\ ] = i\hbar\ \vec{P} \qquad (24\text{-c})$$

Ce sont après extension, les relations de commutation de l'algèbre de Lie du groupe de Galilée. Les égalités (22-a), (22-b) et (23-a) expriment que $\vec{J}$, $\vec{P}$ et $\vec{K}$ sont des opérateurs vectoriels (cf. Chapitre VII) ; H est scalaire (invariant par rotation) d'après (24-a), et (24-b) indique que c'est un opérateur invariant par translation.

Cherchons à construire des opérateurs qui commutent avec tous les opérateurs $\vec{J}$, $\vec{P}$, $\vec{K}$ et H. En premier lieu, nous avons bien sûr l'opérateur $M = m \times \mathbb{1}$, que nous identifions avec la <u>masse totale</u> du système. Introduisons ensuite l'opérateur :

$$\vec{P}^2 = P_x^{\,2} + P_y^{\,2} + P_z^{\,2} \qquad (25)$$

Il commute avec $\vec{P}$ [cf. (22-c)] et avec $\vec{J}$ puisque P_x^2 commute avec J_x et que :

$$[\ P_y^2\ ,\ J_x\ ] = P_y [\ P_y\ ,\ J_x\ ] + [\ P_y\ ,\ J_x\ ]\ P_y$$

$$= - i\hbar\ (P_y\ P_z + P_z\ P_y)$$

et que :

$$[\ P_z^2\ ,\ J_x\ ] = P_z [\ P_z\ ,\ J_x\ ] + [\ P_z\ ,\ J_x\ ]\ P_z$$

$$= i\hbar\ (P_z\ P_y + P_y\ P_z)$$

Son commutateur avec H est également nul d'après (24-b). Enfin, compte tenu de (23-b) :

$$[\ P_x^2\ ,\ K_x\ ] = P_x [\ P_x\ ,\ K_x\ ] + [P_x\ ,\ K_x\ ]\ P_x$$

$$= 2\ M\ i\hbar\ P_x \qquad (26)$$

D'autre part, l'opérateur H commute aussi avec $\vec{J}$, $\vec{P}$, bien sûr lui-même, mais pas avec $\vec{K}$. D'après (24-c) et (26), pour construire un opérateur commutant avec tous les autres, il suffit de poser :

$$U = H - \frac{\vec{P}^2}{2M} \qquad (27)$$

La signification physique de l'équation :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + U \qquad (28)$$

est très claire : la constante M étant la masse totale du système, $\vec{P}^2/2M$ s'identifie à son énergie de translation globale, et U à son <u>énergie interne</u>. Il est satisfaisant que, ni H , ni l'énergie cinétique $\vec{P}^2/2M$ ne soient les mêmes dans deux référentiels galiléens, mais que leur différence soit un invariant (énergie de rotation d'un solide sur lui-même pour prendre un exemple en mécanique classique). Les repères dans lesquels le système a une énergie minimale sont ceux où l'impulsion $\vec{P}$ est nulle.

Pour trouver un autre invariant, introduisons l'opérateur $\vec{L}$ (opérateur à trois composantes) par :

$$\vec{L} = (\vec{P} \times \vec{K}) / M \tag{29}$$

Les relations de commutation entre composantes de $\vec{L}$ sont données par :

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= M^{-2} \; [K_y P_z - K_z P_y, K_z P_x - K_x P_z] \\ &= M^{-2} \; [K_y P_z, K_z P_x] + M^{-2} [K_z P_y, K_x P_z] \\ &= \frac{ih}{M} K_y P_x - \frac{ih}{M} P_y K_x \\ &= ih \, L_z \end{aligned} \tag{30}$$

[On a utilisé (23-b), (22-c) et (23-c)]. L'opérateur jouit donc, en ce qui concerne ses relations d'autocommutation, des mêmes propriétés que $\vec{J}$ lui-même. Le même type de calcul donne :

$$\begin{aligned}[L_x, J_x] &= P_y [K_z, J_x] + [P_y, J_x] K_z - P_z [K_y, J_x] - [P_z, J_x] K_y \\ &= 0 \end{aligned} \tag{31-a}$$

et :

$$\begin{aligned}[L_x, J_y] &= \frac{1}{M} P_y [K_z, J_y] + \frac{1}{M} [P_y, J_y] K_z - \frac{1}{M} P_z [K_y, J_y] \\ &\quad - \frac{1}{M} [P_z, J_y] K_y \\ &= \frac{ih}{M} (P_x K_y - P_y K_x) \end{aligned} \tag{31-b}$$

Donc, nous obtenons :

$$[J_{x_i}, L_{x_j}] = ih \, \varepsilon_{ijk} L_{x_k} \tag{31-c}$$

qui est très analogue à (22-a). Il vient aussi :

$$\begin{aligned}[L_x, K_x] &= \frac{1}{M} [P_y K_z - P_z K_y, K_x] = 0 \\ [L_x, K_y] &= \frac{1}{M} [P_y K_z, K_y] = ih \, K_z \end{aligned} \tag{32}$$

de sorte que :

$$[K_{x_i}, L_{x_j}] = ih \, \varepsilon_{ijk} \, K_{x_k} \tag{33}$$

qui est l'analogue de (23-a). De la même façon, on trouve :

$$[L_{x_i}, P_{x_j}] = i\hbar \varepsilon_{ijk} P_{x_k} \qquad (34)$$

[semblable à (22-b)] et, enfin :

$$[L_x, H] = \frac{1}{M} [P_y, H] K_z + \frac{1}{M} P_y [K_z, H] - \frac{1}{M} [P_z, H] K_y - \frac{1}{M} P_z [K_y, H]$$

$$= \frac{i\hbar}{M} (P_z P_y - P_y P_z) = 0$$

Les opérateurs $\vec{L}$ et $\vec{J}$ sont donc de natures assez semblables ; ils ne commutent pas avec leurs propres composantes, avec $\vec{P}$ et $\vec{K}$, mais commutent avec H.
A partir de $\vec{L}$ et $\vec{J}$, il est facile de construire un opérateur $\vec{S}$ qui commute avec $\vec{P}$, $\vec{K}$ et H ; on utilise pour cela le fait que les seconds membres de (22-b) et (34) d'une part, de (23-a) et (33) d'autre part sont identiques, pour poser :

$$\vec{S} = \vec{J} - \vec{L} \qquad (35)$$

On voit que :

$$[\vec{S}, \vec{P}] = [\vec{S}, \vec{K}] = [\vec{S}, H] = 0 \qquad (36)$$

Cependant :

$$[S_{x_i}, J_{x_j}] = [J_{x_i} - L_{x_i}, J_{x_j}]$$

$$= i\hbar \varepsilon_{ijk} (J_{x_k} - L_{x_k})$$

$$= i\hbar \varepsilon_{ijk} S_{x_k} \qquad (37)$$

De même :

$$[S_{x_i}, S_{x_j}] = [J_{x_i} - L_{x_i}, J_{x_j} - L_{x_j}]$$

$$= i\hbar \varepsilon_{ijk} (J_{x_k} - L_{x_k} - L_{x_k} + L_{x_k}]$$

$$= i\hbar \varepsilon_{ijk} S_{x_k} \qquad (38)$$

Par ses relations d'autocommutation, $\vec{S}$ est donc un opérateur de même nature que $\vec{J}$ ou $\vec{L}$ (moment angulaire).

Enfin, on a :

$$[\vec{S}, \vec{L}] = 0 \tag{39}$$

[puisque $\vec{L} = \vec{K} \times \vec{P}$ et que $\vec{S}$ commute avec $\vec{K}$ et $\vec{P}$] et :

$$[\vec{S}, H] = 0 \tag{40}$$

[puisque H commute avec $\vec{J}$ et $\vec{L}$] . Excepté $\vec{J}$, l'opérateur $\vec{S}$ commute donc avec tous les autres opérateurs de l'algèbre de Lie, mais ce n'est pas le cas de composantes différentes de $\vec{S}$ entre elles. Le moment cinétique $\vec{J}$ du système apparaît donc comme la somme $\vec{L} + \vec{S}$ de deux contributions dont la seconde n'est affectée ni par une translation, ni par un changement de repère galiléen (transformation de Galilée pure). On identifie donc $\vec{S}$ au moment cinétique interne, ou spin du système physique ; l'opérateur $\vec{L}$ correspond alors au moment cinétique orbital associé au mouvement du centre de masse.

A ce stade, on peut construire l'opérateur de moment cinétique de spin $\vec{S}^2$

$$\vec{S}^2 = S_x^{\,2} + S_y^{\,2} + S_z^{\,2} \tag{41}$$

Un calcul élémentaire montre que $\vec{S}^2$ commute avec tous les opérateurs introduits jusqu'ici ($\vec{P}$, $\vec{J}$, $\vec{K}$, $\vec{L}$, $\vec{S}$ et H). En tout, nous avons ainsi trouvé trois opérateurs :

$$M, \quad U, \quad \vec{S}^2 \tag{42}$$

Pour toute représentation (projective) irréductible du groupe de Galilée, ces opérateurs sont des operateurs diagonaux dont tous les éléments sont égaux : dans le cas contraire, l'espace de représentation serait la somme directe de sous-espaces associés à des valeurs propres différentes et aucune transformation du groupe de Galilée n'aurait d'élément de matrice entre sous-espaces distincts ; la représentation serait donc réductible.

Il est naturel de postuler (Wigner) que, si le système considéré est une particule élémentaire, la structure de sous-espace des états est aussi simple que possible et donne une représentation irréductible du groupe de symétries considérées (sinon, l'espace des états serait la somme directe de deux sous-espaces plus simples). Ainsi, nous voyons que la masse,

l'énergie interne et le spin d'une particule élémentaire constituent des propriétés fondamentales de la particule (elles ne dépendent pas du référentiel qui sert à les observer). Dans l'espace des états, les trois composantes de $\vec{P}$, l'énergie H et une composante S_z de $\vec{S}$ forment un ensemble d'opérateurs qui commutent et possèdent donc une base commune de vecteurs propres. On peut souligner la généralité du raisonnement qui nous a conduits à ces conclusions et le fait qu'à aucun instant nous ne nous soyons partis de notions classiques (point matériel, Lagrangien ou Hamiltonien classiques, règles de quantification canoniques, etc.). Une approche classique ne nous aurait sans doute pas conduits à attribuer un spin à une particule élémentaire : en mécanique classique, le moment cinétique interne n'existe que pour un système composé de plusieurs points matériels, c'est-à-dire un système composé d'autres sytèmes plus élémentaires (on sait d'ailleurs bien que le spin demi-entier de l'électron n'a pas d'analogue classique). En plus d'hypothèses générales sur l'existence d'un espace vectoriel des états (principe de superposition, etc.), nous n'avons postulé que des propriétés concernant l'espace-temps. La structure du groupe de transformations introduites reflète en réalité non pas des propriétés de transformation du système étudié lui-même (supposé "passif" dans un changement de repère) mais la façon dont nous concevons des changements de repère et d'horloge macroscopiques et leur composition.

Remarques

(i) - Nous n'avons pas introduit jusqu'ici l'opérateur position $\vec{R}$ du système . Il est clair sur la définition (29) que nous sommes conduits à poser :

$$\vec{R} = - \frac{\vec{K}}{M} \tag{43}$$

Alors, les relations (23-b) ne sont autres que les relations de commutation canoniques :

$$[R_{x_i}, P_{x_j}] = i\hbar \delta_{ij} \tag{44}$$

Cette relation exprime que, lors d'une opérations de translation infinitésimale d'un vecteur $\delta\vec{\ell}$ effectuée sur un système physique, sa position varie d'une quantité $\delta\vec{\ell}$ [cf. complément V-B] , ce qui est physiquement satisfaisant.

Si maintenant nous appliquons les raisonnements précédents à la recherche des

représentations non-projectives du groupe de Galilée, il suffit de faire M = 0 dans toutes les égalités obtenues. Dans ces conditions, l'opérateur $\vec{R}$ n'est plus défini (cf. (43)) et les relations canoniques (44) ne peuvent plus être écrites (*). On voit combien il est important de ne pas éliminer les représentations projectives du groupe de Galilée si l'on veut arriver à des résultats physiquement satisfaisants.

(ii) - Nous avons vu qu'une représentation (projective) unitaire irréductible du groupe de Galilée est associée à des valeurs données de M,U et S, qui sont interprétés comme des propriétés fondamentales d'une particule élémentaire. Nous n'avons pas cherché à savoir si cette liste est complète, ou, au contraire, s'il existe d'autres invariants fondamentaux à ajouter aux précédents. En d'autres termes, M,U et S suffisent-ils à caractériser toutes les représentations (projectives) unitaires irréductibles, du groupe de Galilée, ou faut-il leur adjoindre d'autres opérateurs qui commutent également avec tous les éléments de son algèbre de Lie ? Nous allons montrer ici que la donnée de M, U et S est effectivement suffisante.

Soit $\mathcal{E}$ l'espace vectoriel de représentation (espace des états de la particule). Les composantes de l'opérateur $\vec{P}$ commutant entre elles, on peut introduire les sous-espaces $\mathcal{E}_{\vec{p}}$, engendrés par les vecteurs propres communs aux trois composantes de $\vec{P}$ de valeurs propres p_x, p_y et p_z (composantes de $\vec{p}$). L'un de ces sous-espaces, $\mathcal{E}_{\vec{p}=0}$, est associé à la valeur propre $\vec{p} = 0$.

(*) Si M = 0, il vient $[\vec{P}, \vec{K}] = 0$, les relations $[\vec{P}, H] = 0$ et $[\vec{K}, H] = i\hbar \vec{P}$ restant inchangées. Considérons un vecteur propre commun à $\vec{P}$ et H, de valeurs propres $\vec{p}$ et E :

$$\vec{P}|\phi\rangle = \vec{p}|\phi\rangle$$
$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

Le ket :

$$|\chi\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\ \overrightarrow{\delta v_o}.\vec{K}\right)|\phi\rangle$$

est un vecteur propre de même valeur propre $\vec{p}$ pour $\vec{P}$, mais de valeur propre $E - \overrightarrow{\delta v_o}.\vec{p}$ pour H. Donc, pour les représentations projectives (M = 0), le spectre de H n'est borné ni inférieurement ni supérieurement, ce qui n'est pas non plus physiquement satisfaisant.

D'autre part, nous avons vu en (29) et (35) que :

$$\vec{J} = -\frac{1}{M}\ \vec{K} \times \vec{P} + \vec{S}$$

[d'après (23-b) on a $\vec{K} \times \vec{P} = -\vec{P} \times \vec{K}$]. Par suite, dans le sous-espace $\mathcal{E}_{\vec{p}=\vec{0}}$, l'opérateur $\vec{J}$ se réduit à $\vec{S}$. Ce dernier opérateur commutant avec $\vec{P}$, il est clair que $\mathcal{E}_{\vec{p}=\vec{0}}$ reste stable sous l'action de toute composante de $\vec{J}$. Il s'ensuit que, dans ce sous-espace, l'action de l'opérateur $\vec{J}$ ou $\vec{S}$ fournit une représentation (éventuellement projective) du groupe des rotations $R_{(3)}$. Il n'est pas évident a priori que cette représentation soit irréductible, le groupe $R_{(3)}$ n'étant qu'un sous-groupe du groupe de Galilée. Nous savons a priori seulement que $\mathcal{E}_{\vec{p}=\vec{0}}$ peut être décomposé comme une somme directe de sous-espaces $\mathcal{E}_{\vec{p}=\vec{0}}$ associés chacun à une représentation irréductible:

$$\mathcal{E}_{\vec{p}=\vec{0}} = \mathcal{E}^{\alpha}_{\vec{p}=0} \oplus \mathcal{E}^{\beta}_{\vec{p}=0} \oplus \ldots \oplus \mathcal{E}^{\mu}_{\vec{p}=0} \oplus \ldots$$

Nous allons montrer que cette somme se limite en fait à un terme pour une représentation irréductible du groupe de Galilée, c'est-à-dire que la représentation de $R_{(3)}$ dans $\mathcal{E}_{\vec{p}=\vec{0}}$ est, elle aussi, irréductible.

Avant d'aller plus loin, donnons certaines propriétés des $\mathcal{E}^{\mu}_{\vec{p}=0}$, qui sont démontrées dans le Chapitre VI. Chaque sous-espace $\mathcal{E}^{\mu}_{\vec{p}=0}$ est de dimension (2S+1), où S est un nombre entier ou demi entier, et peut être engendré par les vecteurs propres communs à $\vec{S}^2$, de valeur propre $S(S+1)\,\hbar^2$, et S_z, de valeur propre $m_S\ \hbar$:

$$|\mu\ ,\ \vec{p} = 0,\ m_S\rangle \qquad m_S = S,\ S-1,\ S-2,\ \ldots\ -S+1,\ -S$$

Introduisons maintenant l'opérateur unitaire :

$$S(\vec{\lambda}) = e^{-i\,\vec{\lambda}\ .\ \vec{K}\ /\ M\hbar}$$

où la notation $\vec{\lambda}$ symbolise l'ensemble de trois paramètres, les composantes du vecteur $\vec{\lambda}$. On montre alors facilement [nous ne donnons pas le détail des démonstrations qui sont analogues à celles du Complément E_{II} de la référence (13)] que :

$$[\vec{P}\ ,\ S(\vec{\lambda})\ ] = \vec{\lambda}\ S(\vec{\lambda})$$

relation qui entraîne que l'action de $S(\vec{\lambda})$ sur tout vecteur propre de $\vec{P}$ de valeur propre $\vec{p}$ donne un autre vecteur propre de valeur propre $\vec{p} + \vec{\lambda}$.

Considérons donc l'ensemble des vecteurs $|\alpha, \vec{p}, m_s>$ définis par :

$$|\alpha, \vec{p}, m_s> = S(\vec{\lambda} = \vec{p}) \, |\alpha, \vec{p}=0, m_s>$$

Il est clair que $|\alpha, \vec{p}, m_s>$ est vecteur propre commun à $\vec{P}$ et S_z, de valeurs propres respectives $\vec{p}$ et $m_s\hbar$. L'ensemble des vecteurs $|\alpha, \vec{p}, m_s>$ engendre un sous-espace $\mathcal{E}^\alpha$ de $\mathcal{E}$, dont nous allons montrer qu'il n'est autre que $\mathcal{E}$ lui-même.

En premier lieu, il est clair que $\mathcal{E}^\alpha$ est invariant sous l'action de $\vec{P}$, cette dernière ne dépendant d'ailleurs pas de l'indice α :

$$< \alpha , \vec{p}, m_s \mid \vec{P} \mid \alpha , \vec{p}', m'_s > = \delta_{m_s m'_s} \, \delta(\vec{p} - \vec{p}') \, \vec{p}$$

Utilisant les résultats du Complément E_{II}, nous voyons que tout ket $|\psi>$ de $\mathcal{E}^\alpha$ s'écrivant :

$$|\psi> = \int d^3 p \sum_{m_s} \bar{\psi}_{m_s}(\vec{p}) \, |\alpha, \vec{p}, m_s>$$

devient, par l'action de $\vec{K}$

$$\vec{K} \, |\psi> = \int d^3 p \sum_{m_s} [\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{p}} \, \bar{\psi}_{m_s}(\vec{p})] \, |\alpha \; \vec{p}, m_s>$$

Le sous-espace $\mathcal{E}^\alpha$ est donc globalement invariant sous l'action de $\vec{K}$, où l'indice α ne joue aucun rôle. Par suite, $\mathcal{E}^\alpha$ est également invariant sous l'action de :

$$\vec{L} = -\frac{1}{M} \vec{K} \times \vec{P}$$

En ce qui concerne $\vec{S}$, il commute avec $\vec{P}$ et son action sur les $|\alpha, \vec{p}, m_s>$ ne dépend que de m_s. L'espace $\mathcal{E}^\alpha$ est donc invariant globalement sous l'action de :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Le dernier générateur infinitésimal que nous n'avons pas considéré est H. Comme :

$$H = U + \frac{\vec{P}^2}{2M}$$

(où U est une constante, l'énergie interne), il est clair que $\mathcal{E}^{\alpha}$ est stable sous l'action de tous les générateurs infinitésimaux.

De façon analogue, l'action des opérateurs unitaires $S(\vec{\lambda})$ sur les sous-espaces $\mathcal{E}^{\beta}_{(\vec{p}=0)}$, ... $\mathcal{E}^{\mu}_{(\vec{p}=0)}$ ... conduira à des sous-espaces $\mathcal{E}^{\beta}$,... $\mathcal{E}^{\mu}$, globalement invariants sous l'action des opérateurs associés au groupe de Galilée. La représentation ne sera donc irréductible (et la particule réellement élémentaire) que si μ ne peut prendre qu'une seule valeur, la valeur α. Mais comme l'indice α ne joue aucun rôle pour donner l'action des opérateurs $\vec{P}$, $\vec{J}$, $\vec{K}$ et H, cet indice peut être totalement supprimé. La représentation est alors entièrement définie par la donnée de M, S et U, comme annoncé.

2 - GROUPE DE POINCARE

Pour étudier les représentations projectives du groupe de Poincaré (groupe des transformations d'espace-temps en relativité d'Einstein), il nous faut partir des relations de commutation écrites en (III-105) et (III-107) pour les opérateurs X_G. Grâce à (IV-91), nous obtenons leur image dans l'algèbre des opérateurs infinitésimaux agissant dans l'espace des états sous la forme :

$$\begin{cases} [J_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, J_{x_k} + i\hbar\, A_{ij} & (45\text{-a}) \\ [J_{x_i}, P_{x_j}] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, P_{x_k} + i\hbar\, B_{ij} & (45\text{-b}) \\ [P_{x_i}, P_{x_j}] = i\hbar\, C_{ij} & (45\text{-c}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} [K_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} K_{x_k} + i\hbar N_{ij} & (46\text{-a}) \\ [K_{x_i}, P_{x_j}] = -\frac{i\hbar}{c^2}\, \delta_{ij} H + i\hbar M_{ij} & (46\text{-b}) \\ [K_{x_i}, K_{x_j}] = -\frac{i\hbar}{c^2}\, \varepsilon_{ijk} J_{x_k} + i\hbar Q_{ij} & (46\text{-c}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} [\vec{J}, H] = i\hbar \vec{V} & (47\text{-a}) \\ [\vec{P}, H] = i\hbar \vec{W} & (47\text{-b}) \\ [\vec{K}, H] = -i\hbar \vec{P} + i\hbar \vec{Z} & (47\text{-c}) \end{cases}$$

Ces relations sont les mêmes que celles écrites en (3), (4) et (5) pour le groupe de Galilée (*), sauf (47-b) et (47-c) qui concernent les commutateurs de $\vec{K}$ et $\vec{P}$ ou de $\vec{K}$ avec lui-même. Les termes nouveaux sont aisément reconnaissables au coefficient $1/c^2$ qu'ils contiennent (ils tendent vers zéro si $c \to \infty$).

a - Elimination des opérateurs diagonaux

Comme au § 1, nous allons chercher à éliminer au maximum les opérateurs diagonaux des seconds membres de (45), (46) et (47), de façon à ramener la projection à être "aussi peu projective que possible". De fait, dans le cas qui nous occupe, nous allons voir qu'on peut faire disparaître tous les opérateurs diagonaux sans exception, contrairement à ce qui se produit pour le groupe de Galilée.

Les relations (45), qui concernent le groupe euclidien des déplacements, étant identiques à (3), on peut faire disparaître les A, B et C exactement comme au §1 (grâce en particulier à une redéfinition de $\vec{P}$ et $\vec{J}$). D'ailleurs, chaque fois que le choix des opérateurs associés à i et j dans le §1 ne fait apparaître ni 2 opérateurs K ni un opérateur K et un

---

(*) Ici aussi, $X_H \Rightarrow -H$, ce qui explique le signe moins aux deuxièmes membres de (47-c) et (46-b).

opérateur P, le résultat du raisonnement est le même pour le groupe de Poincaré. On voit ainsi que $\vec{V}$, $\vec{W}$, $\vec{Z}$ et les N_{ij} sont nécessairement nuls. En ce qui concerne l'élimination des Q, effectuée en (17) grâce au choix

$$i \longleftrightarrow K_x$$

$$j \longleftrightarrow J_x$$

$$k \longleftrightarrow K_z$$

nous obtenons ici, puisque X_{K_x} et X_{K_y} ne commutent plus :

$$\beta_{K_y K_x} C_{J_x K_z}^{K_y} + \beta_{J_y J_x} C_{K_z K_x}^{J_y}$$

$$= -\beta_{K_y K_x} - \frac{1}{c^2}\beta_{J_y J_x} = 0$$

Mais, comme nous avons annulé $\beta_{J_y J_x}$ par une redéfinition de $\vec{J}$, nous obtenons ici aussi :

$$\beta_{K_y K_x} = Q_{21} = 0$$

de sorte que les coefficients Q sont nuls.

Les raisonnements qui nous ont conduits à (19) et (20) restent les mêmes : pour obtenir (20), nous avons bien pris pour les opérateurs associés à i, j et k un opérateur P et un opérateur K, mais ce sont deux composantes différentes et toutes constantes de structure $C_{K_z P_x}^{G}$ sont nulles. A ce stade, tous les opérateurs diagonaux ont été éliminés, sauf(*) :

$$M_{xx} = M_{yy} = M_{zz} = \tilde{M}$$

C'est ici qu'apparaît une grande différence entre le groupe de Galilée et celui de Poincaré ; la présence de l'opérateur H au second membre de (46-b) permet de faire disparaître l'opérateur $\tilde{M}$ en posant :

$$H' = H + \tilde{M}c^2 \qquad (48)$$

Grâce à cette redéfinition de l'opérateur énergie, associé aux

---

(*) Nous prenons la notation $\tilde{M}$ pour éviter toute confusion avec l'opérateur de masse M qui sera défini plus bas [relation (56)].

translations dans le temps, la représentation projective a donc été ramenée à une "vraie" représentation. La relation (48) nous montre le lien profond qui existe entre la notion de masse en relativité de Galilée et celle d'énergie en relativité d'Einstein. Dans la suite, nous ne distinguerons plus H' de H.

Pour finir, les relations de commutation obtenues sont :

$$\begin{cases} [J_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar\ \varepsilon_{ijk}\ J_{x_k} \\ [J_{x_i}, P_{x_j}] = i\hbar\ \varepsilon_{ijk}\ P_{x_k} \\ [P_{x_i}, P_{x_k}] = 0 \end{cases} \tag{49}$$

$$\begin{cases} [K_{x_i}, J_{x_j}] = i\hbar\ \varepsilon_{ijk}\ K_{x_k} \\ [K_{x_i}, P_{x_j}] = -\frac{i\hbar}{c^2}\ \delta_{ij}\ H \\ [K_{x_i}, K_{x_j}] = -\frac{i\hbar}{c^2}\ \varepsilon_{ijk}\ J_{x_k} \end{cases} \tag{50}$$

$$\begin{cases} [H, \vec{J}] = [H, \vec{P}] = 0 \\ [H, \vec{K}] = i\hbar\ \vec{P} \end{cases} \tag{51}$$

b - La masse, l'énergie et le spin

(i) Introduction de l'opérateur M

Aucun opérateur M n'apparait au second membre des relations de commutation (49), (50), (51). Il ne faut pas en conclure que le passage du groupe de Galilée à celui de Poincaré fait disparaître la notion de masse. Pour l'introduire définissons, comme pour le groupe de Galilée, l'opérateur :

$$\vec{p}^2 = P_x^{\,2} + P_y^{\,2} + P_z^{\,2} \tag{52}$$

La structure du sous-groupe des déplacements étant la même pour les deux groupes, on a encore :

$$[\vec{p}^2, \vec{J}] = [\vec{p}^2, \vec{P}] = 0 \tag{53}$$

De même, on voit facilement sur (51) que

$$[\vec{P}^2, H] = 0$$

Par contre, la relation de commutation (26) n'est plus valable ; ici nous trouvons :

$$[P_x^2, K_x] = P_x [P_x, K_x] + [P_x, K_x] P_x$$

$$= \frac{ih}{c^2} (P_x H + H P_x) = \frac{2ih}{c^2} H P_x \qquad (54)$$

Ce commutateur n'est donc plus l'opposé de celui de $2mH$ avec $\vec{P}$, de sorte que l'opérateur U introduit en (27) ne commute plus avec $\vec{K}$.
Par contre, si nous calculons :

$$[H^2, K_x] = H [H, K_x] + [H, K_x] H = \frac{2ih}{c^2} H P_x \qquad (55)$$

nous voyons que l'opérateur $H^2 - c^2p^2$ commute avec $\vec{K}$; comme il commute d'autre part avec $\vec{J}$, $\vec{P}$ et H, nous avons ainsi trouvé un opérateur qui commute avec tous les éléments de l'algèbre de Lie. Nous poserons :

$$M^2 = (H^2 - c^2\vec{P}^2) / c^4 \qquad (56)$$

et appellerons l'opérateur diagonal M la masse du système.(*) Nous avons ainsi

$$H^2 = \vec{P}^2 c^2 + M^2 c^4 \qquad (57\text{-a})$$

qui est l'analogue de la relation classique bien connue

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \qquad (57\text{-b})$$

Nous notons que la masse apparaît de façon très différente dans le groupe de Galilée (où elle n'est présente dans les relations de commutation de l'algèbre de Lie qu'après extension) et le groupe de Poincaré. Le fait que H s'exprime maintenant comme une racine carrée d'un opérateur est responsable de certaines complications qui apparaissent lorsqu'on cherche à généraliser une théorie relativiste de Galilée à une théorie relativiste de Lorentz (il n'est pas simple de généraliser l'équation de Schrödinger, du premier ordre par rapport au temps.)

(*) Nous supposons que M^2 est positif, ou éventuellement nul. S'il était négatif, la masse de la particule serait imaginaire pure, la vitesse de la particule serait toujours supérieure à c, etc... Une théorie de tels systèmes physiques ("tachyons") peut être développée (voir "Physics Today", mai 1969, p. 43) mais nous ne l'aborderons pas ici.

(ii) Opérateur $\vec{S}$

Cherchons ensuite un opérateur de spin $\vec{S}$ et, pour cela, commençons par introduire comme en (24) l'opérateur (*) :

$$\vec{L} = (\vec{P} \times \vec{K}) / M \tag{58}$$

et calculons quelles sont ses relations de commutation avec $\vec{J}$, $\vec{P}$, H et $\vec{K}$. Le calcul qui donne (31-c) reste valable et :

$$[\, L_{x_i}, J_{x_j} \,] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_{x_k} \tag{59}$$

(où la sommation $\sum_k$ est sous-entendue). Par contre, le fait que les relations de commutation entre $\vec{P}$ et $\vec{K}$ soient différentes de celles du groupe de Galilée entraîne que (34) n'est plus valable. On a maintenant :

$$[\, L_x, P_x] = \frac{1}{M} [\, P_y K_z - P_z K_y, P_x \,] = 0 \tag{60-a}$$

$$[\, L_x, P_y] = \frac{1}{M} [\, P_y K_z - P_z K_y , P_y \,]$$

$$= - \frac{1}{M} P_z [K_y , P_y] =$$

$$= \frac{i\hbar}{Mc^2} P_z H \tag{60-b}$$

c'est-à-dire :

$$[L_{x_i} , P_{x_j}] = \frac{i\hbar}{Mc^2} \epsilon_{ijk} P_{x_k} H \tag{60-c}$$

De façon analogue :

$$[L_x , H] = \frac{1}{M} [P_y K_z - P_z K_y , H]$$

$$= \frac{i\hbar}{M} (- P_y P_z + P_z P_y) = 0 \tag{61-a}$$

donc :

$$[\, \vec{L} , H \,] = 0 \tag{61-b}$$

(*) Nous supposons ici que $M \neq 0$; le cas $M = 0$ est discuté au §C suivant.

Reste à évaluer le commutateur des composantes de $\vec{L}$ avec celles de $\vec{K}$:

$$[L_{x_i} , K_{x_j}] = \frac{1}{M} \sum_{k\ell} \varepsilon_{ik\ell} [P_{x_k} K_{x_\ell} , K_{x_j}]$$

$$= \frac{ih}{M} \sum_{k\ell} \varepsilon_{ik\ell} \{- \frac{1}{c^2} \sum_{m} \varepsilon_{\ell jm} P_{x_k} J_{x_m} + \frac{1}{c^2} \delta_{jk} H K_{x_\ell}\} \quad (62)$$

Utilisons la relation :

$$\sum_{\ell} \varepsilon_{ik\ell} \varepsilon_{\ell jm} = \sum_{\ell} \varepsilon_{ik\ell} \varepsilon_{jm\ell} = \delta_{ij} \delta_{km} - \delta_{im} \delta_{jk} \quad (63)$$

Nous obtenons ;

$$[L_{x_i} , K_{x_j}] = \frac{ih}{Mc^2} \{- \delta_{ij} \sum_{k} P_{x_k} J_{x_k} + P_{x_j} J_{x_i} + \sum_{\ell} \varepsilon_{ij\ell} H K_{x_\ell}\}$$

$$= \frac{ih}{Mc^2} \{P_{x_j} J_{x_i} - \delta_{ij} (\vec{P} . \vec{J}) + \sum_{k} \varepsilon_{ijk} H K_{x_k}\} \quad (64)$$

Comment maintenant définir le spin $\vec{S}$? Si nous le prenons égal à $\vec{J} - \vec{L}$ comme pour le groupe de Galilée, le fait que

$$[J_x , P_y] = ih P_z$$

et la présence du H du second membre de (60-b) conduirait à une non-commutation de $\vec{S}$ et $\vec{P}$, physiquement peu satisfaisante. Par contre, si nous posons :

$$\vec{S} = \frac{H}{Mc^2} \vec{J} - \vec{L} \quad (65)$$

la relation :

$$[\frac{H}{Mc^2} J_x , P_y] = \frac{H}{Mc^2} [J_x , P_y] = ih \frac{H}{Mc^2} P_z$$

entraîne que :

$$[S_x , P_y] = 0$$

et, de façon générale :

$$[\ \vec{S},\ \vec{P}\ ] = 0 \tag{66}$$

Le moment cinétique intrinsèque du système est alors invariant par translation. On calcule facilement le commutateur :

$$[\ HJ_{x_i}\ ,\ J_{x_j}\ ] = ih\ \varepsilon_{ijk}\ HJ_{x_k}$$

de sorte que (d'après (59)) :

$$[\ S_{x_i}, J_{x_j}\ ] = ih\ \varepsilon_{ijk}\ S_{x_k} \tag{67}$$

(l'opérateur $\vec{S}$ est vectoriel). La relation

$$[\ \vec{S},\ H\ ] = 0 \tag{68}$$

se démontre facilement à partir de (61-b) et (51). Examinons les relations de commutation de $\vec{S}$ avec les composantes de $\vec{K}$. Compte tenu de (64) et des relations (50), il vient :

$$\begin{aligned}[\ S_{x_i}\ ,\ K_{x_j}\ ] &= \frac{ih}{Mc^2}\ (P_{x_j}\ J_{x_i} + \sum_k \varepsilon_{ijk}\ HK_{x_k} \\ &\qquad - P_{x_j}\ J_{x_i} + \delta_{ij}\ \vec{P}.\vec{J} - \sum_k \varepsilon_{ijk}\ HK_{x_k}) \\ &= \frac{ih}{Mc^2}\ \delta_{ij}\ \vec{P}.\vec{J}\end{aligned} \tag{69}$$

De cette relation découle que, si :

$$\vec{S}^2 = S_x^{\,2} + S_y^{\,2} + S_z^{\,2}$$

nous avons :

$$[\vec{S}^2,\ K_x] = \frac{ih}{Mc^2}\ \{\ S_x\ (\vec{P}.\vec{J}) + (\vec{P}.\vec{J})S_x\ \} \tag{70}$$

L'opérateur $\vec{S}^2$ ne commute donc pas avec $\vec{K}$, et l'on voit apparaître l'opérateur $(\vec{P}.\vec{J})$. Calculons le commutateur de ce dernier opérateur avec $\vec{K}$:

$$[(\vec{P}.\vec{J}),\ K_x\ ] = [\ P_x\ J_x + P_y\ J_y + P_z\ J_z,\ K_x\ ]$$

$$= [\ P_x,\ K_x\ ]\ J_x + P_y [\ J_y,\ K_x] + P_z [\ J_z,\ K_x\ ]$$

$$= \frac{ih}{c^2} H J_x - ih\ P_y\ K_z + ih\ P_z\ K_y$$

$$= ih\ M\ S_x \qquad (71)$$

Comparant (70) et (71), nous voyons que si nous posons :

$$W^2 = \vec{S}^2 - \frac{(\vec{P}.\vec{J})^2}{M^2\ c^2} \qquad (72)$$

nous obtenons :

$$[\ W^2,\ K_x\ ] = \frac{ih}{Mc^2}\ \{S_x(\vec{P}.\vec{J}) + (\vec{P}.\vec{J})S_x\} - \frac{ih}{Mc^2}\{S_x(\vec{P}.\vec{J}) + (\vec{P}.\vec{J})S_x\} = 0$$

Donc :

$$[\ W^2,\ \vec{K}\ ] = 0 \qquad (73)$$

D'autre part, on montre facilement que $\vec{S}^2$ et $(\vec{P}.\vec{J})$ commutent avec $\vec{J}$ (le produit scalaire de deux opérateurs vectoriels est scalaire), ce qui entraîne que :

$$[\ W^2,\ \vec{J}\ ] = 0 \qquad (74)$$

Comme enfin :

$$[\ (\vec{P}.\vec{J}),\ H\ ] = 0$$

$$[\ (\vec{P}.\vec{J}),\ P_x\ ] = [\ P_x\ J_x + P_y\ J_y + P_z\ J_z,\ P_x\ ]$$

$$= P_y [\ J_y,\ P_x] + P_z [\ J_z,\ P_x\ ]$$

$$= P_y\ (-ih\ P_z) + P_z(ih\ P_y)$$

$$= 0$$

il est clair que :

$$[\ W^2,\ H] = [\ W^2,\ \vec{P}\ ] = 0 \qquad (75)$$

L'opérateur W^2 est donc un opérateur qui commute avec tous les générateurs du groupe de Poincaré ; il joue un rôle analogue à celui de $\vec{S}^2$ pour le groupe de Galilée. Nous allons voir que ses valeurs propres sont également de la forme $S(S+1)\hbar^2$ où S est entier ou demi-entier.

(iii) Valeurs propres de W^2 ; relations de commutation entre composantes de $\vec{S}$

L'opérateur W^2 commutant avec tous les générateurs du groupe de Poincaré, il ne peut avoir qu'une valeur propre, du moins si l'espace des états considéré fournit une représentation irréductible du groupe (système constitué d'une particule élémentaire). En effet, s'il avait deux valeurs propres distinctes, l'espace de représentation serait la somme directe de deux sous-espaces orthogonaux associés aux valeurs propres différentes, entre lesquelles aucun générateur infinitésimal ne pourrait avoir d'élément de matrice non-nul ; la réprésentation serait donc réductible.

Comme W^2 commute avec $\vec{P}$, tout sous-espace propre de $\vec{P}$ est stable sous son action ; la valeur propre de W^2 peut être obtenue par diagonalisation de cet opérateur dans l'un quelconque des sous-espaces propres de $\vec{P}$. Nous allons admettre ici que la valeur propre $\vec{p} = 0$ existe (nous verrons plus loin que c'est le cas si la masse M de la particule n'est pas nulle ; le cas où M = 0 est discuté au § c suivant). Comme d'autre part :

$$\vec{S} = \vec{J}\,\frac{H}{Mc^2} + \frac{1}{M}\,\vec{K} \times \vec{P} \qquad (76)$$

($\vec{J}$ et H commutent, et il en est de même de composantes distinctes de $\vec{K}$ et $\vec{P}$) et compte tenu de (57-a), on voit que l'opérateur $\vec{S}_0$ qui donne l'action de $\vec{S}$ à l'intérieur du sous-espace de valeur propre $\vec{p} = 0$ est (*) :

$$\vec{S}_0 = \vec{J} \qquad (77)$$

On note de même sur (72) (où $\vec{P}.\vec{J}$ est égal à $\vec{J}.\vec{P}$) que, si W_0^2 est la restriction de W^2 dans le même sous-espace, on a :

$$W_0^2 = \vec{S}_0^{\,2} \qquad (78)$$

La valeur propre (unique) de W^2 est donc celle de $\vec{S}_0^{\,2}$ dans le sous-espace $\vec{p} = 0$

(*) $\vec{J}$ commutant avec $\vec{P}$, ce sous-espace est effectivement stable sous l'action de $\vec{J}$

Or l'égalité (77) montre que les relations de commutation dans ce sous-espace sont celles d'un moment cinétique ; les valeurs propres de $\vec{S}_0^{\,2}$ ne peuvent donc être égales qu'à $S(S+1)\hbar^2$ où S est un nombre entier ou demi-entier.
Par suite :

$$W^2 = S(S+1)\hbar^2 \tag{79}$$

Examinons maintenant quelles sont les relations de commutation entre composantes de $\vec{S}$. L'égalité (38) qui confère à $\vec{S}$ toutes les caractéristiques d'un moment cinétique dans le cadre du groupe de Galilée n'est plus valable pour le groupe de Poincaré. On a ici :

$$[S_{x_i}, S_{x_j}] = \left[\frac{H}{Mc^2} J_{x_i} - \sum_{np} \frac{\varepsilon_{inp}}{M} P_{x_n} K_{x_p}, \frac{H}{Mc^2} J_{x_j} - \sum_{lm} \frac{\varepsilon_{jlm}}{M} P_{x_l} K_{x_m}\right]$$

$$= \alpha + \beta + \gamma + \delta \tag{80}$$

où :

$$\alpha = \left(\frac{H}{Mc^2}\right)^2 \sum_k \varepsilon_{ijk} J_{x_k}$$

$$\beta = -\frac{1}{M} \sum_{np} \varepsilon_{inp} \left[P_{x_n} K_{x_p}, \frac{H}{Mc^2} J_{x_j}\right]$$

$$\delta = \frac{1}{M^2} \sum_{np\ell m} \varepsilon_{inp}\, \varepsilon_{j\ell m} \left[P_{x_n} K_{x_p}, P_{x_\ell} K_{x_m}\right]$$

(γ est obtenu en permutant i et j dans β et en changeant le signe). La formule :

$$[AB, CD] = A[B,C]D + AC[B,D] + [A,C]DB + C[A,D]B \tag{81}$$

donne :

$$-M\beta = \sum_{np} \varepsilon_{inp} \left\{P_{x_n} \left(-\frac{ih}{Mc^2} P_{x_p}\right) J_{x_j} + P_{x_n} \frac{H}{Mc^2} \sum_q \varepsilon_{pjq} K_{x_q}\right.$$

$$\left. + \frac{H}{Mc^2} \sum_q \varepsilon_{njq} P_{x_q} K_{x_p}\right\}$$

Dans le second membre, le terme en $\varepsilon_{inp} P_{xn} P_{xp} J_{xj}$, impair par échange des indices n et p, disparaît par sommation . Pour calculer les autres termes, on utilise les égalités :

$$\sum_p \varepsilon_{inp}\, \varepsilon_{jqp} = \delta_{ij}\, \delta_{nq} - \delta_{iq}\, \delta_{nj}$$

$$\sum_n \varepsilon_{inp}\, \varepsilon_{qnj} = \delta_{iq}\, \delta_{pj} - \delta_{ij}\, \delta_{pq}$$

et il vient :

$$-M\beta = \frac{i\hbar}{Mc^2}\left\{\delta_{ij}\, H(\vec{P}.\vec{K}) - P_{x_j} H K_{x_i} + H\, P_{x_i} K_{x_j} - \delta_{ij} H(\vec{P}.\vec{K})\right\}$$

soit :

$$\beta = i\hbar \frac{H}{M^2c^2}\left\{P_{x_j} K_{x_i} - P_{x_i} K_{x_j}\right\} \tag{82}$$

La règle énoncée plus haut pour le calcul de γ donne $\beta = \gamma$, et il ne reste à calculer que δ :

$$M^2\delta = \sum_{npℓm} \varepsilon_{inp}\, \varepsilon_{jℓm}\left\{K_{x_n} \frac{i\hbar}{c^2} H\, \delta_{pℓ}\, P_{x_m} + \sum_q \varepsilon_{nℓq}\left(-\frac{i\hbar}{c^2} J_{x_q} P_{x_m} P_{x_p}\right)\right.$$

$$\left. + K_{x_ℓ}\, \delta_{nm}\left(-\frac{i\hbar}{c^2}\right) H\, x_p\right\}$$

$$= \frac{i\hbar}{c^2}\left\{K_{x_j} H\, P_{x_i} - \delta_{ij}\,(\vec{K}.\vec{P})H - K_{x_i} H\, P_{x_j}\right\}$$

$$+ \delta_{ij}(\vec{K}.\vec{P})H - \sum_{pm} \varepsilon_{ijp}\, J_{x_m} P_{x_m} P_{x_p}$$

$$+ \sum_{pm} \varepsilon_{imp}\, J_{x_j} P_{x_m} P_{x_p}\Big\} \tag{83}$$

(le dernier terme du second membre, impair par échange de m et de p, disparaît par sommation).

Pour finir, reportant dans (76) les valeurs de α, β, γ et δ, nous obtenons :

$$[S_{x_i}, S_{x_j}] = i\hbar\left\{\left(1 + \frac{\vec{P}^2}{M^2c^2}\right)\sum_k \varepsilon_{ijk}\, J_{x_k}\right.$$

$$\left. - \frac{H}{Mc^2}\sum_k \varepsilon_{ijk}\, L_{x_k} - \frac{\vec{J}.\vec{P}.}{M^2c^2}\sum_k \varepsilon_{ijk}\, P_{x_k}\right\}$$

$$= i\hbar\left\{\frac{H}{Mc^2}\sum_k \varepsilon_{ijk}\, S_{x_k} - \frac{\vec{J}.\vec{P}.}{M^2c^2}\sum_k \varepsilon_{ijk}\, P_{x_k}\right\} \tag{84}$$

REMARQUES

(i) Dans l'algèbre de Lie du groupe de Galilée, nous avons aisément trouvé au § 1 un opérateur de position :

$$\vec{R} = \vec{K}/M$$

et les relations de commutation canoniques (44) entraînaient que :

$$\left[\vec{R},\ \vec{\delta a}.\vec{P}\right] = i\hbar\ \vec{\delta a}$$

Par suite, dans une translation du système d'une quantité $\vec{\delta a}$, sa position est changée de $\vec{\delta a}$, ce qui peut être considéré comme une contrainte à imposer à tout opérateur de position. Or, dans l'algèbre de Lie du groupe de Poincaré, il n'y a pas d'opérateur dont les relations de commutation soient des relations canoniques classiques ; la deuxième des égalités (50) ne redonne ces relations canoniques que si l'on remplace H par Mc^2 ("limite non-relativiste"). On voit que la définition générale d'un opérateur de position n'est pas un problème simple en relativité d'Einstein.

(ii) Examinons si la valeur propre $\vec{p} = 0$ de $\vec{P}$ existe toujours ou, en d'autres termes, s'il existe toujours un référentiel où la particule soit au repos. Considérons donc un vecteur propre $|E, \vec{p}, \alpha\rangle$ commun à H et aux trois composantes de $\vec{P}$ (c'est possible puisque H et $\vec{P}$ commutent), de valeurs propres E, p_x, p_y, p_z (composantes de $\vec{p}$) ; le nombre quantique α repère les valeurs propres des autres opérateurs éventuellement nécessaires pour former, avec H et $\vec{p}$ un E.C.O.C. dans l'espace des états. E et p sont reliés par l'égalité (57-b). Considérons pour commencer une rotation infinitésimale associée à l'opérateur :

$$\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\ \vec{\delta a}.\vec{J}$$

D'après la seconde des relations (49), on a :

$$\vec{P}\ (\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\ \vec{\delta a}.\vec{J})\ |E, \vec{p}, \alpha\rangle$$

$$= \{(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\ \vec{\delta a}.\vec{J})\ \vec{P} + \vec{\delta a} \times \vec{P}\ \}|E, \vec{p}, \alpha\rangle$$

$$= (\vec{p} + \vec{\delta a} \times \vec{p})(1 - \frac{i}{\hbar}\ \vec{\delta a}.\vec{J})\ |E, \vec{p}, \alpha\rangle + O(\delta a^2) \qquad (85)$$

puisque, par exemple :

$$\left[P_x,\ \delta a_x\ J_x + \delta a_y\ J_y + \delta a_z\ J_z\ )\right] = i\hbar\ (\delta a_y\ P_z - \delta a_z\ P_y\ ) \qquad (86)$$

le ket :

$$(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\ \vec{\delta a}.\vec{J})\ |E, \vec{p}, \alpha\rangle$$

est donc un autre vecteur propre de $\vec{P}$, de valeur propre

$$\vec{p} + \vec{\delta a} \times \vec{p}$$

Nous retrouvons ainsi que les opérateurs de rotation modifient les composantes de $\vec{p}$ comme celles d'un vecteur de l'espace ordinaire ; on voit facilement que l'énergie E est par contre inchangée ($\vec{P}$ est vectoriel, H scalaire). Le raisonnement qui vient d'être fait est valable aussi bien dans le cadre du groupe de Galilée que de Poincaré.

Prenons maintenant un changement de repère de Lorentz et l'opérateur

$$\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\ \vec{\delta v}_0 . \vec{K}$$

La seconde des relations (50) donne alors :

$$\begin{aligned} &\vec{P}(\mathbb{1} - \tfrac{i}{\hbar}\ \vec{\delta v}_0 . \vec{K})\ |E, \vec{p}, \alpha> \\ &= \{(\mathbb{1} - \tfrac{i}{\hbar}\ \vec{\delta v}_0 . \vec{K})\vec{P} + \vec{\delta v}_0\ \tfrac{H}{c^2}\}\ |E, \vec{p}, \alpha> \\ &= (\vec{p} + \tfrac{E}{c^2}\ \vec{\delta v}_0)(\mathbb{1} - \tfrac{i}{\hbar}\ \vec{\delta v}_0 . \vec{K})|E, \vec{p}, \alpha> + O(\delta v_0^{\,2}) \end{aligned} \qquad (87\text{-a})$$

De même, (51) conduit à :

$$\begin{aligned} &H(\mathbb{1} - \tfrac{i}{\hbar}\ \vec{\delta v}_0 . \vec{K})\ |E, \vec{p}, \alpha> \\ &= \{(\mathbb{1} - \tfrac{i}{\hbar}\ \vec{\delta v}_0 . \vec{K})H + \vec{\delta v}_0 . \vec{P}\}|E, \vec{p}, \alpha> \\ &= (E + \vec{\delta v}_0 . \vec{P})(\mathbb{1} - \tfrac{i}{\hbar}\ \vec{\delta v}_0 . \vec{K})\ |E, \vec{p}, \alpha> \end{aligned} \qquad (87\text{-b})$$

Le ket :

$$(\mathbb{1} - \tfrac{i}{\hbar}\ \vec{\delta v}_0 . \vec{K})\ |E, \vec{p}, \alpha>$$

est donc un autre vecteur propre commun à H et $\vec{P}$, de valeurs propres respectives :

$$\begin{aligned} \vec{p}' &= \vec{p} + \frac{E}{c^2}\ \vec{\delta v}_0 \\ E' &= E + \vec{\delta v}_0 . \vec{p} \end{aligned} \qquad (88\text{-a})$$

Nous retrouvons au premier ordre en $\delta\vec{v}_0$ les formules de transformation de Lorentz (*) pour un quadrivecteur relativiste (quadrivecteur impulsion-énergie $\{\vec{p}\ ,\ E/c^2\}$). On vérifie que $E^2 - c^2\,\vec{p}^2$ est un invariant puisque, au premier ordre en $\delta\vec{v}_0$:

$$E'^2 - c^2\,\vec{p}'^2 = E - c^2\,\vec{p}^2 + 2E\,\delta\vec{v}_0 \cdot \vec{p} - c^2\,2\frac{E}{c^2}\,\delta\vec{v}_0 \cdot \vec{p}$$

$$= E^2 - c^2\,\vec{p}^2$$

Par intégration des égalités (87) on obtient donc, pour une valeur finie de $\vec{v}_0$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{p}' = \gamma\,(\vec{p} + \dfrac{E}{c^2}\,\vec{v}_0) \\ \\ E' = \gamma\,(E + \vec{v}_0 \cdot \vec{p}) \end{array} \right. \qquad (88\text{-b})$$

avec :

$$\gamma = [1 - v_0^2 / c^2]^{-1/2} \qquad (88\text{-c})$$

On sait à quelle condition un quadrivecteur relativiste peut être ramené par un changement de repère de Lorentz à avoir des composantes d'espaces nulles ($\vec{p} = 0$) : il faut que ce soit un quadrivecteur du "genre temps", de norme positive. Il faut donc ici que :

$$c^2\,(\frac{E}{c^2})^2 - \vec{p}^2 = \frac{1}{c^2}\,(E^2 - c^2\,\vec{p}^2)$$

$$= M^2\,c^2$$

soit positif. Si donc la particule a une masse non-nulle, la valeur propre $\vec{p} = 0$ existe et le raisonnement fait plus haut pour établir (79) est valide. Par contre, si $M = 0$, il n'existe pas de référentiel où la particule soit au repos et le raisonnement doit être repris.

(*) *Voir les relations (III-101) [le facteur γ vaut 1 au premier ordre] ou (III-108).*

Dans la remarque suivante nous allons examiner comment généraliser le raisonnement qui nous a conduits à (79) sans nécessairement utiliser un référentiel où la particule a une impulsion nulle.

(iii) L'opérateur $\vec{S}$ commute avec H et $\vec{P}$; l'opérateur $\vec{S}^2$ avec H, $\vec{P}$ et $\vec{J}$, mais pas avec $\vec{K}$ [cf. (69) et (70)]. Les égalités (84) nous montrent bien que les relations de commutation entre composantes de $\vec{S}$ ne sont pas les relations "classiques" (galiléennes)dès qu'on ne peut plus remplacer H par Mc^2 et $\vec{P}$ par $\vec{0}$. Cependant, seules des composantes sur les mêmes axes de $\vec{S}$ et $\vec{K}$ ne commutent pas [d'après (69)] ; en d'autres termes, une transformation de Lorentz comme celle envisagée dans la remarque précédente n'affecte pas les composantes de $\vec{S}$ perpendiculaires à $\delta\vec{v}_0$. Par suite, tant que $\vec{v}_0$ reste parallèle à Oz, les opérateurs

$$S_{\pm} = S_x \pm i S_y \tag{89}$$

sont invariants. Ceci nous suggère comment raisonner dans un espace propre de $\vec{P}$ de valeur propre $\vec{p}$ non nulle : il faut choisir des axes Oxyz tels que Oz soit parallèle à $\vec{p}$. Supposons donc que ce changement d'axes ait été effectué et appelons $\vec{S}^p$ l'opérateur qui donne l'action de $\vec{S}$ à l'intérieur d'un sous-espace propre commun à H et $\vec{P}$, de valeurs propres E et $\vec{p} = p\,\vec{e}_z$ ($\vec{e}_z$: vecteur unitaire parallèle à Oz ; rappelons que ce sous-espace est stable sous l'action de $\vec{S}$ qui commute avec $\vec{P}$ et H). La relation (84) donne alors :

$$[\, S^p_x \,,\, S^p_y \,] = i\hbar \left\{ \frac{E}{Mc^2}\, S^p_z - p\, \frac{\vec{J}\cdot\vec{P}}{M^2c^2} \right\} \tag{90}$$

D'autre part, comme des composantes de $\vec{K}$ et $\vec{P}$ sur des axes orthogonaux commutent,on a :

$$\begin{aligned} \vec{P}\cdot(\vec{K}\times\vec{P}) &= P_x\,(K_y P_z - K_z P_y) \\ &+ P_y\,(K_z P_x - K_x P_z) \\ &+ P_z\,(K_x P_y - K_y P_x) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{91}$$

(il faut aussi utiliser le fait que les composantes de $\vec{P}$ commutent toutes entre elles).

Donc, la relation (76) donne :

$$\vec{S} \cdot \vec{P} = \vec{P} \cdot \vec{S} = \vec{P} \cdot \vec{J} \frac{H}{Mc^2} = \frac{H}{Mc^2} (\vec{J} \cdot \vec{P}) \qquad (92)$$

Le deuxième membre de (90) vaut donc (rappelons que E n'est jamais nul) :

$$ih \left\{ \frac{E}{Mc^2} S^p_z - \frac{p^2}{ME} S^p_z \right\}$$

$$= ih \frac{E^2 - p^2c^2}{Mc^2E} S^p_z$$

$$= ih \frac{Mc^2}{E} S^p_z \qquad (93)$$

Nous obtenons donc, en adjoignant à (90) des relations directement obtenues à partir de (84) compte tenu du fait que $p_x = p_y = 0$:

$$\begin{cases} [S^p_x , S^p_y] = ih \frac{Mc^2}{E} S^p_z \\ [S^p_y , S^p_z] = ih \frac{E}{Mc^2} S^p_x \\ [S^p_z , S^p_x] = ih \frac{E}{Mc^2} S^p_y \end{cases} \qquad (94)$$

Introduisons maintenant l'opérateur $\vec{T}^p$ par :

$$\begin{cases} T^p_x = S^p_x \\ T^p_y = S^p_y \\ T^p_z = \frac{Mc^2}{H} S^p_z \end{cases} \qquad (95)$$

il vient :

$$\begin{cases} [T^p_x , T^p_y] = ih T^p_z \\ [T^p_z , T^p_z] = ih T^p_x \\ [T^p_z , T^p_x] = ih T^p_y \end{cases} \qquad (96)$$

qui sont exactement les relations de commutation d'un moment cinétique. Le raisonnement habituel montre donc que l'opérateur $(\vec{T}^p)^2$ possède des valeurs propres de la forme

$$S\ (S+1)\hbar^2$$

où S est un nombre entier ou demi-entier. D'autre part, les égalités (95) donnent

$$(\vec{T}^p)^2 = (\vec{S}^p)^2 - (S^p{}_z)^2 \left[1 - (\frac{Mc^2}{H})^2\right] = (\vec{S}^p)^2 - (S^p{}_z)^2 \frac{p^2c^2}{E^2}$$

On a donc

$$(\vec{S}^p)^2 - \frac{c^2}{E^2} (\vec{S}^p.\vec{P})^2 = S(S+1)\hbar^2$$

c'est-à-dire, d'après (92)

$$(\vec{S}^p)^2 - \frac{1}{M^2c^2} (\vec{J}.\vec{P})^2 = S(S+1)\hbar^2 \qquad (97)$$

Nous retrouvons ainsi que l'opérateur W^2, défini en (72) a des valeurs propres de la forme $S(S+1)\hbar^2$, mais cette fois sans supposer que la particule est étudiée dans un sous-espace propre de $\vec{P}$ où elle est au repos.

c - Particule de masse nulle

Nous avons vu que, dans le cadre du groupe de Galilée, il est important d'attribuer une masse finie (non-nulle) à la particule ; dans le cas contraire, la représentation est profondément modifiée (elle devient vraie au lieu de projective) et le spectre de H n'a plus de valeur minimale (il est non-borné inférieurement). Pour le groupe de Poincaré, de telles difficultés ne se produisent pas et il n'y a pas de raison d'imposer que M soit non nul (cas du photon par exemple). Il est cependant nécessaire de reprendre les raisonnements précédents car, dans la définition même de $\vec{S}$, nous avons supposé que M = 0.

Au lieu de $\vec{S}$, introduisons l'opérateur $\vec{\Sigma}$ (qui vaut simplement $M\vec{S}$ si M n'est pas nul) par :

$$\vec{\Xi} = \frac{H}{c^2}\,\vec{J} + \vec{K} \times \vec{P} \tag{98}$$

Les raisonnements effectués plus haut sur $\vec{S}$ lorsque M = 0 se transposent immédiatement à $\vec{\Xi}$, et l'on obtient [cf. relations (66) à (70)] :

$$[\,\vec{\Xi},\,\vec{P}\,] = [\,\vec{\Xi},\,H\,] = 0 \tag{99-a}$$

$$[\Xi_{x_i},\,J_{x_j}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\Xi_{x_k} \tag{99-b}$$

$$[\vec{\Xi}^2,\,\vec{J}\,] = 0 \tag{99-c}$$

On en déduit que la quantité

$$Z^2 = \vec{\Xi}^2 - \frac{1}{c^2}\,(\vec{P}\,.\vec{J})^2 \tag{100}$$

commute avec tous les générateurs du groupe de Poincaré ($Z^2 = M^2W^2$ si $M \neq 0$). Quant aux relations de commutation (84), elles deviennent :

$$[\,\Xi_{x_i},\,\Xi_{x_j}\,] = i\hbar\left\{\frac{H}{c^2}\,\varepsilon_{ijk}\,\Xi_{x_k} - \frac{1}{c^2}\,\vec{J}.\vec{P}\,\varepsilon_{ijk}\,P_{x_k}\right\} \tag{101}$$

Enfin, l'analogue de (92) est ici :

$$\vec{\Xi}\,.\vec{P} = \frac{H}{c^2}\,\vec{J}.\vec{P} \tag{102}$$

Dans un sous-espace propre commun à H et $\vec{P}$ où les valeurs propres P_x et P_y sont nulles, nous avons [cf équations (90) à (93)] :

$$[\Xi^P_x\,,\,\Xi^P_y\,] = i\hbar\left\{\frac{E}{c^2}\,\Xi^P_z - \frac{P}{c^2}\,\vec{J}.\vec{P}\right\} = i\hbar\left\{\frac{E}{c^2}\,\Xi^P_z - \frac{P}{E}\,P\,\Xi^P_z\right\} = 0$$

[on a utilisé (90) et le fait que, si M = 0, la relation générale (57-b) donne E = pc]. Les relations (94) doivent donc ici être remplacées par :

$$\begin{aligned}
&[\,\Xi^P_x,\,\Xi^P_y\,] = 0\\
&[\,\Xi^P_y,\,\Xi^P_z\,] = i\hbar\,\frac{E}{c^2}\,\Xi^P_x\\
&[\,\Xi^P_z,\,\Xi^P_x\,] = i\hbar\,\frac{E}{c^2}\,\Xi^P_y
\end{aligned} \tag{103}$$

Les trois composantes de $\vec{\Xi}$ engendrent donc une algèbre de Lie dégénérée par rapport à celle de $\vec{S}$ lorsque $M \neq 0$ [qui engendraient l'algèbre de SO(3) ou SU(2)] : une constante de structure supplémentaire est nulle.

Introduisons les opérateurs :

$$\Xi^p_{\pm} = \Xi^p_x \pm i \Xi^p_y \tag{104}$$

Nous avons

$$[\Xi^p_+, \Xi^p_-] = 0 \tag{105-a}$$

$$\Xi^p_+ \Xi^p_- = \Xi^p_- \Xi^p_+ = (\vec{\Xi^p})^2 - (\Xi^p_z)^2 \tag{105-b}$$

$$[\Xi^p_z, \Xi^p_{\pm}] = \pm \hbar \frac{E}{c^2} \Xi^p_{\pm} \tag{105-c}$$

[ces relations peuvent être comparées avec celles d'un moment cinétique, voir les égalités (VI-5)] . Dans le sous-espace propre commun à H et $\vec{P}$, considérons une base $|E, \vec{p}, j, m, \alpha\rangle$ de vecteurs propres communs à $\vec{\Xi}^2$ et Ξ_z (rappelons que l'axe 0_z est parallèle à $\vec{p}$) ; les valeurs propres respectives de ces opérateurs sont notées par convention :

$$\sigma^2 \hbar^2 \frac{E^2}{c^4} \qquad\qquad \mu \hbar \frac{E}{c^2}$$

Le fait que la norme du ket $\Xi^p_+ \; | E, \vec{p}, \sigma, \mu, \alpha \rangle$ soit positive entraîne, compte tenu de (105-b) :

$$\sigma^2 - \mu^2 \geqslant 0 \tag{106-a}$$

donc (si l'on convient de prendre $\sigma > 0$) :

$$-\sigma \leqslant \mu \leqslant +\sigma \tag{106-b}$$

on voit également en utilisant (105) que l'action de Ξ^p_+ sur un ket non nul $|E, \vec{p}, \sigma, \mu, \alpha\rangle$ donne :

. soit un ket nul si $\mu = \pm \sigma$ (et pas seulement $\mu = +\sigma$ contrairement à ce

qui se produit pour un moment cinétique ;

. soit un ket non-nul, vecteur propre de $\vec{\Xi}^2$ avec la même valeur propre $\sigma^2\hbar^2E^2/c^4$, et de Ξ^p_z avec la valeur propre $(\mu + 1)\hbar E/c^2$.
Des propriétés analogues existent pour Ξ_- (mais il faut remplacer $\mu + 1$ par $\mu - 1$).

Supposons maintenant qu'il existe un ket $|E, \vec{p}, \sigma, \mu, \alpha\rangle$ où $\mu \neq \pm\sigma$, non nul. Par action répétée de Ξ^p_+ on peut amener m à sa valeur maximale $\mu = +\sigma$ et obtenir un ket non-nul. Cependant, par action de Ξ^p_-, ce ket s'annulera. Or Ξ^p_+ et Ξ^p_- commutant, il revient au même de faire agir Ξ^p_- sur l'un quelconques des kets obtenus entre la valeur μ et $\mu = \sigma$. La seule possibilité pour obtenir zéro est que $\mu = -\sigma$.

En conséquence, les seules valeurs possibles de Ξ_z sont :

$$\mu = \pm\sigma \tag{107}$$

et l'action de $\Xi_\pm$ sur ces kets donne toujours un ket de norme nulle, de sorte que :

$$\Xi^p_\pm = 0 \tag{108-a}$$

ou encore :

$$\Xi^p_x = \Xi^p_y = 0 \tag{108-b}$$

Par contre, la composante de $\vec{\Xi}$ sur l'axe parallèle à $\vec{p}$ peut a-priori prendre deux valeurs :

$$\Xi^p_z = \pm\sigma\hbar\frac{E}{c^2} \tag{109}$$

Montrons enfin que σ est entier ou demi-entier. Pour cela, on peut utiliser (102) qui indique que les valeurs propres

$$\pm\sigma\hbar\frac{E}{c^2}p$$

de $\vec{\Xi}.\vec{P}$ sont aussi celles de $H\,\vec{J}.\vec{P}/c^2$. Dans une base de vecteurs propres communs à H, J_z (valeur propre m_J où m_J est entier ou demi-entier) et P_z, ces valeurs propres prennent la forme

$$m_J\,Ep/c^2$$

Donc $m_J = \pm \sigma$ (110)

et σ est soit entier soit demi-entier. Ce nombre est appelé spin de la particule.

REMARQUES

(i) Pour une particule de masse nulle, les relations (108) montrent que :

$$(\Xi.\vec{P})^2 = \hbar^2 \Xi^2 \vec{p}^2$$

compte tenu de (100) et de (102), on montre facilement que :

$$Z^2 = 0$$

ce qui est bien ce que l'on obtient en considérant une particule de masse non-nulle ($Z^2 = S(S+1)\hbar^2 M^2$) et en faisant tendre M vers zéro.

(ii) La valeur de σ est nécessairement unique si l'on considère une représentation irréductible de la partie connexe du groupe de Poincaré qui entoure l'identité (groupe de Poincaré sans renversement ni d'espace, ni de temps) ; elle ne peut en effet varier de façon discontinue par application de transformations de Lorentz infinitésimales.

Si l'on veut inclure dans l'espace des états de la particule l'opération de parité d'espace, on considèrera que $\vec{\Xi}$ (ou $\vec{S}$), sont comme $\vec{J}$, des vecteurs axiaux (invariant par parité), contrairement à $\vec{P}$ qui est polaire (changement de signe par parité). La quantité $\vec{\Sigma}.\vec{P}$ apparaît comme un opérateur qui change de signe sans une symétrie d'espace (pseudoscalaire). Dans ces conditions, deux valeurs opposées de σ doivent être réalisées dans l'espace des états de la particule. Par exemple, pour le photon, deux états $\sigma = \pm 1$ sont possibles.

La symétrie d'espace par rapport à un point n'est cependant pas, à l'heure actuelle, considérée comme une symétrie fondamentale de la nature. Rien n'empêche donc, pour certaines particules, de supposer qu'une seule valeur de σ est réalisée et pas la valeur opposée (théorie des neutrinos à deux composantes).

COMPLEMENT IV-C

REPRESENTATIONS PROJECTIVES UNITAIRES DE DIMENSION FINIE DES GROUPES DE LIE CONNEXES

Revenons plus en détail sur les représentations unitaires de dimension finie du groupe $\mathcal{G}$, considérées au § D-3 du chapitre IV. Nous considérons une représentation projective quelconque, donnée par les matrices N x N des opérateurs $T(\vec{a})$:

$$\begin{pmatrix} T_{11}(\vec{a}) \cdots & T_{1N}(\vec{a}) \\ T_{21}(\vec{a}) & \cdot \\ \vdots & \vdots \\ T_{N1}(\vec{a}) \cdots & T_{NN}(\vec{a}) \end{pmatrix} \qquad (1)$$

telles que, si :

$$\mathcal{C}(\vec{d}) = \mathcal{C}(\vec{a}) \quad \mathcal{C}(\vec{b}) \qquad (2)$$

on a :

$$T(\vec{d}) = e^{-i\xi\,(a,\,b)}\, T(\vec{a})\, T(\vec{b}) \qquad (3)$$

Nous allons supposer que le déterminant des matrices écrites en (1) est ramené à la valeur 1. Pour cela, comme au § D-3 du chapitre IV, on appelle $K(\vec{a})$ l'une des racines $N^{\text{ième}}$ complexe du déterminant $\Delta(\vec{a})$ de ces matrices :

$$[\, K(\vec{a}) \,]^N = \Delta(\vec{a}) \qquad (4)$$

et l'on substitue aux opérateurs $T(a)$ les opérateurs

$$T(\vec{a}) \,/\, K(\vec{a})$$

Nous avons vu que dans ce cas, le facteur de phase $e^{i\xi}$ ne peut prendre qu'un ensemble discret de valeurs, les N racines $N^{ième}$ de l'unité :

$$e^{i\xi(\vec{a},\vec{b})} = 1, e^{2i\pi/N}, e^{4i\pi/N}, \ldots, e^{(N-1)\,2i\pi/N} \qquad (5)$$

On peut remarquer dès ici que, comme $\xi(\vec{0},\vec{0}) = 0$, la fonction ξ est donc soit discontinue, soit toujours nulle.

A ce stade, la redéfinition des opérateurs $T(\vec{a})$ n'est évidemment pas unique, puisqu'il existe N nombres complexes $K(\vec{a})$ satisfaisant la relation (4). A priori, N opérateurs $T(\vec{a})$ distincts, différant par un facteur de phase, peuvent être associés à chaque transformation $\mathcal{C}(\vec{a})$ du groupe $\mathcal{G}$ (*). Le but de ce complément est de montrer comment, pour un groupe $\mathcal{G}$ connexe, on peut tirer parti de cet arbitraire de phase pour simplifier encore les facteurs de phase $e^{-i\xi}$ dans (3). En fait, si le groupe $\mathcal{G}$ est simplement connexe, nous allons voir que l'on peut de cette façon complètement supprimer tous les facteurs de phase $e^{-i\xi}$.

A - CAS OU $\mathcal{G}$ EST SIMPLEMENT CONNEXE

La relation (4) donne N déterminations possibles pour la phase de $K(\vec{a})$, et donc de l'opérateur $T(\vec{a})$. Si l'on fait un choix absolument quelconque de cette détermination pour les diverses valeurs de $\vec{a}$, on peut compliquer à loisir les variations de T avec $\vec{a}$; par exemple, il est clair que la sélection de deux déterminations différentes pour deux valeurs de $\vec{a}$ très proches entraine l'existence d'une discontinuité pour l'opérateur $T(\vec{a})$ [les éléments $T_{ij}(\vec{a})$ sont des fonctions discontinues de $\vec{a}$] . Nous allons ici chercher à faire le choix qui rende les variations de $T(\vec{a})$ aussi régulières que possibles.

Au voisinage de l'origine ($\vec{a} = 0$), nous avons supposé en (IV-59) que $T(\vec{a})$ est continu et développable suivant :

(*) On peut généraliser la notion de représentation d'un groupe $\mathcal{G}$ à celle d'une représentation multivaluée : à tout élément de $\mathcal{G}$ on associe un ensemble de N matrices ou opérateurs $T_1(\vec{a})$, $T_2(\vec{a})$, ... $T_N(\vec{a})$. Prenons deux opérations $\mathcal{C}(\vec{a})$ et $\mathcal{C}(\vec{b})$, de produit $\mathcal{C}(\vec{a})$. Si tous les couples $T_i(\vec{a})$, $T_j(\vec{b})$ sont égaux à l'une des matrices $T_k(\vec{a})$, on dit qu'on a une "représentation multivaluée". Nous reviendrons sur ce point au §A-5 du Chapitre VI.

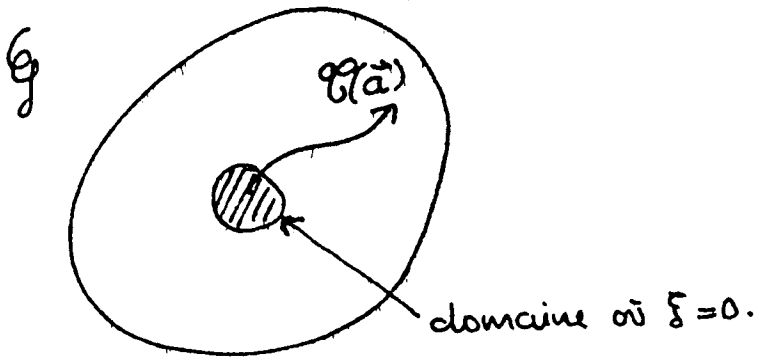
$$T(\delta\vec{a}) = 1 - \frac{i}{\hbar}\,(\delta\vec{a}\,.\,\vec{G}) + \ldots \qquad (6)$$

Dans un certain domaine entourant l'origine, si l'on prend pour $K(\delta\vec{a})$ la racine $N^{\text{ième}}$ de $\Delta(\delta\vec{a})$ qui tend vers 1 lorsque $\delta a \to 0$, la division de $T(\delta\vec{a})$ par $K(\delta\vec{a})$ préserve la continuité des opérateurs. Nous allons supposer qu'on a effectivement fait ce choix de sorte que (6) est toujours valide après la redéfinition des phases des opérateurs T infinitésimaux. Dans ces conditions, il existe un certain domaine pour $\vec{a}$ et $\vec{b}$, entourant l'origine, où la fonction $\xi(\vec{a},\vec{b})$ est nécessairement nulle. Ceci se voit directement sur (3) qui peut s'écrire :

$$e^{-i\xi(\delta\vec{a}\,,\,\delta\vec{b})} = T^{+}(\delta\vec{a})\,T^{+}(\delta\vec{b})\,T(\delta\vec{d}) \qquad (7)$$

Le second membre de cette égalité étant un opérateur (en fait, un scalaire) très proche de 1, seule la première des valeurs (5) de $e^{-i\xi}$ peut être retenue.

Lorsque maintenant $\vec{a}$ et $\vec{b}$ prennent des valeurs finies, nous ne savons rien a priori de $e^{-i\xi}$. Nous allons procéder de façon analogue en choisisant la phase des T de façon à rendre leur dépendance en $\vec{a}$ aussi régulière que possible.



Considérons pour cela un "chemin" dans $\mathcal{G}$ (Fig. 1) qui part de l'origine $\mathcal{T}(\vec{0})$ et dont l'extrémité est l'opérateur $\mathcal{T}(\vec{a})$. On définit donc un opérateur $\mathcal{T}[\,\vec{c}(t)\,]$, fonction de t [$0 \leq t \leq 1$], tel que

$$\begin{aligned} \mathcal{T}[\,\vec{c}\,(0)\,] &= \mathcal{T}(\vec{0}) \\ \mathcal{T}[\,\vec{c}\,(1)\,] &= \mathcal{T}(\vec{a}) \end{aligned} \qquad (8)$$

Pour passer de $\mathcal{T}[\,\vec{c}\,(t)]$ à $\mathcal{T}[\,\vec{c}\,(t + dt)\,]$, on peut appliquer un opérateur $\mathcal{T}$ infinitésimal [le chemin est continu dans $\mathcal{G}$], que nous noterons $\mathcal{T}[\,\vec{v}\,(r)\,dt\,]$:

$$\mathcal{C}[\vec{c}\,(t+dt)] = \mathcal{C}[\vec{v}\,(t)\,dt]\quad \mathcal{C}[\vec{c}\,(t)] \qquad (9)$$

Cette relation peut servir à construire dans l'ensemble des T une "image" du chemin considéré. Dans le domaine entourant l'origine considérée plus haut, les T seront simplement les opérateurs déjà choisis pour représenter les $\mathcal{C}$ [ceux qui sont proches de 1] . Puis, on écrit la relation image de (9) :

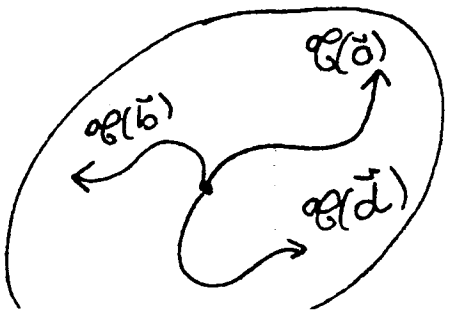
$$T[\vec{c}\,(t+dt)] = T[\vec{v}\,(t)\,dt]\quad T[\vec{c}\,(t)]$$

$$= [1 - \frac{i}{\hbar}\,\vec{v}\,(t)\,.\,\vec{G}\,dt]\quad T[\vec{c}\,(t)] \qquad (10)$$

Il est clair que cette relation conduit à sélecter pour représenter $\mathcal{C}[\vec{c}\,(t+dt)]$ l'un des N opérateurs T a priori possibles. On effectue aussi un choix de la phase des opérateurs T. Par construction même (continuité d'un produit de matrices), les opérateurs T varient continûment le long du chemin considéré (pas de saut de phase).

Nous allons supposer que le groupe $\mathcal{G}$ est tel que tout $\mathcal{C}$ peut être atteint par un chemin (continu) partant de l'origine : $\mathcal{G}$ est donc connexe . Pour chaque $\mathcal{C}(\vec{a})$, on choisit un chemin arbitraire dans $\mathcal{G}$ et on définit ainsi par continuité la phase de $T(\vec{a})$. Si le groupe $\mathcal{G}$ est simplement connexe, tous les chemins d'origine $\mathcal{C}(\vec{o})$et d'extrémité $\mathcal{C}(\vec{a})$ sont homotopes (continûment déformables l'un dans l'autre). Lors d'une déformation continue qui sert à définir $T(\vec{a})$, la phase de l'opérateur $T(\vec{a})$ ne saurait sauter discontinûment de $2\pi/N$, ou d'un multiple de cette quantité. Donc, tous les chemins dans $\mathcal{G}$ partant de l'origine $\mathcal{C}(\vec{o})$ et aboutissant à $\mathcal{C}(\vec{a})$ conduisent à la même définition de $T(\vec{a})$. En d'autres termes, il est superflu de préciser quel chemin a été pris pour définir la phase de chaque opérateur T.

Dans ces conditions, nous allons voir que tous les facteurs de phase ξ sont nécessairement nuls. Considérons en effet dans $\mathcal{G}$ deux chemins d'origine $\mathcal{C}(\vec{o})$; le premier de "mobile" $\mathcal{C}_a(t)$ aboutissant à $\mathcal{C}(\vec{a})$, le second de "mobile" $\mathcal{C}_b(t)$ aboutissant à $\mathcal{C}(\vec{b})$ [cf. Fig. 2].



La transformation produit $\mathcal{C}_d(t) = \mathcal{C}_a(t)\ \mathcal{C}_b(t)$ des deux valeurs [au même instant (t)] des $\mathcal{C}$ sur chacun de ces chemins décrit un troisième chemin dans le groupe continu $\mathcal{G}$, d'extrémité $\mathcal{C}(\vec{d})$.

Dans l'ensemble des T, ces trois chemins ont pour image trois chemins continus (où la phase des opérateurs T n'effectue aucun saut), de "mobiles" $T_a(t)$, $T_b(t)$ et $T_d(t)$. A priori, on peut avoir :

$$T_d(t) = e^{-i\xi}\ T_a(t)\ T_b(t) \qquad (11)$$

où $e^{-i\xi}$ prend l'une des valeurs quelconques (5) ; cependant, comme le produit de deux opérateurs est une fonction continue de ces operateurs, $e^{-i\xi}$ ne peut effectuer de saut discontinu et reste par suite constamment égal à un.

Nous avons donc démontré que, pour un groupe $\mathcal{G}$ simplement connexe, on peut par une simple redéfinition de la phase des opérateurs T transformer toute représentation projective en "vraie" représentation.

B - CAS OÙ $\mathcal{G}$ EST p - CONNEXE

Rappelons qu'un groupe connexe $\mathcal{G}$ est dit p-connexe s'il existe p chemins fermés (lacets) distincts non homotopes partant d'un (et aboutissant à un) même point fixe. En d'autres termes, le groupe d'homotopie Π_1 du groupe $\mathcal{G}$ possède p éléments distincts (cf. Chapitre III, § A-1-b). Si l'on considère des chemins non fermés d'origine et d'extrémités fixées, on peut regrouper en une même classe tous les chemins homotopes entre eux et obtenir ainsi p classes distinctes. Nous étudierons au Chapitre V un exemple important de groupe 2-connexe, le groupe $R_{(3)}$ des rotations.

Le raisonnement qui a été effectué au §a précédent reste valide jusqu'au moment où nous avons examiné l'influence du choix du chemin qui fixe la phase des opérateurs T. Si le groupe est 2-connexe par exemple, la phase de T peut être fixée de deux façons différentes suivant le chemin choisi, (nous raisonnons pour simplifier sur le cas p=2, mais les résultats se généralisent). Supposons donc que l'on a effectué un tel choix, bien qu'arbitraire, pour chaque opérateur $T(\vec{a})$ associé à $\mathcal{C}(\vec{a})$. Si l'on reprend le raisonnement du §a précédent schématisé sur la Figure 2, on voit que deux cas peuvent se produire :

• ou bien le "mobile" $\mathcal{C}_d(t)$ décrit un chemin qui est équivalent à celui qui a défini $T(\vec{d})$; alors, pour la même raison que précédemment :

$$T(\vec{d}) = T(\vec{a})\ T(\vec{b})$$

(pas de facteur de phase).

• ou bien le chemin décrit appartient à une autre classe (il n'y en a en fait qu'une autre puisque nous supposons p = 2) et :

$$T(\vec{d}) = e^{-i\xi(\vec{a},\vec{b})}\ T(\vec{a})\ T(\vec{b}).$$

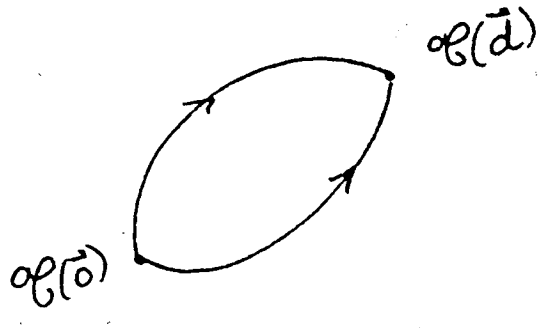
Dans cette égalité, $e^{-i\xi}$ n'est autre que la différence de phase que l'on obtient en choisissant l'une ou l'autre classe de chemin pour définir $T(\vec{d})$. Montrons que ξ ne peut perdre que l'une des valeurs :

$$\xi = a,\ \frac{2\pi}{p},\ \frac{4\pi}{p},\ \ldots,\ (p-1)\frac{2\pi}{p} \qquad (12)$$

c'est-à-dire, si p = 2 :

$$e^{-i\xi} = \pm 1 \qquad (13)$$

Pour cela, considérons deux chemins dans $\mathcal{G}$ non équivalents partant de $\mathcal{C}(\vec{o})$ et aboutissant à $\mathcal{C}(\vec{d})$. On peut définir un lacet en décrivant le premier chemin puis le second en sens inverse, lacet qui n'est pas homotope à zéro (sinon les deux chemins initiaux seraient homotopes entre eux). On peut comme en (10) construire une image continue dans l'ensemble des T de ce lacet.



En premier lieu, on décrit le chemin qui a servi à la définition de $T(\vec{d})$, puis l'autre chemin qui connecterait par continuité l'identité à $e^{-i\xi}\ T(\vec{d})$. Donc, quand le "mobile" du lacet dans $\mathcal{G}$ revient à l'origine, celui de l'image continue

dans l'ensemble des T revient à la valeur $e^{i\xi}$ x (𝟙) [au lieu de (𝟙)]. Cette image continue est donc en général, non pas un lacet, mais un chemin non-fermé. Il est clair qu'une telle situation n'est possible que parce que, par hypothèse, le lacet considéré dans $\mathcal{G}$ n'est pas continûment déformable en un chemin nul.

Effectuons maintenant dans $\mathcal{G}$ deux foix le parcours précédent : on obtient ainsi un nouveau lacet, non homotope du précédent, et donc homotope à zéro si p = 2. Cette fois, l'image dans l'ensemble des T est $e^{2i\xi}$ (𝟙) qui ne peut valoir que (𝟙) puisque le nouveau lacet est continûment déformable en un chemin nul. Donc :

$$\xi = 0, \pi \qquad \text{si} \quad p = 2 \tag{14}$$

Le raisonnement se généralise à des valeurs plus élevées de p.

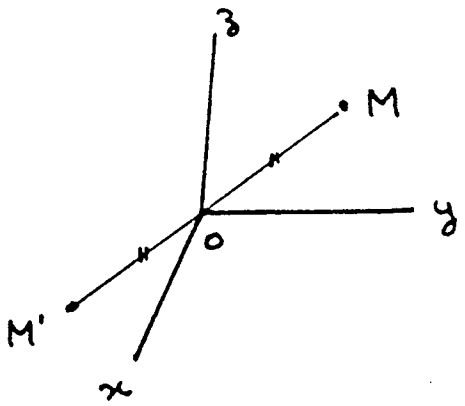
COMPLEMENT V-A

REFLEXIONS D'ESPACE (PARITE)

Nous allons étudier ici des opérations qui, comme les déplacements étudiés au Chapitre V, sont purement géométriques, tout en étant cependant de nature différente : les symétries (ou réflexions) par rapport à un point, ou encore parité (*). On sait qu'en général un objet quelconque n'est pas superposable par déplacement avec l'objet obtenu par symétrie.

1 - ACTION DANS L'ESPACE REEL

Choisissons un point donné de l'espace que nous prendrons comme origine O des axes de coordonnées Oxy z. L'opération de symétrie par rapport à O fait correspondre au point M



tel que :

$\vec{OM} = \vec{r}$ (1)

le point $\vec{M}'$ tel que :

$\vec{OM}' = \vec{r}' = -\vec{r}$ (2)

Il s'agit là d'une opération linéraire $\mathcal{S}_0$ à laquelle est associée la matrice

$$(\mathcal{S}_0) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

L'opérateur correspondant est linéaire et orthogonal (unitaire et réel), comme pour une rotation. Sa matrice se distingue cependant d'une rotation par le fait que :

$\det(\mathcal{S}_0) = -1$ [au lieu de +1] (4)

(*) On trouve également souvent employé le nom d'"inversion d'espace" ou simplement "inversion", en particulier dans les textes anglo-saxons.

On vérifie immédiatement que :

$$(\mathcal{S}_0)^2 = (1) \qquad (5\text{-a})$$

$$(\mathcal{S}_0)^{-1} = (\mathcal{S}_0) \qquad (5\text{-b})$$

Si l'on prend l'ensemble constitué de l'opérateur identité et de la symétrie par rapport au point fixe O, on obtient un groupe à deux éléments isomorphe au groupe cyclique Z_2. C'est un groupe discret et non continu (il n'existe pas d'opération de symétrie infinitésimale par rapport à un point).

La matrice $(\mathcal{S}_0)$ étant simplement l'opposée de la matrice unité (matrice scalaire), elle commute avec toute matrice 3 x 3, en particulier celles des rotations. Donc :

$$[\mathcal{S}_0 , \mathfrak{R}] = 0 \qquad (6)$$

Si l'on ajoute la matrice $(\mathcal{S}_0)$ aux matrices $(\mathfrak{R})$, on obtient le groupe orthogonal O(3) [toutes les matrices orthogonales 3 x 3, de déterminant ± 1], dont les éléments sont, soit les rotation $\mathfrak{R}$, soit leurs produits par $\mathcal{S}_0$.

Pour obtenir les relations de commutation entre $\mathcal{S}_0$ et les translations $\mathcal{T}$, on peut comme plus haut introduire des matrices 4 x 4 pour décrire les opérations [et adjoindre à $(\mathcal{S}_0)$ une ligne et une colonne de zéros, sauf l'élément où elles s'intersectent qui vaut 1]. On peut aussi raisonner géométriquement à partir de (2) et vérifier que

$$\mathcal{S}_0 \, \mathcal{T}_{\vec{\ell}} \, \vec{r} = \mathcal{S}_0 [\, \vec{r} + \vec{\ell} \,] = -\vec{r} - \vec{\ell}$$

$$\mathcal{T}_{\vec{e}} \, \mathcal{S}_0 \, \vec{r} = \mathcal{T}_{\vec{\ell}} [-\vec{r}\,] = -\vec{r} + \vec{\ell} \qquad (7)$$

et donc que :

$$[\, \mathcal{S}_0, \, \mathcal{T}_{\vec{\ell}} \,] = \mathcal{T}_{-2\vec{\ell}} \qquad (8)$$

Remarques :

(i) - L'opération de symétrie $\mathcal{S}$ peut être définie par rapport à un point A quelconque ; nous la noterons alors $\mathcal{S}_A$. On a alors :

$$\mathcal{S}_A \, \vec{r} = 2 \vec{r}_A - \vec{r} \qquad (9)$$

où $\vec{r}_A$ est le vecteur position du point A.

L'ensemble des opérations $\mathcal{S}_A$, plus l'opération identité, ne forme pas un groupe. En effet :

$$\mathcal{S}_A \mathcal{S}_B \vec{r} = 2\vec{r}_A - 2\vec{r}_B + \vec{r}$$

$$= \mathcal{T}_{2(\vec{r}_A - \vec{r}_B)} \vec{r} \qquad (10)$$

(ii) - Cette égalité permet de montrer que, si les équations du mouvement d'un système physique admettent $\mathcal{S}_A$ et l'ensemble des translations comme opération de symétrie, elles admettent alors les symétries $\mathcal{S}_B$ par rapport à un point B quelconque.

2 - OPERATEUR ASSOCIE DANS L'ESPACE DES ETATS

Commençons par envisager comme au § C-1 du Chapitre V, le cas d'une particule unique sans spin. On peut alors décrire son état quantique, soit par un vecteur d'état $|\psi\rangle$, soit par la fonction d'onde,

$$\phi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle \qquad (11)$$

Nous allons procéder de façon analogue à ce que nous avons fait pour les déplacements (Chapitre V, § C-1-c). Nous définirons l'action de l'opérateur parité S_0 qui, dans l'espace des états, est l'image de l'opération de symétrie point $\mathcal{S}_0$, par (*) :

$$S_0 | \vec{r} \rangle = | -\vec{r} \rangle \qquad (12)$$

On définit ainsi un opérateur unitaire, dont le carré vaut l'opérateur identité :

$$S_0^2 = 1 \qquad (13)$$

donc :

$$S_0 = S_0^+ = S_0^{-1} \qquad (14)$$

[voir le complément F_{II} de la référence (13) pour une étude plus détaillée].

(*) Ne pas confondre $|-\vec{r}\rangle$ et l'opposé $-|\vec{r}\rangle$ du ket $|\vec{r}\rangle$! Les kets $|-\vec{r}\rangle$ et $|\vec{r}\rangle$ sont orthogonaux (sauf si $\vec{r} = 0$) et non colinéaires.

Par suite :

$$\langle \vec{r} \mid S_0 = \langle -\vec{r} \mid \qquad (15)$$

et la fonction d'onde $\Psi'(\vec{r})$ associée au ket $S_0|\Psi\rangle$ est donnée par :

$$\psi'(r) = \langle \vec{r} \mid S_0 \mid \psi \rangle$$
$$= \langle -\vec{r} \mid \psi \rangle = \psi(-\vec{r}) \qquad (16)$$

Cette égalité donne l'action de S_0 en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$. Celle en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$peut être obtenue à partir de (12) et de l'égalité (V-109) :

$$S_0 |\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle \qquad (17)$$

Donc :

$$\bar{\psi}'(\vec{p}) = \langle \vec{p} \mid S_0 \mid \psi \rangle$$
$$= \langle -\vec{p} \mid \psi \rangle^{-} = \bar{\psi}(-\vec{p}) \qquad (18)$$

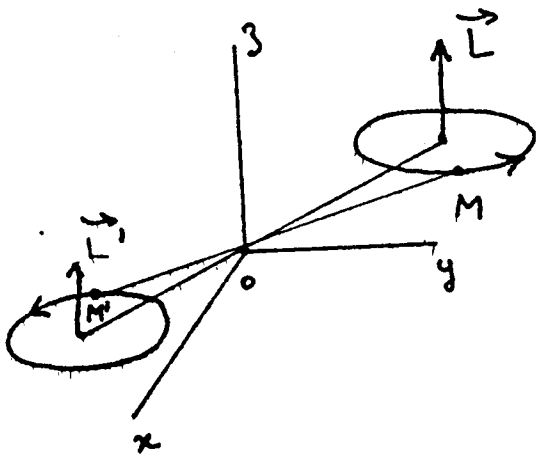
On montre facilement à partir de (12) et (17) que :

$$\begin{cases} S_0 \vec{R} S_0 = -\vec{R} \\ S_0 \vec{P} S_0 = -\vec{P} \end{cases} \qquad (19)$$

$\vec{R}$ et $\vec{P}$ sont donc des observables qui changent par parité, ce qui est satisfaisant physiquement. Par contre :

$$S_0 (\vec{R} \times \vec{P}) S_0 = S_0 \vec{L} S_0 = \vec{L} \qquad (20)$$

et $\vec{L}$ est invariant par parité (cf. Figure).



$\vec{R}$ et $\vec{P}$ correspondent à des vecteurs polaires ("vrais vecteurs"), $\vec{L}$ à un vecteur axial ("pseudo vecteur")

En électromagnétisme, le champ électrique $\vec{E}$ est également un vecteur polaire, le champ magnétique $\vec{B}$ un vecteur axial.

Si le système étudié comprend plusieurs particules 1, 2, 3, ..., l'opérateur parité S_0 est simplement le produit des opérateurs parité associés à chacune des particules :

$$S_0 = S_0(1)\ S_0(2)\ S_0(3) \ldots \tag{21}$$

Si la (ou les) particule étudiée possède un spin $\vec{S}$, on s'appuie sur (20), qui indique que le moment cinétique orbital $\vec{L}$ n'est pas affecté par la parité, pour poser :

$$S_0\ \vec{S}\ S_0 = \vec{S} \tag{22}$$

l'opérateur parité n'agit donc pas dans l'espace des états de spin (comme les opérateurs de translation).

3 - CONSERVATION DE LA PARITE

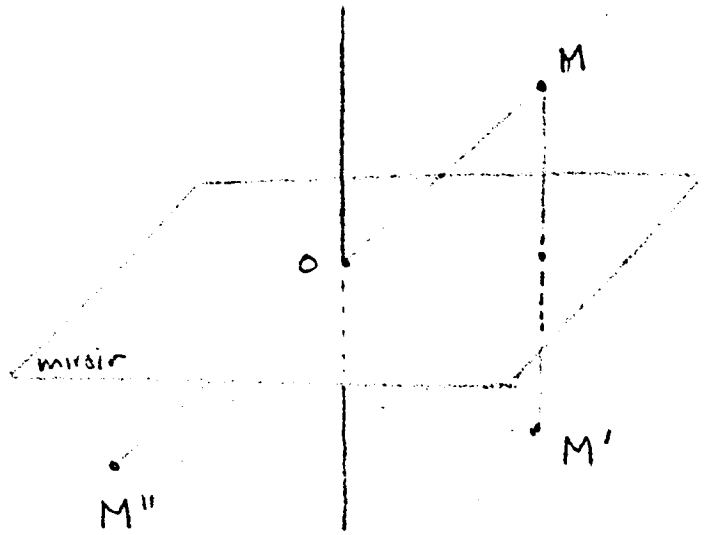
Si le système physique étudié possède un hamiltonien H indépendant du temps, la parité sera opération de symétrie à condition que :

$$[H\ ,\ S_0\ ] = 0 \tag{23}$$

S_0 est alors une constante du mouvement. On peut dans ce cas classer les états propres de H suivant la valeur propre de S_0, qui vaut ± 1 d'après (13). Dans un cas, les états propres seront dits pairs, dans l'autre impairs. Si le vecteur d'état initial $|\psi(0)\rangle$ du système est pair (ou impair), il conserve au cours du temps cette propriété : $|\psi(t)\rangle$ reste pair (ou impair) et on dit que la parité est conservée.

Si le vecteur d'état initial n'est ni pair ni impair, la condition (23) entraîne que $S_0|\psi(t)\rangle$ décrit un autre mouvement possible du système (avec le même hamiltonien). Le transformé par parité (symétrie point) d'un mouvement possible est un autre mouvement possible. On dit quelquefois de façon plus imagée que, si l'on regarde dans un miroir le mouvement d'un système, on observe un autre mouvement possible si la parité est conservée. Cette façon de dire suppose implicitement que les rotations sont des transformations de symétrie du système qui évolue, et utilise le fait que le produit d'une symétri-

par rapport à un plan (celui du miroir) par une rotation de π autour d'un axe perpendiculaire au plan et le coupant en O est simplement la symétrie par rapport au point O (Figure) :



Il est clair que les notions de droite et de gauche sont interverties par symétrie dans un miroir (ou par rapport à un point). C'est pourquoi on parle quelquefois de symétrie droite-gauche pour désigner la conservation de la parité.

Pendant longtemps, cette symétrie a été considérée plus ou moins implicitement comme évidente par les physiciens. Dans la vie courante, on sait bien que l'observation dans un miroir ne fournit pas un spectacle qui choque l'expérience de tous les jours ou l'intuition physique ; on peut par exemple projeter un film de cinéma à l'envers (inversion de la droite et de la gauche) sans faire apparaître aucun phénomène immédiatement reconnaissable comme physiquement interdit.

Ce n'est que vers les années 1955 que cette conservation de la parité a été remise radicalement en question. Le phénomène physique qui y a conduit est la désintégration par interactions faibles de la particule maintenant appelée meson K^+ en deux ou trois pions. Ces deux types de désintégration conduisent à des états finals de parités respectives +1 et -1. Si la symétrie $\mathcal{S}_0$ est une symétrie des interactions qui gouvernent la désintégration c'est que les parités des états initiaux (avant désintégration de la particule) sont différentes et donc qu'on est parti de deux particules différentes. C'est pourquoi on considérait, à l'époque, que l'on était, en fait, en présence de

deux particules distinctes, les mésons θ^+ et τ^+, qui se désintégraient respectivement en deux et trois pions.
Cependant, on constatait que le θ^+ et le τ^+ étaient par ailleurs en tous points identiques (même masse, même durée de vie, etc..,). Cette remarque a conduit Lee et Yang à supposer que les particules θ^+ et τ^+ n'étaient en réalité qu'une seule et même particule (le méson K^+), mais que les interactions faibles violaient la symétrie de parité.

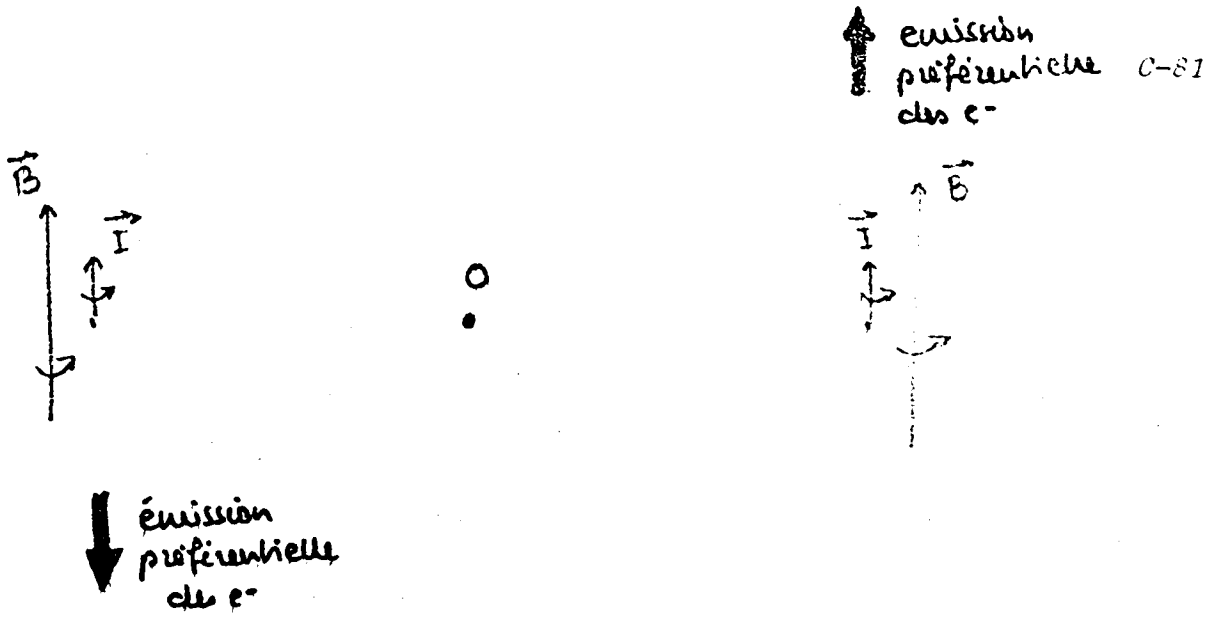
Cette hypothèse a été confirmée expérimentalement de façon éclatante par Mme Wu et ses collaborateurs. L'expérience consistait à observer la désintégration nucléaire :

$$^{60}Co \rightarrow {}^{60}Ni + e^- + \bar{\nu}_e \qquad (24)$$

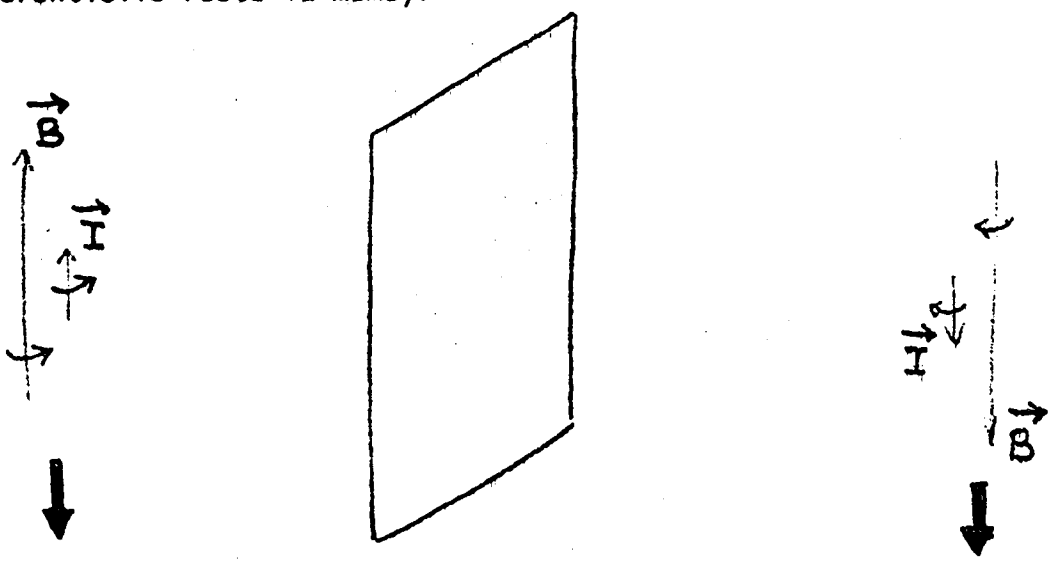
(qui est due à l'interaction faible) en partant de noyaux de Cobalt polarisés. Ces noyaux ont en effet un spin $I = 5$, une durée de vie $\tau \simeq 5{,}26$ année (ils sont radioactifs β^-) et un moment magnétique $\mu \simeq + 3{,}8\ \mu_n$ (le moment $\vec{\mu}$ est parallèle à $\vec{I}$). En plaçant des noyaux de ^{60}Co dans un champ magnétique $\vec{B}$ intense et à très basse température, on tend à l'équilibre thermodynamique à favoriser le nombre de noyaux dont le spin est parallèle à $\vec{B}$ par rapport à ceux dont le spin est antiparallèle.

L'expérience était alors la suivante : après avoir appliqué un champ $\vec{B}$, le diagramme de rayonnement (nombre d'électrons émis par unité de temps) était mesuré dans la direction de $\vec{B}$, puis dans la direction opposée. Le résultat obtenu était alors que plus d'électrons étaient émis dans la direction opposée à $\vec{B}$ (donc à $\vec{I}$) que dans la même direction. L'assymétrie observée est élevée (rapport 1,2 / 0,8 entre les intensités d'émission dans les deux directions). On peut ensuite, à titre de contrôle, renverser le champ $\vec{B}$ et les spins $\vec{I}$, de façon à vérifier que les intensités d'émission dans les deux directions sont également inversées.

Cette influence de la direction d'un vecteur axial ($\vec{B}$ ou $\vec{I}$) sur un vecteur polaire (direction d'émission préférentielle des électrons) viole la conservation de la parité. On voit par exemple que, si la parité était conservée, deux expériences symétriques par rapport à un point donneraient deux directions opposées pour la direction d'émission β^- pour les mêmes directions de $\vec{I}$ et $\vec{B}$ (voir Figure) :



Un résultat analogue est obtenu par symétrie miroir dans un plan parallèle à $\vec{B}$ (cette fois $\vec{I}$ et $\vec{B}$ sont retournés, mais la direction d'émission préférentielle reste la même).



A l'heure actuelle, on a donc renoncé à la conservation de la parité dans les interactions faibles. Insistons sur le fait que ce n'est pas un petit effet mais, en quelque sorte, un effet de 100 % (théorie du neutrino à deux composantes, et non quatre). Par contre, les interactions électromagnétiques et fortes sont considérées comme conservant strictement la parité.

COMPLEMENT V-B

REPRESENTATIONS DU GROUPE DE GALILEE DANS L'ESPACE DES ETATS D'UNE PARTICULE SANS SPIN

-:-:-:-:-:-:-

Au §C du Chapitre V nous avons construit un espace des états simple en utilisant les propriétés du groupe des déplacements, qui est un sous-groupe du groupe de Galilée. Nous allons examiner ici comment apparait dans cet espace une représentation du groupe de Galilée dans son ensemble. Nous verrons ainsi le lien qui existe entre l'opérateur de position (en représentation de Heisenberg) et le générateur $\vec{K}$ des transformations de Galilée pures. Nous obtiendrons également la forme de l'hamiltonien H de la particule Le raisonnement que nous allons effectuer est indépendant de celui, plus général, du complément IV-B, dont nous allons retrouver à cette occasion certains résultats.

1 - PARTICULE LIBRE DANS LE POINT DE VUE DE HEISENBERG

Les déplacements n'affectent pas la coordonnée de temps d'un événement $\{\vec{r},t\}$, mais ce n'est pas le cas de la transformation la plus générale du groupe de Galilée. Il faut donc que nous précisions ici la nature du système physique étudié, ainsi que la façon dont un changement de repère d'espace-temps affecte la description mathématique qui en est donnée (modification du ket $|\psi\rangle$ de l'espace des états $\mathcal{E}$). Nous allons supposer que le système est constitué d'une particule libre, de façon qu'aucun repère galiléen ne joue un rôle priviligié par rapport à un autre : il est clair que, si la particule était liée, par exemple soumise à l'action d'un potentiel attaché à un référentiel donné, tous les référentiels galiléens ne seraient

pas équivalents (*).

Considérons un observateur O muni d'un système d'axes d'espace-temps galiléen. Utilisant le point de vue de Schrödinger, il décrit la particule libre par un vecteur d'état $|\psi_S(t)>$ dont l'évolution obéit à l'équation :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_S(t)> = H(t) |\psi_S(t)> \qquad (1)$$

ou, ce qui revient au même :

$$|\psi_S(t)> = U(t,0) |\psi_S(0)> \qquad (2)$$

Dans cette égalité l'opérateur (unitaire) d'évolution U(t,0) est défini par :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} U(t,0) = H(t)\, U(t,0) \\ U(0,0) = \mathbb{1} \end{cases} \qquad (3)$$

L'hamiltonien H(t) peut en fait être pris indépendant du temps. Mathématiquement, H ne peut dépendre de t si, lorsque $|\psi_S(t)>$ est une solution quelconque de l'équation (1), $|\psi_S(t - t_0)>$ en est également solution quel que soit t_0. Nous devons donc imposer cette condition si nous voulons que deux évènements d'espace temps où la particule est "vue" par O avec les mêmes propriétés physiques (mêmes résultats de mesure pour un E,C.O,C,), mais à des instants différents t et $t+t_0$, soient tels que (**) :

$$|\psi_S \text{ (évènement 1,t)}> = |\psi_S(\text{évènement 2, } t+t_0)> \qquad (4)$$

(*) Une particule soumise à la force de rappel d'un ressort dont l'autre extrémité est fixe pour un observateur O possède des propriétés différentes vue par O ou par un autre observateur galiléen O'.

(**) Nous prenons ici le point de vue le plus simple, mais on pourrait parfaitement renoncer à (4) et avoir un hamiltonien H dépendant du temps (cf. remarque iii à la fin du §2-c), ce qui conduit à une description plus compliquée de la particule libre.

Le point de vue de Schrödinger est celui que nous avons adopté au Chapitre V ; les observables A_S de ce point de vue (position, impulsion... ne dépendent pas du temps, comme H.

Le point de vue de Heisenberg revient à reporter la dépendance en temps du vecteur d'état $|\psi>$ sur les observables A. On pose :

$$|\psi_H> = U^+(t,0)\,|\psi_S(t)> = |\psi_S(0)> \qquad (5)$$

et :

$$A_H(t) = U^+(t,0)\;A_S\;U(t,0) \qquad (6)$$

Par exemple, l'opérateur position devient, en point de vue de Heisenberg :

$$\vec{R}_H(t) = U^+(t,0)\;\vec{R}\;U(t,0) \qquad (7)$$

[par convention, nous gardons la notation $\vec{R}$ et $\vec{P}$ pour les opérateurs définis au Chapitre V, sans leur ajouter d'indice S] .

L'évènement physique que nous considérons est le suivant : à un instant donné, repéré par les horloges qui lui sont propres, l'observateur galiléen O perçoit la particule dans un état physique tel qu'il lui attribue un ket $|\psi_H>$ en prenant le point de vue de Heisenberg. Un autre observateur galiléen O' décrira le même évènement par un ket $|\psi'_H>$ qui diffère en général de $|\psi_H>$: il attribue en effet à la particule une localisation, une vitesse moyenne, etc... qui sont en général différentes de celles de O.

Remarque :

Nous supposons cependant que chaque observateur a la même façon de relier un ket mathématique à un ensemble de propriétés physiques relatives à son référentiel propre ; du moins, si les façons sont différentes, elles tiennent seulement à un facteur de phase globale du ket. Par exemple, le ket $|\psi'_H>$ aurait également pu être utilisé par O, mais pour décrire un autre évènement : celui où la particule aurait été dans un état physique ayant vis à vis de O les mêmes propriétés que l'état physique initial vis à vis de O'.

En d'autres termes, le rôle parfaitement symétrique joué par tous les référentiels galiléens entraîne une correspondance biunivoque entre évènements physiques différents, ceux qui sont perçus de la même façon par les deux observateurs O et O' ; nous supposons qu'à un facteur de phase près, les deux observateurs décrivent alors ces évènements par le même ket mathématique $|\psi_H\rangle$.

Revenant maintenant à un évènement unique décrit par O grâce à $|\psi_H\rangle$, par O' grâce à $|\psi'_H\rangle$, nous pouvons utiliser les résultats du §D du Chapitre IV pour écrire :

$$|\psi'_H\rangle = T(\vec{a}, \vec{\ell}, \vec{v}_o, t_o)\,|\psi_H\rangle \qquad (8)$$

où T est un opérateur unitaire dépendant des paramètres réels $\vec{a}$, $\vec{\ell}$, $\vec{v}_o$ et t_o qui définissent la transformation qui change le référentiel d'espace-temps de O' en celui de O (*). L'utilisation du point de vue de Heisenberg évite une dépendance en temps des opérateurs T [ainsi ces derniers, lorsqu'il sont infinitésimaux, engendrent-ils des observables en point de vue de Schrödinger].

Ecrire (8) revient à imposer que la transformation T, qui permet de passer de la description de l'évènement donnée par O à celle donnée par O', ne dépend que de la transformation de Galilée qui fait passer O à O' (ou de O' à O).

Exemple :

Considérons une translation dans le temps de paramètre t_o (décalage des horloges sans modifier les axes d'espace). Dans ce cas :

$$|\psi'_S\rangle = |\psi_S\rangle \qquad (9)$$

de sorte que :

$$|\psi'_H\rangle = U^+(t_o, 0)\,|\psi_H\rangle \qquad (10)$$

On a donc :

$$T(\vec{0}, \vec{0}, \vec{0}, t_o) = U^+(t_o, 0) \qquad (11\text{-}a)$$

Un intérêt de prendre les kets en point de vue de Heisenberg est précisément de ne pas associer l'opérateur identité à toute translation dans le temps.

(*) De cette façon, pour une translation par exemple (cf. Fig. 1 du Chapitre IV), $|\psi'_H\rangle$ décrit un système physique translaté de $+\vec{\ell}$ (et non $-\vec{\ell}$) par rapport à celui que décrit $|\psi_H\rangle$. Attribuer les paramètres $\vec{a}$, $\vec{\ell}$, $\vec{v}_o$, t_o à la transformation qui charge O' en O et non l'inverse est donc une convention commode (elle n'est pas indispensable).

Remarque :

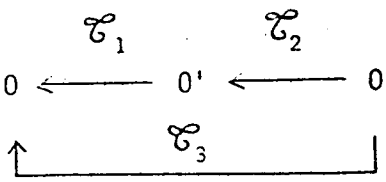
On note sur (11) que :

$$T(\vec{0}, \vec{0}, \vec{0}, \delta t_o) = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta t_o H + \ldots \qquad (11\text{-b})$$

compte tenu de la convention de signe universellement admise dans l'équation de Schrödinger (1) . Pour H, la relation (IV-59) est donc à remplacer par celle où -i est remplacé par +i ; il suffira donc, dans toutes les relations de commutation où apparaît H, de changer le signe. En pratique, on constate à l'examen des relations (III-99) qu'un changement de signe de X_H n'affecte que la dernière d'entre elles ($[X_{\vec{K}}, X_H] = X_{\vec{P}}$).

Il est possible d'effectuer de la même façon deux changements de repère galiléens successifs : $\mathcal{G}_1(\vec{a}_1, \vec{v}_1, \vec{v}_o{}^1, t_o{}^1)$ fait passer de O' à O, et $\mathcal{G}_2(\vec{a}_2, \vec{v}_2, \vec{v}_o{}^2, t_o{}^2)$ de O" à O'. La transformation de Galilée qui fait passer directement de O" à O est notée :

$\mathcal{G}_3(\vec{a}_3, \vec{v}_3, \vec{v}_o{}^3, t_o{}^3)$:



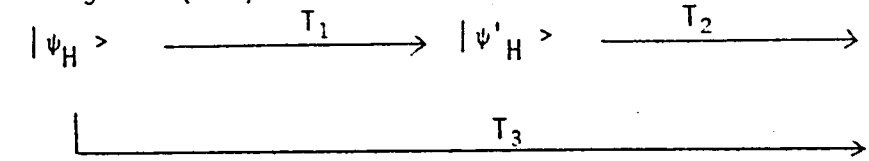
(12-a)

Il est clair que :

$$\mathcal{G}_3 = \mathcal{G}_1 \mathcal{G}_2 \qquad (13\text{-a})$$

Appelons $T_i(\vec{a}_i, \vec{v}_i, \vec{v}_o{}^i, t_o{}^i)$, où i = 1, 2, 3, les opérateurs T agissant dans l'espace des états qui sont associés aux $\mathcal{G}_i(\vec{a}_i, \vec{v}_i, \vec{v}_o{}^i, t_o{}^i)$.

L'image de (12a) est :



(12-b)

Etant données les hypothèses faites plus haut sur la façon dont chaque observateur décrit tout évènement, les kets $|\psi''_H>$ et $|\tilde{\psi}''_H>$ ne peuvent différer que par un facteur de phase globale. L'image de (13-a) est donc :

$$T_3 = e^{-i\xi(T_1, T_2)} T_1 T_2 \qquad (13\text{-b})$$

Dans l'espace des états de la particule libre, les T donnent donc une représentation projective du groupe de Galilée.

2 - GENERATEURS INFINITESIMAUX

Au § B du Chapitre V, nous avons écrit les relations de commutation entre générateurs infinitésimaux associés au groupe des déplacements géométriques ; il est apparu que les coefficients β_{ij} [cf. (IV-91) et (IV-93)] pouvaient être pris nuls dans ce cas, moyennant une redéfinition convenable des opérateurs $\vec{P}$ et $\vec{J}$. Nous allons chercher ici à procéder de même pour l'ensemble du groupe de Galilée dont les constantes de structure apparaissent dans les relations (III-99) ; au lieu de raisonner de façon complètement générale, nous supposerons que l'espace des états est celui obtenu au § C du Chapitre V, espace où les bases $\{|\vec{r}\rangle\}$ et $\{|\vec{p}\rangle\}$, les opérateurs $\vec{R}$, $\vec{P}$, $\vec{L}$ ont déjà été définis.

a - Les opérateurs H et $\vec{P}$ commutent

L'image (projective) de (III-99-g) est :

$$[\, H , \vec{P} \,] = i\hbar \vec{C} \qquad (14)$$

où $\vec{C}$ est un opérateur diagonal à 3 composantes. Posons :

$$H = \vec{C} . \vec{R} + F \qquad (15)$$

Nous obtenons alors :

$$[\, F , \vec{P} \,] = 0 \qquad (16)$$

L'opérateur inconnu F commute donc avec $\vec{P}$, de sorte qu'il est diagonal en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$ et peut s'écrire $F(\vec{P})$:

$$H = \vec{C} . \vec{R} + F(\vec{P}) \qquad (17)$$

D'autre part, les relations (V-135) et (V-136) donnent :

$$[\, R_{x_i} , J_{x_j} \,] = i\hbar \varepsilon_{ijk} R_{x_k} \qquad (18)$$

$$[\, P_{x_i} , J_{x_i} \,] = i\hbar \varepsilon_{ijk} P_{x_k} \qquad (19)$$

Compte tenu de ces deux relations et de (17), le commutateur de H et J_x s'écrit :

$$[H , J_x] = [C_x X + C_y Y + C_z Z , J_x] + [F (\vec{P}) , J_x]$$

$$= i\hbar (- C_y Z + C_z Y) + W_x (\vec{P}) \qquad (20\text{-a})$$

ou, en écriture vectorielle :

$$[H , \vec{J}] = -i\hbar \vec{C} \times \vec{R} + \vec{W} (\vec{P}) \qquad (20\text{-b})$$

où $\vec{W}$ est une fonction de $\vec{P}$. Mais l'image projective de (III-99-d) donne :

$$[H , \vec{J}] = i\hbar \vec{D} \qquad (21)$$

où $\vec{D}$ est un opérateur diagonal, qui commute donc avec $\vec{P}$. Le commutateur de (20-a) avec P_y est donc nul, ce qui nous donne [compte tenu des relations de commutation entre $\vec{R}$ et $\vec{P}$ obtenues en (V-92)] :

$$C_z = 0$$

Par permutation circulaire des indices x,y et z on montre alors que :

$$\vec{C} = 0 \qquad (22)$$

de sorte que :

$$H = F (\vec{P}) \qquad (23)$$

Ainsi :

$$[H , \vec{P}] = 0 \qquad (24)$$

[pas d'opérateur constant dans l'image de la relation (III-99-g)].

b - Générateur infinitésimal des transformations de Galilée pures

Reprenons le raisonnement du §C du Chapitre V en l'appliquant cette fois, non à un déplacement, mais une transformation de Galilée pure. Il est plus commode de revenir pour un instant au point de vue de Schrödinger, puisque c'est celui utilisé au Chapitre V (les kets $|\vec{r}>$ sont associés à un système localisé en $\vec{r}$ à l'instant t considéré, et non à un instant origine antérieur). Appelons :

$$\tilde{T} (\vec{0} , \vec{0} , \vec{v}_0 , t) \qquad (25)$$

l'opérateur unitaire associé dans ce point de vue au changement de repère galiléen :

$$|\psi'_S(t)\rangle = \tilde{T}\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \vec{v}_0\ ,\ t)\ |\psi_S\ (t)\rangle \qquad (26)$$

Revenir ensuite aux opérateurs T associés au point de vue de Heisenberg ne pose aucun problème, puisque l'égalité :

$$|\psi'_H\rangle = T\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \vec{v}_0)\ |\psi_H\rangle$$

[l'opérateur T ne dépend pas du temps, comme $|\psi_H\rangle$ et $|\psi'_H\rangle$] entraine d'après (5) :

$$T\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \vec{v}_0) = U^+(t,0)\ \tilde{T}\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \vec{v}_0\ ,\ t)\ U(t,0) \qquad (27)$$

On a donc simplement :

$$T\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \vec{v}_0) = \tilde{T}\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \vec{v}_0, t=0) \qquad (28)$$

L'analogue de la relation (V-103) est alors :

$$\tilde{T}^+\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \vec{v}_0\ ,\ t)\ \vec{R}\ \tilde{T}\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \vec{v}_0\ ,\ t) = \vec{R} + \vec{v}_0\ t \qquad (29)$$

Pour une transformation infinitésimale :

$$T\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \delta\vec{v}_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\ \delta\vec{v}_0\ .\ \vec{K} + \ldots$$
$$\tilde{T}\ (\vec{0}\ ,\ \vec{0}\ ,\ \delta\vec{v}_0\ ,\ t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\ \delta\vec{v}_0\ .\ \vec{K}_H(t) + \ldots \qquad (30)$$

avec, d'après (29) :

$$\vec{K}_H\ (t) = U^+\ (t,0)\ \vec{K}\ U\ (t,0) \qquad (31)$$
$$\vec{K} = \vec{K}_H\ (t=0)$$

La relation (27) devient alors :

$$[\ \vec{R}\ ,\ \delta\vec{v}_0\ .\ \vec{K}_H(t)\ ] = i\hbar\ t\ \delta\vec{v}_0 \qquad (32\text{-a})$$

$$[\ \vec{R}\ ,\ \delta\vec{v}_0\ .\ \vec{K}\ ] = 0 \qquad (32\text{-b})$$

La première de ces égalités est équivalente à

$$\vec{K}_H(t) = t\vec{P} - \vec{Q}(t) \tag{33}$$

où

$$[\vec{R}, \vec{Q}(t)] = 0 \tag{34}$$

de sorte que $\vec{Q}$ est un opérateur diagonal en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, qui peut s'écrire $\vec{Q}(\vec{R}, t)$. La deuxième égalité donne directement :

$$\vec{K} = -\vec{Q}(\vec{R}) \tag{35}$$

L'image projective de (III-99-f), qui exprime la commutation des $X_{\vec{P}}$ avec les $X_{\vec{K}}$, est :

$$[P_i, K_j] = ih\,\delta_{ij} \tag{36}$$

D'après (35) nous avons donc :

$$\begin{aligned}[P_i, K_j] &= -[P_i, Q_j(\vec{R})] \\ &= ih\frac{\partial}{\partial R_i} Q_j(\vec{R}) \\ &= ih\,\delta_{ij}\end{aligned} \tag{37}$$

et, par suite :

$$Q_j(\vec{R}) = \sum_i \beta_{ij} R_i + B_j \tag{38}$$

Q est donc fonction linéaire de R. L'image projective de (III-99-c) est :

$$[J_{x_i}, K_{x_j}] = ih\,\varepsilon_{ijk} K_{x_k} + ih\,C_{ij} \tag{39}$$

Ecrivons par exemple que $[J_x, K_x]$ est un opérateur diagonal. Compte tenu de (35) et (38) nous obtenons, en utilisant également (18) :

$$\begin{aligned}[J_x, Q_x] &= [J_x, \beta_{11} X + \beta_{21} Y + \beta_{31} Z] \\ &= +ih\,(\beta_{21} Z - \beta_{31} Y) \\ &= ih\,C_{11}\end{aligned} \tag{40}$$

L'opérateur C_{11} étant en fait un nombre, nous avons nécessairement $\beta_{21} = \beta_{31} = 0$ et C_{11} s'annule également. On montre de même que $\beta_{23} = 0$. Ecrivons maintenant toujours d'après (39) que

$$[J_x , K_y] = ih K_z + C_{12}$$

Compte tenu de (35) , (38) et (39), nous obtenons ici ;

$$[J_x , Q_y] = + \beta_{22} ih Z$$

$$= ih Q_z = ih (\beta_{33} Z) \qquad (41)$$

Ainsi ;

$$\beta_{22} = \beta_{33}$$

(et le même raisonnement sur $[J_y, P_z]$ donne $\beta_{11} = \beta_{22}$).

Pour finir, la matrice des coefficients β est diagonale :

$$\beta_{ij} = m \delta_{ij} \qquad (42)$$

où m est un coefficient numérique. Regroupant ce résultat avec (38) et (35), et éliminant les constantes B_j par une redéfinition de $\vec{K}$, nous obtenons :

$$\vec{K} = - m \vec{R} \qquad (43)$$

avec :

$$[J_{x_i} , K_{x_j}] = ih \varepsilon_{ijk} K_{x_k} \qquad (44)$$

$$[P_{x_i} , K_{x_j}] = ih m \delta_{ij} \qquad (45)$$

Il est aisé de déduire de (43) les relations de commutation de $\vec{K}$ avec lui-même :

$$[\vec{K} , \vec{K}] = 0 \qquad (45)$$

Nous retrouvons ainsi que $[X_{\vec{K}} , X_{\vec{K}}] = 0$.

La relation (43) permet d'exprimer très simplement l'opérateur position $\vec{R}$ sous la forme :

$$\vec{R} = - \vec{K}/m = - \vec{K}_H (t = 0)/m \qquad (47)$$

Les égalités (45) nous redonnent donc les relations de commutation canoniques :

$$[R_{x_i} , P_{x_j}] = ih \delta_{ij} \qquad (48)$$

c - Hamiltonien ; discussion physique

La relation (III-99-i) nous conduit à écrire (*) :

$$[\ \vec{K}(t)\ ,\ H(\vec{P})\ ] = -i\hbar\ \vec{P} + i\hbar\ \vec{G} \tag{49}$$

c'est-à-dire, d'après (43) :

$$i\hbar\, m\, \vec{\nabla}_{\vec{P}}\ [H(\vec{P})] = i\hbar\ \vec{P} - i\hbar\ \vec{G}$$

donc :

$$H(\vec{P}) = \frac{1}{2m}\ \vec{P}^2 - \frac{1}{m}\ \vec{G}\ .\ \vec{P} + U_I \tag{50}$$

où U_I est un opérateur diagonal. Si maintenant nous utilisons le fait que $[\ X_{\vec{J}}\ ,\ X_H\ ]$ est nul [relation (III-99-d)], nous obtenons (**) :

$$[\ \vec{J}\ ,\ H\ ] = -\frac{i\hbar}{m}\ \vec{G} \times \vec{P} = i\hbar\ \vec{Z}$$

où $\vec{Z}$ doit être un opérateur diagonal. Ce n'est pas le cas des trois composantes de $\vec{G} \times \vec{P}$, sauf si $\vec{G}$ est nul. Donc $\vec{G} = \vec{Z} = 0$ et il reste :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + U_I \tag{51}$$

A ce stade, le sens physique du paramètre m s'impose : c'est la masse de la particule. La constante U_I (énergie interne) peut être éliminée par une simple redéfinition de H, qui s'identifie alors avec l'énergie cinétique de la particule.

Une autre façon de vérifier que m est la masse de la particule est de calculer l'opérateur vitesse :

$$\vec{V}_H(t) = \frac{d}{dt}\ \vec{R}_H(t) = (i\hbar)^{-1}\ [\ \vec{R}_H(t)\ ,\ H\ ] \tag{52-a}$$

(*) Le signe moins du terme en $i\hbar\ \vec{P}$ au second membre vient du fait que nous faisons correspondre $-H$ à X_H ; voir la remarque qui suit l'égalité (11-b).

(**) On montre facilement que l'égalité (19) qui exprime le caractère vectoriel de $\vec{P}$, entraine que $\vec{J}$ commute avec $\vec{P}^2$.

c'est-à-dire :

$$\vec{V}_S = (i\hbar)^{-1} [\vec{R}, H] \qquad (52\text{-}b)$$

Compte tenu de la forme (51) de H et des relations de commutation entre $\vec{R}$ et $\vec{P}$:

$$\vec{V}_S = (i\hbar)^{-1} \frac{1}{2m} [\vec{R}, \vec{P}^2]$$

$$= \vec{P} / m \qquad (53)$$

Remarques :

(i) H et $\vec{P}$ commutant, on a $\vec{V}_S = \vec{V}_H$. Par suite, la relation (52-a) s'intègre et donne :

$$\vec{R}_H(t) = t\,\vec{P}/m + \vec{R} \qquad (54)$$

Multipliant (47) à gauche par U^+ et à droite par U, on obtient donc :

$$\vec{K}_H(t) = -m\,\vec{R}_H(t) \qquad (55)$$

qui nous montre que la fonction $\vec{Q}(r)$ écrite en (33) vaut simplement $-m\,\vec{R}$ (elle est en fait indépendante du temps).

(ii) Pour finir, le caractère projectif de la représentation n'affecte aucune des relations de commutation (III-99), sauf $[X_{\vec{P}}, X_{\vec{K}}] = 0$ qui devient la relation "canonique" de commutation (45). Nous retrouvons ainsi un résultat établi avec des arguments plus généraux dans le complément IV-B. Seules les particules de masse nulle, qui n'ont pas d'opérateur de position [cf. (42)], donneraient des représentations non-projectives du groupe de Galilée.

(iii) Les conclusions que nous avons obtenues et en particulier la forme de l'hamiltonien H dépendent des hypothèses qui ont été faites, en particulier dans la première remarque du §1 (les divers observateurs ont la même façon de relier kets mathématiques et propriétés physiques relatives à leur référentiel). Par exemple, on sait qu'une transformation de jauge peut être effectuée (même en l'absence de forces extérieures). Si l'on pose :

$$\vec{A}(\vec{R}, t) = \vec{\nabla}\chi(\vec{R}, t)$$

$$U = -\frac{\partial}{\partial t}\chi(\vec{R}, t) \qquad (56)$$

où χ est une fonction quelconque de $\vec{R}$ et de t, on obtient une autre description de la particule libre, d'hamiltonien :

$$H = \frac{1}{2m}[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R}, t)]^2 + qU(\vec{R}, t) \qquad (57)$$

Si, de plus, on convient que chaque observateur O prenne un choix différent pour la fonction χ, on arrive à une situation compliquée où pratiquement toutes les conclusions précédentes tombent. _____ . Cependant, même si la description mathématique est différente, le contenu physique de la théorie reste le même, l'invariance galiléenne étant simplement masquée dans un tel point de vue.

3 - PARTICULE EN INTERACTION

Supposons maintenant que la particule n'est plus libre, mais interagit par exemple avec une autre particule supposée infiniment lourde et donc fixe dans le repère d'un certain observateur galiléen O_{ref}. Il est alors clair que tous les observateurs galiléens ne sont plus équivalents de sorte que les raisonnements des §§ 1 et 2 précédents tombent. On s'attend d'ailleurs bien à ce que l'hamiltonien H comprenne dans ce cas des termes autres que d'énergie cinétique ; H n'a aucune raison a priori d'être le même pour tous les observateurs O possibles.

Nous allons cependant essayer de prolonger les raisonnements et, moyennant quelques hypothèses raisonnables, nous verrons que cela est possible. Il est clair que, parmi toutes les relations de commutation (III-99), nous devons renoncer à toutes celles qui contiennent X_H, à savoir (III-99-d), (III-99-g) et (III-99-i). Par contre, nous allons chercher à utiliser celles qui restent ; en quelque sorte, nous renonçons à toutes les opérations où intervient le temps et, si nous envisageons une transformation de Galilée, ne l'étudierons qu'au temps t = 0 (point de vue "instantané").

Chaque observateur galiléen peut effectuer toutes les opérations décrites au §C du Chapitre V : définition d'une base $\{|\vec{r}\rangle\}$, d'un opérateur $\vec{P}$ et de :

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} \qquad (58)$$

et établissement des relations de commutation du type :

$$\left[R_i , P_j \right] = i\hbar \, \delta_{ij} \tag{59}$$

A un instant donné, chaque observateur utilise un ket

$$| \psi > = \int d^3 r \; \psi(\vec{r}) \; | \vec{r} > \tag{60}$$

pour décrire la particule.

Cherchons dans ces conditions quel peut être l'opérateur $\vec{K}$ qui fait passer du ket $|\psi>$ de l'observateur O à celui $|\psi'>$ de l'observateur O' dont la vitesse vaut $-\delta\vec{v}_o$ dans le référentiel de O :

$$|\psi'> = (1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{v}_o \cdot \vec{K}) \, |\psi> \tag{61}$$

Quel que soit $|\psi>$, une telle opération instantanée ne doit pas changer valeur moyenne $<\vec{R}>$ de la position de la particule. Donc :

$$[\vec{K} , \vec{R}] = 0 \tag{62}$$

ce qui permet d'écrire :

$$\vec{K} = \vec{K} (\vec{R}) \tag{63}$$

Pour aller plus loin, nous ferons l'hypothèse que les relations de commutation (45) restent valables pour la particule en interaction (l'interaction ne change pas les relations de commutation entre générateurs infinitésimaux de transformation de Galilée "instantanées" et de translation). Alors (63) nous donne :

$$\frac{\partial K_i}{\partial X_j} = - m \, \delta_{ij} \tag{64}$$

c'est-à-dire :

$$\vec{K} = - m \vec{R} \tag{65}$$

La relation (47) est donc toujours valide dans ce cas.

Examinons de quelle façon se transforme $\vec{P}$ par changement de référentiel galiléen. Il vient d'après (59) et (65) :

$$(1 + \frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{v}_o \cdot \vec{K})\,\vec{P}\,(1 - \frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{v}_o \cdot \vec{K}) = \vec{P} + m\,\delta\vec{v}_o \qquad (66)$$

L'impulsion $\vec{P}$ se transforme ainsi exactement comme le produit $m\vec{V}$ de la masse de la particule par sa vitesse. La différence $\vec{P} - m\vec{V}$ est donc invariante dans la transformation. Si cette différence (nous faisons ici une autre hypothèse) s'exprime par le même opérateur pour les deux observateurs O et O', elle commute donc avec $\vec{K}$, c'est-à-dire $\vec{R}$. Par suite :

$$\vec{P} - m\vec{V} = \vec{A}(\vec{R}, t) \qquad (67\text{-a})$$

ou

$$\vec{P} = m\vec{V} + \vec{A}(\vec{R}, t) \qquad (67\text{-b})$$

l'opérateur à 3 composantes $\vec{A}(\vec{R}, t)$ est un opérateur quelconque a priori.

Calculons maintenant le commutateur de $\vec{R}$ et de $\vec{V}^2$. Comme d'après (62) et (54) :

$$[R_{x_i}, V_{x_j}] = \frac{i\hbar}{m}\,\delta_{ij} \qquad (68)$$

il vient

$$\left[\vec{R}, \frac{1}{2} m \vec{V}^2\right] = i\hbar\,\vec{V} \qquad (69)$$

Or nous attendons physiquement que l'opérateur vitesse soit lié à $\vec{R}$ par

$$\vec{V}_H(t) = \frac{d}{dt}\,\vec{R}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[\vec{R}_H(t), H] \qquad (70)$$

Comme $\vec{R}_H(t = 0) = \vec{R}$ il découle de (69) et (70) que l'opérateur

$$H - \frac{1}{2} m\vec{V}^2$$

commute avec $\vec{R}$. Ceci impose que

$$H = \frac{1}{2} m \vec{V}^2 + U(\vec{R}) \qquad (71)$$

Nous avons ainsi obtenu la forme de H qui, d'après (67), peut encore s'écrire :

$$H = \frac{1}{2m}\,[\vec{P} - \vec{A}(\vec{R}, t)]^2 + U(\vec{R}, t) \qquad (72)$$

Nous retrouvons ainsi, de façon extrêmement générale, l'hamiltonien d'une particule placée dans un potentiel vecteur $\vec{A}$ et scalaire U (à la charge près de la particule que nous avons prise égale à 1 par convention).

Remarques :

(i) Il est possible de continuer le raisonnement plus loin et de comparer les hamiltoniens H et H' de deux observateurs galiléens différents O et O'. L'hamiltonien H a été construit de façon que, compte tenu des relations (67) qui lient $\vec{P}$ et $\vec{V}$, la vitesse se transforme de façon convenable en passant du référentiel de O à celui de O'. Ceci n'est pas suffisant pour assurer l'invariance galiléenne de la théorie. Par hypothèse, la fonction $\vec{A}(\vec{R}, t)$ est la même pour tous les observateurs ; en est-il de même pour $U(\vec{R}, t)$? Nous allons voir que non.

Introduisons l'opérateur $\vec{\Gamma}_H(t)$ associé à l'accélération par :

$$\vec{\Gamma}_H(t) = \frac{d}{dt} \vec{V}_H(t)$$

$$= \frac{i}{\hbar} [\vec{V}_H(t) , H] + U^+(t , 0) \frac{d\vec{V}}{dt} U(t , 0) \qquad (73)$$

Un calcul simple donne [cf. par exemple formule (43) du complément E_{VI} de la référence (13)] :

$$[\frac{m}{2} \vec{V}^2 , \vec{V}] = \frac{i\hbar}{2m} [\vec{V} \times \vec{B}(\vec{R} , t) - \vec{B}(\vec{R} , t) \times \vec{V}] \qquad (74)$$

$$\vec{B}(\vec{R} , t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{R} , t) \qquad (75)$$

Cet opérateur correspond au champ magnétique qui dérive du potentiel vecteur $\vec{A}$. D'autre part, d'après (67-b) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{V}(t) = - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{R} , t) \qquad (76)$$

Comme, enfin :

$$[U(\vec{R}) , \vec{V}] = i\hbar \vec{\nabla} U(\vec{R} , t) \qquad (77)$$

Nous obtenons :

$$m \vec{\Gamma}_H(t) = \frac{1}{2} [\vec{V} \times \vec{B}(\vec{R} , t) - \vec{B}(\vec{R} , t) \times \vec{V}]$$

$$- \vec{\nabla} U(\vec{R} , t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{R} , t) \qquad (78)$$

Cette égalité fait apparaître, en plus de la force magnétique, la force électrique associée au champ $\vec{E}$;

$$\vec{E}(\vec{R} , t) = - \vec{\nabla} U(\vec{R} , t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{R} , t) \qquad (79)$$

Il est clair que, pour deux observateurs O et O', les calculs de l'accélération doivent conduire au même résultat. Le fait que $\vec{A}$ soit une quantité invariante par changement de repère galiléen entraîne :

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \equiv \vec{A}(\vec{r}', t)$$

avec :

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{v}_o t$$

et donc :

$$dA_x = \vec{dr} \cdot \vec{\nabla} A_x + dt \frac{\partial}{\partial t} A_x$$

$$= \vec{dr}' \cdot \vec{\nabla}' A_x + dt' \frac{\partial}{\partial t'} A_x$$

ou encore :

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{A} = \frac{\partial}{\partial t'} \vec{A} + \vec{v}_o \cdot \vec{\nabla} \vec{A} \qquad (80)$$

Pour finir, les accélérations dans les deux référentiels O et O' seront les mêmes si :

$$\frac{1}{2} [\vec{V} \times \vec{B}(\vec{R}, t) - \vec{B}(\vec{R}, t) \times \vec{V}] - \vec{\nabla} U(\vec{R}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{R}, t)$$

$$= \frac{1}{2} \left([\vec{V} + \vec{v}_o] \times \vec{B}(\vec{R}, t) - \vec{B}(\vec{R}, t) \times [\vec{V} + \vec{v}_o] \right)$$

$$- \vec{\nabla} U'(\vec{R}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{R}, t) + \vec{v}_o \cdot \vec{\nabla} A(\vec{R}, t)$$

c'est-à-dire :

$$\vec{\nabla} [U'(\vec{R}, t) - U(\vec{R}, t)] = \vec{v}_o \times \vec{B}(\vec{R}, t) + \vec{v}_o \cdot \vec{\nabla} \vec{A}(\vec{R}, t)$$

Comme :

$$\vec{\nabla} [\vec{v}_o \cdot \vec{A}] = \vec{v}_o \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) + \vec{v}_o \cdot \vec{\nabla} \vec{A}$$

Il vient simplement :

$$U'(\vec{R}, t) - U(\vec{R}, t) = \vec{v}_o \cdot \vec{A}(\vec{R}, t) + U_o(t)$$

où l'opérateur diagonal U_o peut être pris nul.

Il faut donc prendre garde que, contrairement à $\vec{A}$, le potentiel scalaire n'est pas invariant dans une transformation de Galilée. Par suite, le passage de l'hamiltonien H d'un référentiel à celui H' d'un autre ne se fait pas simplement en appliquant à H la même transformation unitaire qu'au vecteur d'état [d'après (71), une telle transformation changerait H en $H + m \vec{v}_0 \cdot \vec{V}$ ce qui n'est pas la valeur de H'].

(ii) On connait les propriétés d'invariance de jauge de l'hamiltonien (72) auquel nous sommes arrivés par des considérations d'invariance de Galilée. Les deux types d'invariance ont donc un certain lien.

Comme dans le cas d'une particule libre, rien n'empêche de supposer en théorie que chaque observateur utilise une jauge différente pour décrire la particule. Les conclusions précédentes tombent alors : un changement de repère galiléen ne transforme plus nécessairement $\vec{P}$ en $\vec{P} + m \delta\vec{v}_0$, etc... On comprend donc la nécessité que nous avons rencontrée de faire un certain nombre d'hypothèses simplificatrices pour particulariser la description utilisée par chaque observateur.

COMPLEMENT VI - A

HOMOMORPHISME ENTRE LES MATRICES DE SU(2) ET CELLES DE ROTATION

Dans ce complément, nous allons montrer qu'il existe un homomorphisme appliquant le groupe SU(2) sur le groupe SO(3), c'est-à-dire qu'il est possible d'établir une correspondance entre chaque matrice de SU(2) et une matrice de SO(3) telle qu'au produit matriciel dans SU(2) corresponde le produit dans SO(3). Rappelons que, par définition, SU(2) est le groupe des matrices 2 x 2 unitaires et unimodulaires (déterminant de U = +1), et que SO(3) est le groupe des matrices de rotation dans l'espace ordinaire [groupe $R_{(3)}$], c'est-à-dire des matrices 3 x 3, orthogonales (unitaires et réelles) et unimodulaires. Nous avons déjà noté que chacun de ces deux groupes de Lie est de dimension 3.

▪ (1) L'expression générale $M(\vec{a})$ des matrices de SU(2) a déjà été donnée en (III - 76) ou (VI - 28) [dans cette dernière formule, on remplace ϕ par a, module du paramètre vectoriel $\vec{a} = a\vec{u}$]. Si l'on veut obtenir toutes les matrices de SU(2) dont le paramètre $\vec{a}$ est parallèle à une direction $\vec{u}$ donnée, il faut faire varier a entre 0 et 4π, comme le montre la Figure III - 11. Quant aux matrices de rotation, elles ont été étudiées au § A-2 du Chapitre V, où nous les avons également décrites par un paramètre $\vec{a}$, mais dont le module a est limité à π (cf. Figure V - 3).

Considérons maintenant un vecteur $\vec{P}$ quelconque de l'espace réel à 3 dimensions, et notons P_x, P_y et P_z ses composantes. On peut lui associer une matrice hermitique 2 x 2, la matrice ρ définie par (*):

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{\sigma}.\vec{P})$$

$$= \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z) \qquad \text{(VI - A-1)}$$

(*) *ρ peut être interprétée comme la matrice densité d'un spin 1/2 (référence (13), complément E_{II}), à condition que $P = \sqrt{P^2} < 1$. La valeur moyenne de ce spin est alors $\langle \vec{S} \rangle = \hbar/2\, \vec{P}$. Si $P = 0$, le spin n'est pas polarisé ; si $P = 1$, il est totalement polarisé (état pur).*

Cette interprétation possible de ρ comme une matrice densité est la seule raison pour laquelle figure le terme $\mathbb{1}$ dans (VI - A-1). Si l'on préfère, on peut très bien supprimer ce terme diagonal dans toute la suite sans rien changer au raisonnement, l'ensemble des matrices ρ est alors celui des matrices 2 x 2 hermitiques de trace nulle (c'est un espace vectoriel de dimension 3).

où $\mathbb{1}$ est la matrice unité 2 x 2 et σ_x, σ_y, σ_z sont les trois matrices de Pauli [définitions (III - 62)]. Ces matrices ont les propriétés bien connues :

$$\sigma_{x_i}^2 = 1 \qquad \text{(VI - A-2a)}$$

$$\mathrm{Tr}\,\{\sigma_{x_i}\} = 0 \qquad \text{(VI - A-2b)}$$

$$(\vec{\sigma}.\vec{A})\,(\vec{\sigma}.\vec{B}) = \vec{A}.\vec{B}\,\mathbb{1} + i\vec{\sigma}.(\vec{A} \times \vec{B}) \qquad \text{(VI - A-2c)}$$

où $\vec{A}$ et $\vec{B}$ sont deux vecteurs constants donnés. On en déduit que :

$$\vec{P} = \langle\vec{\sigma}\rangle = \mathrm{Tr}\,\{\rho\vec{\sigma}\} \qquad \text{(VI - A-3)}$$

et

$$\rho^2 = \frac{1}{4}\,(1 + 2\vec{\sigma}.\vec{P} + \vec{P}^2) \qquad \text{(VI - A-4)}$$

de sorte que :

$$\mathrm{Tr}\{\rho^2\} = \frac{1}{2}(1 + \vec{P}^2) \qquad \text{(VI - A-5)}$$

On peut d'autre part facilement vérifier que lorsque $\vec{P}$ est réel et quelconque, l'égalité (VI - A-1) donne la matrice 2 x 2 hermitique la plus générale de trace égale à 1.

A toute matrice ρ, on peut associer par l'intermédiaire de chaque matrice $M(\vec{a})$ de SU(2) la matrice :

$$\rho' = M(\vec{a})\,\rho M^{+}(\vec{a}) \qquad \text{(VI - A-6)}$$

Comme ρ, la matrice ρ' est hermitique et de trace unité, elle peut donc être décomposée sous la forme :

$$\rho' = \frac{1}{2}\,(1 + \vec{\sigma}.\vec{P}') \qquad \text{(VI - A-7)}$$

où $\vec{P}'$ est réel. Donc, la correspondance entre ρ et ρ' donnée par $M(\vec{a})$ peut également être considérée comme une correspondance $\mathcal{R}$ entre deux vecteurs $\vec{P}$ et $\vec{P}'$ de l'espace réel à 3 dimensions :

$$\vec{P} \;\Longrightarrow\; \rho \xrightarrow{M(\vec{a})} \rho' \;\mathcal{R}\; \rho' = M(\vec{a})\,\rho M^{+}(\vec{a}) \;\Longrightarrow\; \vec{P}' \qquad \text{(VI-A-8)}$$

En d'autre termes, à toute matrice M de SU(2), nous associons une transformation du vecteur $\vec{P}$. Nous allons montrer que la transformation $\mathcal{R}$ est une rotation.

▪ (2) On peut exprimer $\vec{P}'$ en fonction de $\vec{P}$ par l'égalité :

$$\vec{P}' = Tr\ \{\rho'\vec{\sigma}\} = Tr\ \{M(\frac{1 + \vec{\sigma}.\vec{P}}{2})\ M^{+}\vec{\sigma}\} \qquad (VI - A\text{-}9)$$

qui indique que $\vec{P}'$ est fonction linéaire de $\vec{P}$. Nous pouvons donc écrire :

$$\vec{P}' = (\mathcal{R})\ \vec{P}$$

où $(\mathcal{R})$ est une matrice 3 x 3. D'autre part :

$$Tr\ \{\rho'^2\} = Tr\ \{M\rho M^{+}\ \ M\rho M^{+}\}$$

$$= Tr\ \{M\rho^2 M^{+}\} \ = Tr\ \{\rho^2\} \qquad (VI - A\text{-}10)$$

(d'après l'invariance de la trace par permutation circulaire des opérateurs) et, comme en (VI - A-5) :

$$Tr\ \{\rho'^2\} = \frac{1}{2}\ (1 + \vec{P}^2) \qquad (VI - A\text{-}11)$$

donc :

$$\vec{P}'^2 = \vec{P}^2 \qquad (VI - A\text{-}12)$$

de sorte que la transformation linéaire qui permet de passer de $\vec{P}$ à $\vec{P}'$ ne change pas la longueur des vecteurs (*). C'est donc, soit une rotation autour de l'origine, soit le produit d'une rotation et d'une symétrie par rapport à l'origine. En fait, cette dernière éventualité doit être exclue. En effet, les deux possibilités peuvent être distinguées par le fait que le déterminant de $(\mathcal{R})$ vaut +1 dans le premier cas (rotation pure), -1 dans le second (produit d'une rotation par une symétrie point). Si l'on choisit pour M la matrice $\mathbb{1}$, on a $\vec{P}' = \vec{P}$ et ce déterminant vaut 1. Or, toute matrice M de SU(2) peut être obtenue par variation continue des paramètres à partir de la matrice $\mathbb{1}$, et le déterminant de $(\mathcal{R})$ ne peut sauter de façon discontinue entre +1 et -1. Donc, $(\mathcal{R})$ est une matrice de rotation, c'est-à-dire une matrice de SO(3).

(*) Si ρ est interprétée comme la matrice densité d'un spin 1/2, ceci correspond au fait que le degré de polarisation du spin n'est pas chang dans la transformation unitaire M.

▪ (3) Prenons alors deux matrices M et M' de SU(2). Si nous appliquons la transformation unitaire M, puis la transformation M' à ρ, nous obtenons :

$$\rho'' = M'\rho M'^{+} = M'M\rho\, M^{+} M'^{+} \qquad \text{(VI - A-13)}$$

comme :

$$(M'M)^{+} = M^{+} M'^{+} \qquad \text{(VI - A-14)}$$

c'est bien la matrice obtenue directement par la transformation unitaire associée au produit M'M des matrices. Par ailleurs, on a :

$$\vec{P}'' = (\mathcal{R})'\, \vec{P}' = (\mathcal{R}')\,(\mathcal{R})\, \vec{P} \qquad \text{(VI - A-15)}$$

et le produit $(\mathcal{R}')\,(\mathcal{R})$ est bien associé au produit des matrices M correspondantes. Ceci établit donc que la correspondance :

$$M \Longrightarrow (\mathcal{R}) \qquad \text{(VI - A-16)}$$

est un homomorphisme.

Ce n'est pas un isomorphisme (elle n'est pas biunivoque). En effet, on remarque immédiatement sur (VI - A-6) que deux matrices opposées, M et -M, donnent les mêmes matrices ρ', et donc la même transformation $\vec{P} \Longrightarrow \vec{P}'$. Nous allons donc voir que, inversement, si deux matrices M_1 et M_2 correspondent à la même rotation $(\mathcal{R})$, elles sont soit égales, soit opposées.

Commençons par remarquer que la transformation unitaire M peut être définie comme celle qui fait passer du système des deux vecteurs propres orthonormés $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ de ρ à celui des deux vecteurs propres orthonormés $|\phi'_1\rangle$ et $|\phi'_2\rangle$ de ρ', En effet :

$$\rho|\phi_1\rangle = p_1\, |\phi_1\rangle \qquad 1 = 1,2 \qquad \text{(VI - A-17)}$$

(p_1 est réel) entraîne :

$$\rho' M\, |\phi_1\rangle = M\, \rho M^{+} M\, |\phi_1\rangle$$

$$= M\rho\, |\phi_1\rangle = p_1\, M\, |\phi_1\rangle \qquad \text{(VI - A-18)}$$

Si les deux valeurs propres p_1 et p_2 ne sont pas dégénérées, on a donc nécessairement :

$$|\phi'_1\rangle = e^{i\alpha_1} M\, |\phi_1\rangle \qquad 1 = 1,2 \qquad \text{(VI - A-19)}$$

(où α_1 est réel) et les valeurs propres de ρ' sont les mêmes que celles de ρ.

Supposons maintenant qu'on ait deux matrices M_1 et M_2, qui soient associées à la même rotation ($\mathcal{R}$), et qui par suite, fassent correspondre la même matrice ρ' à toute matrice ρ (hermitique et de trace unité) :

$$M_1 \rho M_1^+ = M_2 \rho M_2^+ \qquad \text{(VI - A-20)}$$

Par suite, on aura :

$$M_2^+ M_1 \rho M_1^+ M_2 = \rho \qquad \text{(VI - A-21)}$$

quelle que soit la matrice ρ choisie. Appelons M_0 la matrice de SU(2) la plus générale qui corresponde à l'opération identité pour $\vec{P}$. Nous voyons que :

$$M_2^+ M_1 = M_0 \qquad \text{(VI - A-22a)}$$

ou encore :

$$M_1 = M_2 M_0 \qquad \text{(VI - A-22b)}$$

Connaissant une matrice M_2, l'ensemble des matrices M_1 qui sont associées à la même rotation ($\mathcal{R}$) peut être obtenu par multiplication par l'ensemble des matrices M_0 associées à la rotation identité.

Montrons maintenant que l'ensemble des matrices M_0 ne comprend que la matrice unité ($\mathbb{1}$), et son opposée. Pour cela, utilisons la propriété démontrée plus haut concernant les vecteurs propres $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ de ρ. Ces vecteurs propres forment une base orthonormée quelconque de l'espace à 2 dimensions où agissent les matrices M ; seule une matrice scalaire [proportionnelle à ($\mathbb{1}$)] peut admettre toutes ces bases comme bases propres. Donc :

$$M_0 = c\,(\mathbb{1}) \qquad \text{(VI -1-23)}$$

où c est une constante complexe. L'unitarité de M_0 entraîne que $|c| = 1$ et donc $c = e^{i\beta}$ où β est réel. On obtient alors :

$$\det M_0 = e^{2i\beta} \det(\mathbb{1}) = e^{2i\beta} \qquad \text{(VI - A-24)}$$

qui ne peut valoir 1 que si $\beta = n\pi$ [où n est entier] . Pour finir, il reste :

$$M_0 = \pm(\mathbb{1}) \qquad \text{(VI - A-25)}$$

Donc, seules des matrices opposées de SU(2) correspondent à la même rotation ($\mathcal{R}$). Inversement, une rotation donnée correspond à deux matrices, M et -M, de SU(2). Ces deux matrices appartiennent respectivement aux sous-ensembles notés $SU(2)_+$ et $SU(2)_-$ dans le § B-3 du Chapitre III.

▪ (4) Montrons maintenant que la correspondance (VI - A-16) entre matrices unitaires M et rotations $\mathcal{R}$ est bien celle que nous avons obtenue dans le Chapitre VI. Nous verrons à cette occasion que cette correspondance permet d'obtenir toutes les matrices de rotation [ce qui est rendu vraisemblable par le fait que les matrices de SU(2), comme celles de SO(3), dépendent de 3 paramètres].

Commençons par prendre dans (III-67) un paramètre $\delta\vec{a} = \vec{u}\delta a$ infinitésimal . Alors :

$$M(\delta\vec{a}) = (\mathbb{1}) - i\frac{\delta a}{2}[\, u_x\sigma_x + u_y\sigma_y + u_z\sigma_z \,] \qquad \text{(VI - A-26)}$$

[c'est cette égalité qui nous a permis en (III-68) d'introduire σ_x, σ_y, σ_z comme opérateur de l'algèbre de Lie de SU(2)] de sorte que (VI - A-6) devient :

$$\rho' = M(\delta\vec{a})\,\rho\,M^+(\delta\vec{a}) = \rho - i\frac{\delta a}{2}[\, u_x\sigma_x + u_y\sigma_y + u_z\sigma_z,\ \rho \,]$$

$$= \rho - i\frac{\delta a}{2}[\, u_x\sigma_x + u_y\sigma_y + u_z\sigma_z,\ \vec{\sigma}.\vec{P} \,] \qquad \text{(VI-A-27)}$$

En développant le produit $\vec{\sigma}.\vec{P}$ et en utilisant la relation :

$$[\,\sigma_x,\ \sigma_y\,] = 2i\sigma_z \qquad \text{(VI - A-28)}$$

(et celles obtenues par permutation circulaire des indices x, y, et z), on obtient :

$$\rho' - \rho = \frac{\delta a}{2}(u_yP_z - u_zP_y)\,\sigma_x + (u_zP_x - u_xP_z)\,\sigma_y + (u_xP_y - u_yP_x)\,\sigma_z \qquad \text{(VI - A-29)}$$

c'est-à-dire :

$$\vec{P}' - \vec{P} = \delta a\,\vec{u} \times \vec{P} \qquad \text{(VI - A-30)}$$

C'est bien la formule qui donne une rotation infinitésimale du vecteur $\delta\vec{a}$. Par suite, à chaque matrice (VI-28) infinitésimale, repérée par le paramètre $\delta\vec{a}$, correspond bien la rotation de même paramètre.

Par intégration de ces opérations infinitésimales dans SU(2) et SO(3), on vérifie ensuite que la correspondance entre tout vecteur $\vec{a}$ (avec $|a| < \pi$) définissant une matrice M donne la rotation de même paramètre $\vec{a}$. En particulier, toutes les rotations peuvent ainsi être obtenues.

Remarque :

On peut d'ailleurs facilement raisonner sur des matrices associées à des valeurs finies de $\vec{a}$. Si l'on choisit, dans (III-67) le vecteur $\vec{u}$ parallèle à O_z, on obtient la matrice :

$$M = \begin{pmatrix} e^{-ia/2} & 0 \\ 0 & e^{ia/2} \end{pmatrix} = e^{-ia\sigma_z/2} \qquad \text{(VI - A-31)}$$

de sorte que (VI - A-6) devient :

$$\rho' = M\rho M^{+} = \frac{1}{2}\left[1 + e^{-ia\sigma_z/2}\ \vec{P}.\vec{\sigma}\ e^{ia\sigma_z/2}\right] \qquad \text{(VI - A-32)}$$

Un calcul élémentaire sur des matrices 2 x 2 donne alors :

$$\begin{aligned} e^{-ia\sigma_z/2}\ \sigma_x\ e^{ia\sigma_z/2} &= \cos a\ \sigma_x + \sin a\ \sigma_y \\ e^{-ia\sigma_z/2}\ \sigma_y\ e^{ia\sigma_z/2} &= \sin a\ \sigma_x + \cos a\ \sigma_y \qquad \text{(VI - A-33)} \\ e^{i-a\sigma_z/2}\ \sigma_z\ e^{a\sigma_z/2} &= \sigma_z \end{aligned}$$

Donc, par substitution dans ρ', il vient :

$$\begin{cases} P'_x = \cos a\ P_x - \sin a\ P_y \\ P'_y = \sin a\ P_x + \cos a\ P_y \qquad \text{(VI - A-34)} \\ P'_z = P_z \end{cases}$$

qui correspond à une rotation autour de O_z d'un angle $\phi = a$.

Choisissons maintenant $\vec{u}$ parallèle à Oy. La matrice M est alors réelle :

$$M = \begin{pmatrix} \cos a/2 & -\sin a/2 \\ \sin a/2 & \cos a/2 \end{pmatrix} = e^{-ia\sigma_y/2} \qquad \text{(VI - A-35)}$$

Un calcul du même type donne :

$$\begin{aligned} P'_x &= \sin a \; P_z + \cos a \; P_y \\ P'_y &= P_y \\ P'_z &= \cos a \; P_z - \sin a \; P_y \end{aligned} \qquad \text{(VI - A-36)}$$

On a maintenant pour ($\mathcal{R}$) une rotation autour de Oy d'angle $\phi = a$

Il ne nous reste maintenant plus qu'à utiliser la formule (V-18) pour établir que, par produit de rotation autour de Oz et Oy, une rotation ($\mathcal{R}$) quelconque peut être obtenue.

▪ (5) Nous avons donc établi une correspondance (non biunivoque) entre chaque matrice M de SU(2) et chaque matrice de rotation ($\mathcal{R}$). Si $\vec{a}$ appartient à la sphère de diamètre 2π accessible dans le cas des rotations [la matrice M appartient à $SU(2)_+$] , la correspondance a lieu par la même valeur de a. Par contre, si $\pi < a < 2\pi$ [la matrice M est dans $SU(2)_-$] , on pose :

$$\vec{a}' = \vec{a} - 2\pi \frac{\vec{a}}{a} \qquad \text{(VI - A-37)}$$

ce qui ramène le paramètre dans la sphère en question, ne fait que changer M en -M et donne le paramètre de la rotation associée. Du point de vue de la Figure III-13, on ramène tous les points de la sphère de droite [ensemble $SU(2)_-$] sur les points ayant la même position par rapport au centre de celle de droite [ensemble $SU(2)_+$]. Dans cette correspondance SU(2) ⟹ SO(3), au produit des matrices M est toujours associé le produit des rotations.

Ce point de vue est exactement l'inverse de celui de la Figure VI-1 (renversement du sens des flèches). Revenons donc au point de vue du Chapitre VI, où l'on considère une correspondance bivaluée SO(3) ⟹ SU(2). A toute rotation, on associe alors un couple de matrices M, celui des deux matrices dont elle était l'image dans le point de vue précédent. Deux rotations $\mathcal{R}_1$ et $\mathcal{R}_2$ correspondront alors à deux couples $\pm M_1$ et $\pm M_2$ de matrices unitaires et il est clair que le produit des deux rotations correspondra au couple

obtenu par produit des matrices $\pm M_1$ et $\pm M_2$. C'est bien ce que nous avions annoncé au § A-5b du Chapitre VI.

Par contre, si on ne prend qu'une des deux matrices M de ce couple, celle qui appartient à $SU(2)_+$ par exemple comme nous l'avions fait au début de ce paragraphe, il se peut parfaitement que la rotation produit corresponde à l'opposé du produit des matrices M correspondantes.

COMPLEMENT VII-A

RAPPELS ELEMENTAIRES SUR LES TENSEURS CLASSIQUES

Le but de ce complément est de fournir quelques rappels concernant les propriétés classiques des tenseurs. Nous ne chercherons pas à présenter la théorie générale de l'algèbre tensorielle ; le but sera plutôt d'introduire quelques concepts et résultats simples, ainsi que les notations, dans le cadre d'hypothèses restreintes. En particulier, nous nous limiterons aux changements de base orthonormés malgré le caractère très restrictif de cette simplification (*). Le lecteur qui cherche un point de vue plus général le trouvera aisément dans de nombreux ouvrages [voir par exemple la référence (14), ou encore le Chapitre 10 de la référence (6)].

1 - VECTEURS

Cherchons à évaluer les composantes d'un même vecteur $\vec{v}$ dans deux systèmes d'axes $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ et $\{\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3\}$ orthonormés.

Soit $\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)$ la rotation qui permet de passer du premier système au second :

$$\vec{e}'_{1,2,3} = \mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\ \vec{e}_{1,2,3} \qquad (1)$$

on a encore :

$$(\vec{e}'_1\ \ \vec{e}'_2\ \ \vec{e}'_3) = (\vec{e}_1\ \ \vec{e}_2\ \ \vec{e}_3)\ \left(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\right) \qquad (2)$$

(*) Considérer des changements de base "obliques" peut d'ailleurs être utile en physique, en particulier dans le cadre de l'étude des algèbres de Lie, ou encore de celui de la théorie de la relativité.

où $(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi))$ est une matrice 3 x 3 qui, dans la $i^{ème}$ colonne, a pour éléments les composantes de $\vec{e}'_i$ sur les $\vec{e}_j$ (les indices i et j valent 1, 2 ou 3). Cette matrice est donc celle associée à l'opérateur linéaire de rotation (active) amenant les $\vec{e}$ sur les $\vec{e}'$.

Appelons v_x, v_y, v_z les composantes d'un vecteur $\vec{v}$ quelconque dans la base $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$, et v'_x, v'_y, v'_z celles dans la base $\{\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3\}$. On a [cf. égalités (VII-9) à (VII-11)] :

$$v'_{x_i} = \sum_k v_{x_k} (\mathcal{R})_{ki} \tag{3}$$

et :

$$\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = \left(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\right) \begin{pmatrix} v'_x \\ v'_y \\ v'_z \end{pmatrix} \tag{4}$$

Inversement :

$$\begin{pmatrix} v'_x \\ v'_y \\ v'_z \end{pmatrix} = \left(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\right)^{-1} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \tag{5}$$

Comme $(\mathcal{R})$ est une matrice orthogonale, cette égalité s'écrit également :

$$(v'_x \; v'_y \; v'_z) = (v_x \; v_y \; v_z) \left(\mathcal{R}_{\vec{u}}(\phi)\right) \tag{5'}$$

Le cas où $\mathcal{R}$ est une rotation infinitésimale de vecteur $\vec{u}$ et d'angle $\delta\phi$ a déjà été discuté au § A-2 du Chapitre V ; on a alors :

$$(v'_x \; v'_y \; v'_z) = (v_x \; v_y \; v_z) \left[1 + \delta\phi \begin{pmatrix} 0 & -u_z & u_y \\ u_z & 0 & -u_x \\ -u_y & u_x & 0 \end{pmatrix} \right]$$

Remarque

Nous limitant à des changements de base orthonormés, nous pouvons ignorer la distinction entre composantes contravariantes et covariantes d'un vecteur.

2 - TENSEURS

A partir de deux vecteurs $\vec{v}$ et $\vec{w}$, on peut construire un tableau (matrice 3 x 3) comprenant les 9 nombres $v_{x,y,z} \times w_{x,y,z}$:

$$\overline{\overline{T}} = \begin{pmatrix} v_x w_x & v_y w_x & v_z w_x \\ v_x w_y & v_y w_y & v_z w_y \\ v_x w_z & v_y w_z & v_z w_z \end{pmatrix} \qquad (7)$$

Ce tableau sera appelé tenseur $\overline{\overline{T}}$ du second ordre. On notera dans ce cas :

$$\overline{\overline{T}} = \vec{v} \otimes \vec{w} \qquad (7')$$

Un exemple de tenseur bien connu en physique est donné par le moment d'inertie d'un solide. Si ce dernier est constitué de N particules de

positions $\vec{r}_q$ et de vitesses $\vec{v}_q$, le fait que les particules du solide se déplacent de façon rigide (sans que leurs distances relatives soient modifiées) impose que :

$$\vec{v}_q = \vec{\Omega} \times \vec{r}_q \tag{8}$$

Pour écrire cette égalité, nous supposons de plus que le point origine du solide reste immobile (pas de translation ; le mouvement est une rotation pure autour de 0) et nous notons $\vec{\Omega}$ la vitesse angulaire du solide. Le moment cinétique de ce dernier vaut alors :

$$\vec{J} = \sum_{q=1}^{N} \vec{r}_q \times \vec{v}_q \tag{9}$$

c'est-à-dire, compte tenu de (8) et de la formule du double produit vectoriel :

$$\vec{J} = \sum_q r_q^2 \, \vec{\Omega} - (\vec{r}_q \cdot \vec{\Omega}) \, \vec{r}_q \tag{10}$$

la composante J_i de $\vec{J}$ est donc donnée par l'égalité :

$$J_i = \sum_j \left\{ \sum_q (\vec{r}_q^{\,2}) \, \delta_{ij} - (r_q)_i \, (r_q)_j \right\} \Omega_j \tag{11}$$

par suite, il vient :

$$J_i = \sum_j \overline{\overline{T}}_{ij} \, \Omega_j \tag{12}$$

avec :

$$\overline{\overline{T}}_{ij} = \sum_q \left[(r_q^2) \, \delta_{ij} - (r_q)_i \, (r_q)_j \right] \tag{13}$$

Ces quantités définissent les 9 composantes d'un tenseur $\overline{\overline{T}}$ du second ordre (tenseur d'inertie du solide) ; l'égalité (12) peut être écrite sous la forme :

$$\vec{J} = \overline{\overline{T}} \, \vec{\Omega} \tag{14}$$

De façon plus générale, prenons n vecteurs $\vec{u}$, $\vec{v}$, $\vec{w}$,... $\vec{m}$. On peut former un tableau avec les d^n composantes de ces vecteurs (ici, la dimension de l'espace est d=3) et obtenir un tenseur $T^{(n)}$ noté :

$$T^{(n)} = \vec{u} \otimes \vec{v} \otimes \vec{w} \otimes \ldots \otimes \vec{m} \tag{15}$$

Si n = 1, on a simplement un vecteur ; si n = 2, on est en présence d'un tenseur du second ordre, associé à une matrice carrée ; si n = 3, il faut prendre une "matrice" cubique, etc.. Les composantes de $T^{(n)}$ seront les

$$T^{(n)}_{x_i\, x_j \ldots\, x_\ell} = u_{x_i}\; v_{x_j} \ldots\; m_{x_\ell} \qquad (16)$$

$$x_i,\ x_j, \ldots\ x_\ell = x,\ y \text{ ou } z.$$

Dans une rotation des axes (changement de base), les composantes de $T^{(n)}$ deviennent (*) :

$$T^{(n)}_{x'_i\ x'_j \ldots\ x'_\ell} = u_{x'_i}\; v_{x'_j} \ldots\; m_{x'_\ell} \qquad (17)$$

c'est-à-dire :

$$T^{(n)}_{x'_i\ x'_j \ldots\ x'_\ell} = \sum_{i''\,j''\ldots\,\ell''} (\mathcal{R})_{i''i}\,(\mathcal{R})_{j''j}\ldots(\mathcal{R})_{\ell''\ell}\, T^{(n)}_{x_{i''}\,x_{j''}\ldots x_{\ell''}} \qquad (17')$$

Cette égalité constitue en fait la définition générale d'un tenseur cartésien d'ordre n : un enmble $T^{(n)}$ de 3^n composantes cartésiennes (orthonormées) sera dit constituer un tenseur d'ordre n si, lors d'un changement de base orthonormé, les nouvelles composantes sont données en fonction des anciennes par les égalités linéaires (17). Par définition, la matrice $3^n \times 3^n$ qui donne les effets du changement de base sur les composantes est donc n fois le produit tensoriel de la matrice $(\mathcal{R})$ par elle-même (**)

Il est clair que la définition qui a été donnée est plus large que (15) : l'ensemble des tenseurs $T^{(n)}$ comprend, non seulement les produits

---

(*) ne pas confondre les $T^{(n)}_{x'_i\ x'_j \ldots x'_\ell}$ [nouvelles composantes de $T^{(n)}$] avec les $T^{(n)}_{x_{i'}\ x_{j'} \ldots x_{\ell'}}$ [anciennes composantes, prises pour i = i', j = j', etc.]

(**) si l'on se donne des composantes quelconques de $T^{(n)}$ dans une seule base, on peut toujours considérer qu'on a défini un tenseur d'ordre n et utilier (17) pour calculer ses composantes dans une base quelconque (suite p. suiv.)

tensoriels comme (15) mais toutes leurs combinaisons linéaires (*).

Exemple : Posons, dans une base donnée

$$\overline{\overline{T}}_{ij} = \delta_{ij} \qquad (18)$$

Dans une nouvelle base orthonormée, les nouvelles composantes seront les $\overline{\overline{T}}'_{ij}$ donnés par :

$$\overline{\overline{T}}'_{ij} = \sum_{i'' \; j''} (\mathcal{R})_{i'' \; i''} \quad (\mathcal{R})_{j'' \; j''} \quad T_{x_{i''} \; x_{j''}}$$

$$= \sum_{i''} (\mathcal{R})_{i'' \; i} \quad (\mathcal{R})i'' \; j \quad = \delta_{ij} \qquad (14)$$

[puisque $(\mathcal{R})$ est une matrice orthogonale]. L'égalité (18), valable dans toute base, définit donc bien un tenseur du second ordre.

Les transformations des tenseurs d'ordre n donnent des représentations, de dimension 3^n, du groupe $R_{(3)}$ des rotations autour d'un point fixe. C'est le problème de la décomposition de ces représentations en représentations irréductibles qui conduit à l'introduction des tenseurs irréductibles $T^{(k)}$.

(** -suite) Par contre, si l'on se donne a priori l'expression des composantes de $T^{(n)}$ dans toutes les bases (orthonormées), il faut vérifier si l'on a bien défini de cette façon un tenseur. C'est ce second point de vue que nous adopterons dans toute la suite où, par exemple, les formules de définition du produit tensoriel ou du produit contracté sont applicables simultanément à toutes les bases.

(*) on montre aisément que l'ensemble des $T^{(n)}$ constitue un espace vectoriel de dimensions 3^n ; une base de cet espace est constituée par les produits tensoriels

$$\vec{e}_i \otimes \vec{e}_j \otimes \ldots \otimes \vec{e}_\ell \qquad i, j, \ldots \ell = 1, 2, 3$$

Remarque : Insistons une fernière fois sur le fait qu'en nous limitant aux changements de repères orthonormés, nous restreignons considérablement le problème ; ceci nous conduit également à confondre composantes contravariantes et covariantes d'un tenseur.

Cette restriction revient à ne considérer que les représentations des sous-groupes SO(3) de GL(3, R). Elle augmente le nombre des propriétés invariantes des $T^{(n)}$ dans les changements de base envisagés : par suite, elle permet de pousser plus loin la décomposition de l'ensemble des $T^{(n)}$ en sous-ensembles invariants. Par exemple, le tenseur diagonal (18) forme à lui seul un sous-espace invariant sous l'action des changements de base associés aux éléments de $R_{(3)}$; par contre, ce ne serait pas le cas pour GL(3, R), du moins si les δ_{ij} étaient considérés comme composantes deux fois co- ou contravariantes (l'invariance étant préservée pour des coordonnées mixtes).

3 - PROPRIETES

a) Addition tensorielle

On définit simplement l'addition tensorielle en ajoutant les composantes correspondantes de deux (ou d'un nombre fini) de tenseurs d'ordre n. Il est clair qu'on obtient encore un tenseur du même ordre.

b) Produit tensoriel

A partir de deux tenseurs $T^{(n_1)}$ et $T^{(n_2)}$, on peut construire un tenseur $P^{(n)}$ d'ordre

$$n = n_1 + n_2 \tag{20}$$

dont les composantes $P^{(n)}_{x_i\, x_j \cdots\, x_\ell}$ sont données par :

$$P_{\underbrace{x_i\, x_j \cdots\, x_h}_{n_1}\ \underbrace{x_{h+1} \cdots\, x_\ell}_{n_2}} = T^{(n_1)}_{x_i\, x_j \cdots\, x_h}\ T'^{(n_2)}_{x_{h+1} \cdots\, x_\ell} \tag{21}$$

Il est facile de vérifier qu'on obtient effectivement de cette façon un tenseur d'ordre n.

c) Contraction

L'opération de contraction des indices consiste à transformer un tenseur $T^{(n)}$ en un tenseur $Q^{(n-2)}$, d'ordre n-2, en posant :

$$Q^{(n-2)}_{x_k \cdots x_m} = \sum_{x_i = x,y,z} T^{(n)}_{x_i\, x_i\, x_k \cdots x_m} \qquad (22)$$

On effectue donc la somme de tous les éléments de $T^{(n)}$ diagonaux par rapport aux deux premiers indices, laissant tous les autres libres (l'opération de contraction se généralise immédiatement à deux indices quelconques, pas nécessairement les premiers, ni même obligatoirement consécutifs). Vérifions qu'on obtient ainsi un tenseur d'ordre n-2. Calculons pour cela les composantes de $Q^{(n-2)}$ dans une nouvelle base :

$$\begin{aligned} Q^{(n-2)}_{x'_k \cdots x'_m} &= \sum_{i=1,2,3} T_{x'_i\, x'_i\, x'_k \cdots x'_m} \\ &= \sum_{i=1,2,3} \sum_{i'' \; j'' \ldots m''} (\mathcal{R})_{i''i}\; (\mathcal{R})_{j''i}\; (\mathcal{R})_{k''k} \cdots (\mathcal{R})_{m''m} \\ &\quad \times T_{x_{i''}\, x_{j''}\, x_{k''} \cdots x_{m''}} \end{aligned} \qquad (23)$$

Or :

$$\sum_i (\mathcal{R})_{i''i}\; (\mathcal{R})_{j''i} = \delta_{i''j''} \qquad (24)$$

(produit de deux colonnes d'une matrice orthogonale) et l'on obtient :

$$\begin{aligned} Q^{(n-2)}_{x'_k \cdots x'_m} &= \sum_{k'' \ldots m''} (\mathcal{R})_{k''k} \cdots (\mathcal{R})_{m''m} \sum_{i''} T_{x_{i''}\, x_{i''}\, x_{k''} \ldots x_{m'}} \\ &= \sum_{k'' \ldots m''} (\mathcal{R})_{k''k} \cdots (\mathcal{R})_{m''m}\; Q^{(n-2)}_{x_{k''} \ldots x_{m''}} \end{aligned} \qquad (25)$$

qui démontre que $Q^{(n-2)}$ est un tenseur d'ordre n-2.

Exemple :

Soit $\overline{\overline{T}}$ un tenseur du second ordre, $\overline{V}$ un tenseur du premier ordre (c'est-à-dire un vecteur). Le produit tensoriel

$$\overline{\overline{\overline{P}}} = \overline{\overline{T}} \otimes \overline{V} \qquad (26)$$

est un tenseur du 3ème ordre. Par contraction des deux derniers indices, on obtient un tenseur du 1er ordre, le vecteur $\overline{W}$, qui sera noté :

$$\overline{W} = \overline{\overline{T}} \cdot \overline{V} \qquad (27)$$

La composante W_i de $\overline{W}$ est donnée par

$$W_i = \sum_j T_{ij} V_j \qquad (27')$$

Cette contraction des indices de $\overline{\overline{\overline{P}}}$ revient donc bien à multiplier les lignes de $(\overline{\overline{T}})$ par la colonne de $(\overline{V})$ [comme nous l'avions par exemple écrit en (12)].

4 - CRITERE DE TENSORIALITE

Comme nous l'avons vu dans l'exemple précédent, il est également possible de contracter les indices de deux tenseurs différents, d'ordres n_1 et n_2. Ceci revient à commencer par considérer le produit tensoriel $\overline{\overline{P}}$ d'ordre $n_1 + n_2$, puis à contracter deux de ces indices pour obtenir un tenseur d'ordre $n_1 + n_2 - 2$.

La condition nécessaire et suffisante pour que $T^{(n)}$ soit un tenseur d'ordre n est que, par contraction avec un tenseur quelconque d'ordre $p < n$, il donne un tenseur d'ordre $n - p$.

Nous admettrons que la condition est suffisante (elle l'est si l'on a choisi une fois pour toutes une valeur quelconque $p < n$; il n'est pas nécessaire de considérer l'ensemble de $n + 1$ valeurs de p a priori possibles).

5 - TENSEURS SYMETRIQUES ET ANTISYMETRIQUES

Soit $\overline{\overline{T}}$ un tenseur d'ordre deux tel que :

$$T_{x_i\, x_j} = \varepsilon\, T_{x_j\, x_i} \qquad (28)$$

Si $\varepsilon = +1$, le tenseur est dit symétrique ; si $\varepsilon = -1$, il est dit antisymétrique.

Cette propriété de $\bar{T}$ est indépendante de la base choisie. En effet :

$$\begin{aligned} T_{x'_i\, x'_j} &= \sum_{i''j''} (\mathcal{R})_{i''i}\ (\mathcal{R})_{j''j}\ T_{x_{i''}\, x_{j''}} \\ &= \varepsilon \sum_{i''j''} (\mathcal{R})_{i''i}\ (\mathcal{R})_{j''j}\ T_{x_{j''}\, x_{i''}} \\ &= \varepsilon\, T_{x'_j\, x'_i} \end{aligned} \qquad (29)$$

Elle se généralise immédiatement à des tenseurs d'ordre plus élevé : si un tenseur $T^{(n)}$ est, dans une base donnée, symétrique ou antisymétrique par rapport à deux indices [par exemple $T_{x_i\, x_j\, x_k} = \varepsilon T_{x_k\, x_i\, x_j}$], il conserve cette propriété dans une base quelconque.

Nous commençons ainsi à rencontrer des propriétés d'invariance qui permettent de construire des sous-espaces de l'espace des tenseurs $T^{(n)}$ qui soient globalement invariant par les changements de base associés aux éléments de $R_{(3)}$.

Remarque :

Si l'on considère des changements de base non orthonormés, la propriété précédente reste vraie pour des composantes covariantes ou contravariantes par rapport aux deux indices en question. Ce n'est pas le cas des composantes mixtes (comme celles qui servent habituellement à la définition de la matrice associée à un opérateur).

6 - TENSEURS PARTICULIERS

Nous avons déjà rencontré le tenseur $\bar{1}$, du second ordre, de composantes δ_{ij}. Il existe un autre tenseur fondemental, le tenseur $\bar{\bar{\bar{\varepsilon}}}$, totalement antisymétrique du 3ème ordre. Ses composantes sont les ε_{ijk} définis par :

$$\varepsilon_{i,j,k} = \begin{cases} +1 & \text{si } i,j,k \text{ sont une permutation paire de } 1,2,3 \\ -1 & \text{si la permutation est impaire} \\ 0 & \text{si deux des 3 indices } i,j,k \text{ sont egaux} \end{cases} \qquad (30)$$

Vérifions que l'on définit effectivement de cette façon un tenseur. Calculons à cet effet les composantes ε'_{ijk} de $\overline{\overline{\varepsilon}}_A$ dans une nouvelle base :

$$\varepsilon'_{ijk} = \sum_{i'' j'' k''} (\mathcal{R})_{i''i} \; (\mathcal{R})_{j''j} \; (\mathcal{R})_{k''k} \; \varepsilon_{i''j''k''} \qquad (31)$$

Le deuxième membre de cette égalité est clairement invariant par permutation circulaire des troix indices, et change de signe si l'on en permute deux (il est donc nul si deux indices sont égaux). Tous les ε'_{ijk} peuvent donc être déduits immédiatement de ε'_{123}, qui vaut :

$$\varepsilon'_{1,2,3} = \text{Det } (\mathcal{R}) = 1 \qquad (32)$$

on a donc :

$$\varepsilon'_{ijk} = \varepsilon_{ijk} \qquad (33)$$

et $\overline{\overline{\varepsilon}}_A$ est effectivement un tenseur du 3ème ordre.

Prenons par exemple un tenseur $\overline{\overline{T}}$ du deuxième ordre, de composantes $\overline{\overline{T}}_{jk}$, et multiplions le tensoriellement par $\frac{1}{2}\,\overline{\overline{\varepsilon}}_A$; nous obtenons ainsi un tenseur d'ordre 5. Contractons ensuite ce dernier sur deux paires d'indices (comprenant chacune un indice issu de $\overline{\overline{T}}$) ; il nous reste un tenseur d'ordre 5-2-2 = 1, c'est-à-dire un vecteur. Les composantes de ce dernier sont :

$$V_{x_i} = \frac{1}{2} \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \; T_{x_j \, x_k}$$

$$= \frac{1}{2} \; \varepsilon_{ijk} \; [T_{x_j \, x_k} - T_{x_k \, x_j}] \qquad (34)$$

c'est-à-dire :

$$V_x = \frac{1}{2} \; (T_{yz} - T_{zy}) \qquad (34')$$

(et les relations obtenues par permutation circulaire des indices x,y et z).

Inversement, si un tenseur T d'ordre deux est antisymétrique :

$$\bar{\bar{T}} = \begin{pmatrix} 0 & A & B \\ -A & 0 & C \\ -B & -C & 0 \end{pmatrix} \qquad (35)$$

il peut être assimilé à un vecteur $\vec{V}$ de composantes

$$\begin{cases} V_x = -C \\ V_y = B \\ V_z = -A \end{cases} \qquad (36)$$

L'action de $\bar{\bar{T}}$ sur un vecteur $\vec{W}$ (c'est-à-dire le produit contracté $\bar{\bar{T}}.\vec{W}$) donne alors simplement le produit vectoriel $\vec{V} \times \vec{W}$.

Ce résultat se généralise à un ordre n quelconque : dès qu'un tenseur d'ordre n est antisymétrique par rapport à deux de ses composantes, il peut être considéré comme un tenseur d'ordre n-2 "déguisé" : si l'on range de façon différente ses composantes, on peut abaisser son ordre de deux unités.

7 - TENSEURS IRREDUCTIBLES

Nous n'allons donner là qu'un aperçu de la façon dont se présente le problème de la recherche des tenseurs irréductibles sous l'action des opérations de $R_{(3)}$. Ce problème a en effet été traité en détail dans le chapitre VII grace aux propriétés du moment cinétique et celles de la composition de plusieurs moments. Nous verrons cependant ici comment une approche directe est possible et retrouverons certains des résultats du Chapitre VII.

Revenons donc à la question posée plus haut : les lois de transformations (17') des composantes d'un tenseur $T^{(n)}$, qui donnent des représentation de $R_{(3)}$ [la démonstration est la même que (VII-49) et (VII-50)], peuvent-elles être réduites de façon à faire apparaitre des représentations irréductibles de dimension moindre ? Le problème est donc de trouver des combinaisons linéaires des $T^{(n)}_{x_i\, x_j \,\ldots\, x_\ell}$ qui se transforment toujours les unes dans les autres par rotation des axes .

Commençons par prendre le cas où n = 2 ; nous allons voir que les résultats des paragraphes précédents permettent de décomposer complètement la représentation correspondante. Celle-ci étant de dimension 9, de nombreuses possibilités sont a priori envisageables : j = 4, ou bien j = 3 ⊕ j = 1/2, etc

Remarquons d'emblée que la trace de $\bar{\bar{T}}$

$$Tr\ \{\bar{\bar{T}}\} = \bar{\bar{T}}_{xx} + \bar{\bar{T}}_{yy} + \bar{\bar{T}}_{zz} \qquad (37)$$

est un invariant dans tout changement de base. Si donc nous posons :

$$\bar{\bar{T}} = \frac{1}{3}\ Tr\ \{\bar{\bar{T}}\} \times \bar{\bar{1}} + \bar{\bar{K}} \qquad (38)$$

nous décomposons $\bar{\bar{T}}$ comme la somme de deux contributions : une partie scalaire (invariante par changement de base), et une partie à trace nulle (dans une base quelconque). La première partie fait donc apparaître la représentation j = 0, à une dimension, du groupe $R_{(3)}$.

Pour les tenseurs à trace nulle, ils forment clairement un sous-espace invariant, mais pas irréductible comme nous allons le voir. Ce sous-espace est de dimension 8. Pour le réduire, posons :

$$\bar{\bar{K}} = {}^{S}\bar{\bar{K}} + {}^{A}\bar{\bar{K}} \qquad (39)$$

où

$${}^{S}\bar{\bar{K}}_{ij} = \frac{1}{2}\ [\bar{\bar{K}}_{ij} + \bar{\bar{K}}_{ji}]$$

$$= \frac{1}{2}\ [\bar{\bar{T}}_{ij} + \bar{\bar{T}}_{ji}] - \frac{1}{3}\ Tr\{\bar{\bar{T}}\} \qquad (40)$$

$${}^{A}\bar{\bar{K}}_{ij} = \frac{1}{2}\ [\bar{\bar{K}}_{ij} - \bar{\bar{K}}_{ji}]$$

$$= \frac{1}{2}\ [\bar{\bar{T}}_{ij} - \bar{\bar{T}}_{ji}] \qquad (40')$$

Les tenseurs ${}^{A}\bar{\bar{K}}$ appartiennent à l'espace des tenseurs complètement anti-symétriques ; nous avons vu qu'ils sont assimilables à des vecteurs, de sorte qu'il leur correspond la représentation irréductible j = 1 de $R_{(3)}$, qui est à 3 dimensions (cf. Chap; VI, § A-5-a).

Il ne nous reste maintenant qu'à considérer l'espace à 5 dimensions des tenseurs S_K, symétriques et de trace nulle. Nous admettons ici (mais la démonstration a été faite dans le Chapitre VII) que la représentation correspondante est irréductible ; il en résulte la présence de la valeur j = 2 dans la représentation étudiée.

Pour un tenseur d'ordre n quelconque, le raisonnement précédent peut être généralisé. Il est facile par trace sur deux indices quelconques de faire apparaître des tenseurs d'ordre n - 2. De cette façon, on peut retrancher du tenseur initial $C_n^2 = n(n-1) / 2$ tenseurs qui se ramènent à des tenseurs de rang inférieur de deux unités. On écrit ensuite :

$$T_{x_i x_j x_k \cdots x_\ell} = \frac{1}{2}\left[T_{x_i x_j x_k \cdots x_\ell} + T_{x_j x_i x_k \cdots x_\ell}\right] + \frac{1}{2}\left[T_{x_i x_j x_k \cdots x_\ell} - T_{x_j x_i x_k \cdots x_\ell}\right] \qquad (41)$$

Le deuxième terme du membre de droite, antisymétrique par rapport aux deux premiers indices, est assimilable à un tenseur d'ordre n - 1. Nous le retranchons donc et ne gardons que le premier terme, symétrique. On peut effectuer la même opération pour tous les couples d'indices.

Pour finir, après que toutes les parties de $T^{(n)}$ qui se ramènent à des ordres n-1 ou n-2 aient été retranchées, il reste un tenseur complètement symétrique et de traces nulles (les composantes sont invariantes par échange de deux indices quelconques ; les n(n-1) / 2 sommes sur deux indices quelconque sont toutes nulles). On montre alors que l'espace engendré par de tels tenseurs est irréductible et qu'il est de dimension 2n+1.

Vérifions que cette dimension est bien (2n+1). Pour cela, cherchons de combien de paramètres dépendent les tenseurs en question. Pour un tenseur complètement symétrique, la valeur d'une composante dépend du nom (x, y ou z) des composantes qui y apparaissent, mais pas de leur ordre :

x : p fois y : q fois z : r fois

si r est fixé, p peut être choisi de n+1-r façons différentes :
p = 0,1,2,..., n-r.

Il faut donc calculer :

$$\sum_{r=0}^{n} n - r + 1 = n(n+1) - \frac{n(n+1)}{2} + n+1 = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

De plus, on a $n(n+1)/2$ conditions de traces nulles. Pour finir, il reste

$$\frac{(n+1)(n+2)}{2} - \frac{n(n+1)}{2} = 2n + 1$$

paramètres indépendants. Il ne resterait donc qu'à démontrer l'irréductibilité des représentations pour établir qu'elles correspondent à $j = n$.

Remarque :

Si l'on considère des changements de trace non nécessairement orthonormés, les représentations irréductibles sont à rechercher parmi celles du groupe des permutations ; les sous-espaces invariants sont moins nombreux.

COMPLEMENT VII - B

LES MOMENTS MULTIPOLAIRES

Considérons un système de charges et de courants localisés à l'intérieur d'une surface donnée S, de volume interne V. Nous allons dans ce complément nous intéresser aux interactions électromagnétiques de ce système avec d'autres systèmes physiques localisés hors de S. Nous calculerons pour cela le champ électrique créé par ces charges en un point $\vec{r}$ extérieur à S, en nous limitant pour commencer au cas où les charges sont immobiles. Ce champ électrostatique sera exprimé en fonction de quantités qui portent le nom de "moments multipolaires électriques" Q_l^m du système considéré. On peut également traiter un problème légèrement différent, celui du calcul de l'interaction des charges de S avec un potentiel électrique créé par d'autres charges (toutes extérieures à S) ; nous verrons que, cette fois encore, on peut faire intervenir les Q_l^m. Un point important est que, dans le cadre de la mécanique quantique, les Q_l^m deviennent des opérateurs tensoriels irréductibles $T^{(k=l)}_{Q=m}$; le théorème de Wigner - Eckart leur est donc applicable. Nous reprendrons ensuite le problème, mais en considérant cette fois un système de courants stationnaires et non de charges. Ceci nous conduira à introduire les "moments multipolaires magnétiques" M_l^m , dont les propriétés sont assez semblables à celles des Q_l^m (leurs parités sont cependant opposées). Nous donnerons ensuite quelques exemples d'application de ce formalisme : quadrupole électrique de niveaux atomiques ou nucléaires, règles de sélection pour des transitions multipolaires entre niveaux différents.

Remarque :

Insistons sur le fait que nous nous limiterons ici au cadre de l'électrostatique ou de la magnétostatique (densité de charges ρ et courants $\vec{J}$ très lentement variables dans le temps). Cette limitation n'a rien d'essentiel, et il est possible de raisonner de façon plus générale, dans le cadre plus général des équations de Maxwell qui tiennent compte de façon exacte des effets liés à la propagation du rayonnement. Les calculs sont alors un peu plus compliqués, et il est commode d'introduire la notion d'harmonique sphérique vectorielles (analoques aux harmoniques "scalaires" Y_l^m), qui sont les fonctions propres communes de

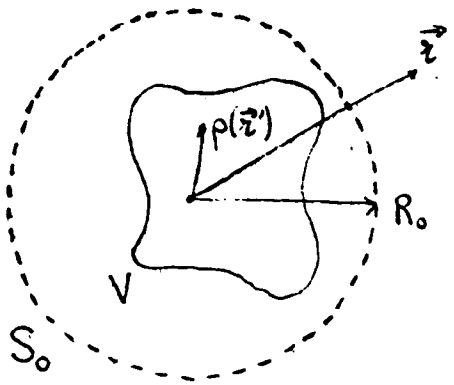
$\vec{J}_2$ et de Jz pour un champ de vecteurs (au lieu d'une fonction scalaire, n'ayant qu'une seule composante). Le lecteur intéressé pourra consulter le traité de J.D. Jackson, "Classical electrodynamics", Chap. 16, ou encore le cours du Collège de France de C. Cohen-Tannoudji (1973 - 1974).

A - MOMENTS MULTIPOLAIRES ELECTRIQUES

1 - Développement du potentiel à l'extérieur d'un système de charges

Considérons une densité de charges $\rho(\vec{r})$, localisée dans un volume V, et appelons S_0 une sphère de rayon R_0, centrée à l'origine, contenant V :

$$\rho(\vec{r}) = 0 \qquad \text{si} \qquad r > R_0 \tag{I}$$



Nous allons nous intéresser au champ électrique $\vec{E}$ et au potentiel V créés par ce système de charges à l'extérieur de S_0. Ceci revient à chercher la solution de l'équation en V :

$$\Delta V = - \rho(\vec{r}) / \varepsilon_0 \tag{2}$$

qui s'annule à l'infini. L'opérateur Δ est le laplacien :

$$\Delta = \frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2} + \frac{\delta^2}{\delta z^2} \tag{3}$$

qui est invariant par rotation ; il commute donc avec L_z et $\vec{L}^2$, et :

$$\Delta \{ f(r) \; Y_1^m (\theta,\phi) \} = g(r) \times Y_1^m (\theta,\phi) \tag{4}$$

De façon plus précise, on sait qu'on a l'égalité :

$$\Delta \equiv \frac{1}{r} \frac{\delta^2}{\delta r^2} r - \frac{\vec{L}^2}{2r^2} \qquad (5)$$

Nous allons donc décomposer la dépendance angulaire de V sur les harmoniques sphériques, et poser [cf. note (*) ci-dessous] :

$$V(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} v_{lm}(r)\, Y_l^{m*}(\theta,\phi) \qquad (6)$$

L'égalité (5) donne alors :

$$\Delta V(\vec{r}) = \sum_{l,m} \left[\frac{1}{r} \frac{\delta^2}{\delta r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] v_{lm}(r) \times Y_l^{m*}(\theta,\phi) \qquad (7)$$

Décomposons de même la densité de charges ρ :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{lm} \rho_{lm}(r)\, Y_l^{m*}(\theta,\phi) \qquad (8)$$

Comme les $Y_l^m(\theta,\phi)$ sont othonormées (en tant que fonction de θ et ϕ seuls) :

$$\int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi \; Y_l^{m*}(\theta,\phi)\, Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)$$

$$= \int_{4\pi} d\Omega \; Y_l^{m*}(\theta,\phi)\, Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\, \delta_{mm'} \qquad (8)$$

(*) *Rappelons que :*

$Y_l^{m*}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\phi)$

le fait que $V(\vec{r})$ *et* $\rho(\vec{r})$ *soient réels entraîne que :*

$v_{lm}{}^*(r) = (-1)^m v_{l-m}(r)$

$\rho_{lm}{}^*(r) = (-1)^m \rho_{l-m}(r)$

Dans les développements (6) et (8) nous avons défini les v_{lm} *et les* ρ_{lm} *pour que ce soit* Y_l^{m*} *qui apparaisse et non* Y_l^m *; ceci nous permet d'avoir directement les fonctions* Y_l^m *dans (10) et (14).*

il vient :

$$\rho_{lm}(r) = \int_{4\pi} d\Omega \; Y_l^m(\theta,\phi)\, \rho(\vec{r}) \qquad (10)$$

et on vérifie immédiatement que (cf. note page précédente) :

$$\rho_{l-m}(r) = (-1)^m \rho_{lm}^*(r) \qquad (11)$$

si l'on identifie alors les développements des deux membres de (2), on obtient :

$$\left[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\, r - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] v_{lm}(r) = -\frac{\rho_{lm}(r)}{\varepsilon_o} \qquad (12)$$

Nous avons ainsi complètement séparé l'aspect angulaire et l'aspect radial du problème. Pour chaque valeur de l et de m, l'équation (12) est une équation différentielle à une seule variable. Nous allons voir que sa solution est :

$$v_{lm}(r) = \frac{1}{\varepsilon_o}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\frac{1}{2l+1}\,\frac{Q_l^m}{r^{l+1}} \qquad (13)$$

où Q_l^m est une constante définie par :

$$Q_{lm} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int_0^{R_o} r'^{\,l+2}\, dr'\, \rho_{lm}(r')$$

$$= \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int_{V_o} d^3r'\, \rho(\vec{r}')\, r'^{\,l}\, Y_l^m(\theta',\phi') \qquad (14)$$

Q_l^m est appelé le moment multipolaire électrique d'ordre l,m, du système de charges étudié.

Pour démontrer (13) commençons par remarquer que, si $r > R_o$, la fonction $\rho_{lm}(r)$ est nulle, de sorte que :

$$\left[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\, r - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] v_{lm}(r) = 0 \qquad \text{si} \quad r > R_o \qquad (15)$$

Cette équation admet deux solutions indépendantes, r^l et $1/r^{l+1}$, comme on peut le vérifier immédiatement. Les solutions de l'équation (1

avec second membre dépendent de deux paramètres et ont généralement un comportement en r^l quand $r \to \infty$. Ce comportement divergent est à rejeter. Nous ne garderons donc que la solution définie à un facteur multiplicatif près qui présente à l'infini un comportement non divergent et varie en $1/r^{l+1}$ (nous verrons d'ailleurs également qu'il nous faudra choisir la solution qui reste finie à l'origine). Posons donc (changement de fonction) :

$$v_{lm}(r) = r^l \, x_{lm}(r) \tag{16}$$

Cette égalité définit $x_{lm}(r)$ en tout point (sauf éventuellement en $r = 0$). Comme $v_{lm}(r)$ reste fini lorsque $r \to \infty$, nous nous attendons à ce que :

$$x_{lm}(r) \xrightarrow[r \to \infty]{} 0 \tag{17}$$

La substitution de (16) dans (15) donne :

$$\left[2(l+1) \frac{d}{dr} + r \frac{d^2}{dr^2} \right] x_{lm}(r) = - \rho_{lm}(r) \frac{1}{\varepsilon_o \, r^{l-1}} \tag{18}$$

équation différentielle du second ordre qui se réduit au premier si l'on introduit la dérivée :

$$y_{lm}(r) = \frac{d}{dr} \, x_{lm}(r) \tag{19}$$

la nouvelle fonction y_{lm} satisfait à :

$$\left[2(l+1) + r \frac{d}{dr} \right] Y_{lm}(r) = - \rho_{lm}(r) \frac{1}{\varepsilon_o \, r^{l-1}} \tag{20}$$

Si $r > R_o$, $\rho_{lm}(r)$ est nul, et la solution de cette équation est proportionnelle à $1/r^{2l+2}$. Si nous posons :

$$y_{lm}(r) = z_{lm}(r) \, / \, r^{2l+2} \tag{21}$$

(*) *En fait, si $v_{lm} \sim r^{-(l+1)}$ lorsque $r \to \infty$, on aura $x_{lm} \sim r^{-(2l+1)}$ et x_{lm} tend rapidement vers zéro à l'infini. C'est bien ce que nous obtiendrons plus loin.*

Nous obtenons l'équation plus simple :

$$\frac{d}{dr} z_{lm}(r) = - r^{l+2} \rho_{lm}(r) / \varepsilon_o \qquad (22)$$

qui s'intègre immédiatement pour donner :

$$z_{lm}(r) = z_{lm}(0) - \frac{1}{\varepsilon_o} \int_0^r dr' \, r'^{l+2} \rho_{lm}(r') \qquad (23)$$

La fonction z_{lm} n'est donc jamais singulière à l'origine. Ce n'est cependant pas en général le cas des autres fonctions x, y, et v introduites précédemment. En effet, si

$$z_{lm}(0) \neq 0 \qquad (24)$$

alors, lorsque $r \to 0$:

$$y_{lm}(r) \sim z_{lm}(0) / r^{2l+2}$$

$$x_{lm}(r) \sim z_{lm}(0) / r^{2l+1}$$

$$v_{lm}(r) \sim z_{lm}(0) / r^{l+1} \qquad (25)$$

Nous retrouvons bien le résultat que nous avions prévu plus haut : en général, la solution de (12) diverge à l'origine en $r^{-(l+1)}$. Si nous voulons éliminer cette divergence [nous cherchons une solution de (2) en tout point de l'espace, y compris l'origine, et nous supposons que $\rho(\vec{r})$ est finie quel que soit $\vec{r}$], il nous faut poser dans (23) :

$$z_{lm}(0) = 0 \qquad (26)$$

Lorsque $r > R_o$, la fonction z_{lm} est constante, et donnée par :

$$z_{lm}(r) = - \frac{1}{\varepsilon_o} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \; Q_{lm} \quad \text{si} \quad r > R_o \qquad (27)$$

On a posé :

$$Q_{lm} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int_0^{R_o} r'^2 \, dr' \, r'^l \, \rho_{lm}(r') \qquad (28)$$

Dans cette définition, le facteur $\sqrt{4\pi/(2l+1)}$ a été introduit par pure commodité comme il apparaîtra dans la suite ; la borne supérieure de l'intégrale, R_o, peut aussi bien être remplacée par $+\infty$. Il vient donc :

$$y_{lm}(r) = -\frac{1}{\varepsilon_o}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\frac{Q_{lm}}{r^{2l+2}} \quad \text{si} \quad r > R_o \tag{29}$$

qui nous donne la dérivée par rapport à r de $x_{lm}(r)$. Nous ne connaissons pas le comportement de x_{lm} à l'origine et nous ne pouvons pas intégrer (29) de 0 à r ; par contre, la condition (17) nous permet d'effectuer une intégration entre r et $+\infty$ qui nous donne :

$$x_{lm}(\infty) = 0 = x_{lm}(r) + \int_r^{+\infty} dr\, y_{lm}(r) \tag{30}$$

ou encore :

$$x_{lm}(r) = \frac{1}{\varepsilon o}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\frac{Q_{lm}}{2l+1}\cdot\frac{1}{r^{2l+1}} \tag{31}$$

par suite :

$$v_{lm}(r) = \frac{1}{\varepsilon o}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\cdot\frac{1}{2l+1}\frac{Q_{lm}}{r^{l+1}} \tag{32}$$

Nous obtenons alors l'égalité (13).

Pour finir, la solution de (2) que nous avons retenue s'écrit :

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}(-1)^m Q_{l-m}\frac{Y_l^m(\theta,\phi)}{r^{l+1}} \tag{33}$$

Les Q_{lm} définis en (14) [ou (28)] sont donc des nombres qui permettent d'écrire le potentiel électrique à l'extérieur de S_o sous forme d'un développement en harmoniques sphériques. Ces nombres sont appelés moments multipolaires électriques du système de charges considéré. Ils permettent de complètement caractériser le champ électrique $\vec{E}(\vec{r})$ créé par les charges à l'extérieur de S_o :

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}(-1)^m Q_{l-m}\,\vec{\nabla}\left\{\frac{Y_l^m(\theta,\phi)}{r^{l+1}}\right\} \tag{34}$$

2 - Cas de charges ponctuelles

Si le système considéré comprend une charge unique située en $\vec{r}_1$, on a :

$$\rho(\vec{r}') = q\,\delta(\vec{r}' - \vec{r}_1) \tag{35}$$

et $V(\vec{r})$ est simplement donné par :

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{q}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} \tag{36}$$

D'autre part, si l'on reporte (35) dans (14), on peut immédiatement effectuer l'intégration qui donne Q_{lm}. L'égalité (33) donne alors, si l'on remplace $\vec{r}_1$ par $\vec{r}'$ pour rendre la formule plus symétrique :

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{lm} \frac{4\pi}{2l+1}(-1)^m r'^l\, Y_l^{-m}(\theta',\phi')\,\frac{Y_l^m(\theta,\phi)}{r^{l+1}}$$

$$\text{si } r' < r \tag{37}$$

où r', θ', ϕ' sont les coordonnées sphériques du vecteur $\vec{r}'$. Si $r' > r$, il suffit d'inverser dans (37) le rôle de $\vec{r}$ et $\vec{r}'$ pour obtenir le développement de $1 / |\vec{r} - \vec{r}'|$ en harmoniques sphériques. La formule (37) s'avère fréquemment utile.

Remarque :

Pour un système comprenant N charges ponctuelles q_1, q_2, q_3,... situées en $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$,... , on a :

$$\rho(\vec{r}') = \sum_{n=1}^{N} q_n\,\delta(\vec{r}' - \vec{r}_n) \tag{38}$$

et :

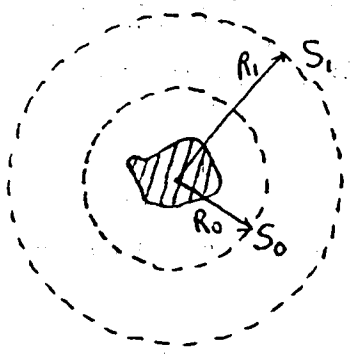
$$Q_{lm} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \sum_{n=1}^{N} q_n (r_n)^l\, Y_l^m(\theta_n, \phi_n) \tag{39}$$

où r_n, θ_n et ϕ_n sont les composantes sphériques de $\vec{r}_n$.

3 - Système de charges placées dans un potentiel extérieur

Nous considérons maintenant deux systèmes de charges. Le premier, identique au précédent, et entièrement situé à l'intérieur d'une sphère S_0 ; le second est constitué de charges qui sont toutes extérieures à une sphère S_1, centrée comme S_0 à l'origine, mais de

rayon R_1 supérieur (ou égal) à R_0.



Le rôle de ce second système de charges est de créer un potentiel électrique $V_e(\vec{r})$ dont nous allons calculer l'énergie d'interaction avec les charges contenues dans S_0. Cette énergie s'écrit :

$$W = \int d^3r' \quad \rho(\vec{r}') \quad V_e(\vec{r}') \tag{40}$$

où le potentiel $V_e(\vec{r}')$ s'exprime en fonction de la densité de charges $\rho_e(\vec{r}')$ qui le crée [$\rho_e(\vec{r}') = 0$ si $r' < R_1$] par :

$$Ve(\vec{r}') = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3r'' \frac{\rho_e(\vec{r}'')}{|\vec{r}' - \vec{r}''|} \tag{41}$$

Si nous utilisons le développement (37) de $1 / |\vec{r}' - \vec{r}''|$, il vient :

$$V_e(\vec{r}') = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{lm} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} (-1)^m \quad T_{l-m} \quad r'^l \quad Y_l^m(\theta',\phi') \tag{42}$$

avec :

$$T_{lm} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int d^3r'' \quad \rho_e(\vec{r}'') \quad \frac{Y_l^m(\theta'',\phi'')}{r''^{l+1}} \tag{43}$$

Les T_{lm} peuvent être appelés "moments multipolaires vers l'intérieur" du système de charges décrit par ρ_e (par opposition aux Q_{lm} qui sont des "moments multipolaires vers l'extérieur"). Ils donnent le développement de V_e sur les fonctions harmoniques $r^l \, Y_l^m(\theta,\phi)$, c'est-à-dire les termes de degré l dans le développement de V_e en puissances croissantes de x, y et z au voisinage de l'origine.

Les relations d'orthogonalité des harmoniques sphériques donnent immédiatement :

$$W = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m \; T_{l-m} \; Q_{lm} \qquad (44)$$

Les moments multipolaires Q_{lm} d'un système de charges caractérisent donc aussi bien le champ électrique qu'elles créent à l'extérieur que leur énergie d'interaction avec un potentiel externe V_e auquel elles sont soumises.

4 - Discussion physique

Examinons maintenant à quoi correspondent physiquement les divers moments multipolaires Q_{lm}.

a) Moments $l = 0$; charge totale

On sait que Y_0^0 est une constante :

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad (45)$$

On a donc :

$$Q_{00} = \int d^3r' \; \rho(r') \qquad (46)$$

et Q_{00} est simplement la charge totale du système envisagé. Pour des particules ponctuelles de charges q_n :

$$Q_{00} = \sum_n q_n \qquad (46')$$

La contribution de Q_{00} à $V(\vec{r})$ [terme $l = m = 0$ de (33)] est :

$$\frac{Q}{4\pi\varepsilon_0} \; \frac{1}{r}$$

et le champ électrique correspondant vaut :

$$\frac{Q}{4\pi\varepsilon_0} \; \frac{\vec{r}}{r^3}$$

Ce champ est invariant par rotation ; c'est celui que créeraient l'ensemble des charges si elles étaient toutes ramenées à l'origine . Lorsqu'on s'intéresse au champ créé par un système de charges à grande distance [$r >> R_0$, dimension caractéristique de l'extension spatiale du système , on fait souvent l'approxima-

tion qui consiste à ne retenir que le terme l = m = 0 dans le développement (33) de V(r) (*).

b) Moment l = 1 ; dipôle électrique

Comme :

$$\begin{cases} Y_1^{\pm 1}(\theta,\phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \; e^{\pm i\phi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left(\frac{x \pm iy}{r}\right) \\ Y_1^{0}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \end{cases} \qquad (47)$$

On obtient :

$$\begin{aligned} Q_{1\pm 1} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3r' \; \rho(\vec{r}') \; [\, x' \pm iy' \,] \\ Q_{10} &= \int d^3r' \; \rho(\vec{r}') \; z' \end{aligned} \qquad (48)$$

Considérons ces trois quantités comme les composantes standard d'un vecteur $\vec{Q}_1$ [cf. (VII-34)] ; ses composantes cartésiennes correspondantes valent alors :

$$Q_{1\,x} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\, Q_{1-1} - Q_{11} \,] = \int d^3r' \; \rho(\vec{r}') \; x' \qquad (49)$$

(et des formules analogues pour les composantes y et z). Donc :

$$\vec{Q}_1 = \int d^3r' \; \vec{r}' \; \rho(\vec{r}') \qquad (50)$$

ou, pour des charges ponctuelles :

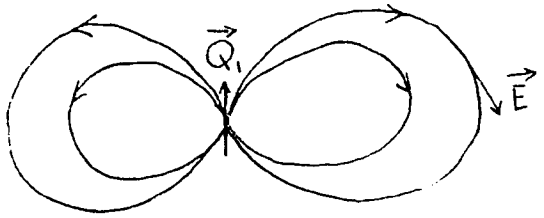
$$\vec{Q}_1 = \sum_n q_n \vec{r}_n \qquad (50')$$

Nous retrouvons pour $\vec{Q}_1$ le dipôle électrique habituel d'un ensemble de charges (nous voyons l'intérêt du facteur $\sqrt{4\pi(2l+1)}$ introduit plus haut dans Q_{lm}). En utilisant à nouveau les égalités (47), on vérifie que la contribution correspondante à $V(\vec{r})$ s'écrit :

(*) *Pour que cette approximation soit bonne, il faut bien sûr que* Q_{oo} *ne soit pas nul (système de charges non neutre), et que :* $|Q_o| \gg |Q_{1m}| / r \;,\; |Q_{2m}| / r^2 \;, \ldots$

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \qquad \frac{\vec{Q}_1 \cdot \vec{r}}{r^3}$$

On obtient donc un potentiel qui varie en r^{-2} ; pour le champ électrique, il est proportionnel à r^{-3} et a l'allure bien connue d'un champ dipolaire :



Il arrive souvent en physique que l'on ait à étudier des systèmes physiques électriquement neutres (atomes, molécules par exemple). Le champ dipolaire est alors la contribution principale du champ électrique qu'ils créent, à suffisamment grande distance.

Si maintenant le système est placé dans un potentiel extérieur, on peut isoler dans (44) la contribution du dipôle électrique à l'énergie d'interaction W, contribution qui s'écrit :

$$\sum_m (-1)^m \; Q_{1m} \; \bar{\ }_{1m} = - \vec{Q}_1 \quad \vec{E}_1(\vec{0}) \tag{51}$$

où $\vec{E}_e(\vec{0})$ est le champ électrique crée à l'origine par les charges externes :

$$\vec{E}_e(0) = - \vec{\nabla} \{ V_e(\vec{r}) \}_{\vec{r}=0} \tag{52}$$

[La démonstration est élémentaire et peut être par exemple trouvé dans le complément E_x de la référence (13) . Lorsque le système étudié est de dimensions très petites (comparé à une distance caractérisque sur laquelle varie le champ $\vec{E}_e(\vec{r})$] , on peut souvent tronquer l'énergie d'intéraction W aux termes $l \leqslant 1$; en fait on peut alors même se limiter à l'expression (51) en ignorant le terme $l = 0$ qui s'écrit $Q_{\delta 0} \; V_e(0)$, et donne donc une constante sans conséquences physiques sur l'évolution du système soumis au potentiel

extérieur. Cette situation se présente par exemple lorsque l'on veut étudier la dynamique d'un atome soumis à l'action d'un potentiel électrique créé par des électrodes de dimensions macroscopiques.

c) Moment l = 2 ; quadrupôle électrique

On calcule facilement à partir de l'expression des $Y_2^m(\theta,\phi)$:

$$\begin{cases} Q_{2\pm2} = \frac{\sqrt{6}}{4}\int d^3r' \ \rho(\vec{r}')[\,x' \pm iy'\,]^2 \\ Q_{2\pm1} = \mp\frac{\sqrt{6}}{2}\int d^3r' \ \rho(\vec{r}') \ z'\,[\,x' \pm iy'] \\ Q_{20} = \frac{1}{2}\int d^3r' \ \rho(\vec{r}') \ [\,3z'^2 - \vec{r}'^2] \end{cases} \qquad (53)$$

Pour un ensemble de charges ponctuelles ces formules deviennent :

$$\begin{cases} Q_{2\pm2} = \frac{\sqrt{6}}{4}\sum_n q_n\,[\,x_n \pm iy_n\,]^2 \\ Q_{2\pm1} = \mp\frac{\sqrt{6}}{2}\sum_n q_n \ z_n[\,x_n \pm iy_n] \\ Q_{20} = \frac{1}{2}\sum_n q_n\,[\,3z_n^2 - \vec{r}_n^{\,2}] \end{cases} \qquad (53')$$

Le potentiel correspondant varie en r^{-3}, le champ en r^{-4}. On se reportera à des ouvrages d'électromagnétisme pour trouver des figures représentant l'allure des cartes de champs correspondantes [une façon simple de visualiser un système de charges quadrupolaire pur, c'est-à-dire de Q_0 et Q_1 nuls, est de considérer un ensemble de deux dipôles opposés].

On montre facilement que la contribution à l'interaction W du système de charges avec le potentiel $V_e(\vec{r})$ fait apparaître le produit de $\overline{\overline{Q}}_2$ par le vecteur des dérivées premières à l'origine des composantes du champ $\vec{E}_e(\vec{r})$.

Exercice :

Montrer que, pour un système de charges ponctuelles, les termes l = 2 du développement (44) s'écrivent (contraction de deux tenseurs cartésiens d'ordre deux) :

$$\sum_{i,j} \{ [\frac{\delta^2 V_e}{\delta x_i \, \delta x_j}]_{\vec{r}=0} \times \sum_n q_n \, x_{in} \, x_{jn} \}$$

où $x_{in} = x_n$, y_n ou z_n

si i = 1, 2, 3

d) Généralisation ; moments l-polaires électriques

Plus la valeur de l que l'on considère est élevée, plus le champ électrique correspondant varie dans l'espace de façon compliquée, et plus vite il décroit à l'infini [en $r^{-(l+2)}$] ; ce champ dépend des 2l+1 composantes du moment Q_l. Dans beaucoup de cas, cette décroissance rapide à l'infini permet de tronquer la sommation (33) à une faible valeur de l (par exemple l = 2), ce qui apporte souvent une simplification considérable aux calculs.

Remarque : influence de l'origine choisie sur la valeur des Q_{lm}.

Tous les moments Q_{lm}, sauf Q_{oo}, dépendent à priori de l'origine des axes choisie pour les évaluer. Considérons cependant un système de deux charges opposées, + q et - q ; on a alors :

$$\vec{Q}_1 = q \, (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \qquad (54)$$

et il est clair que $\vec{Q}_1$ est indépendant de l'origine choisie. Cette propriété se généralise : pour un système dont tous les moments Q_o, $\vec{Q}_1 \ldots Q_{l-1\ m}$ sont nuls dans un référentiel donné, ces moments restent nuls par translation des axes ; quant à la valeur des premiers moments multipolaires non nuls, d'ordre l, elle ne varie pas dans cette translation des axes.

Exercice :

Démontrer cette propriété. Pour cela, on pourra considérer une translation de $\delta\vec{r}_o$ de l'origine des axes et calculer la variation δQ_{lm} de Q_{lm}.

On fait alors apparaître la quantité :

$$\vec{\nabla} \{r'^{l} Y_l^m(\theta',\phi')\}$$

dont on montrera que les 3 composantes sont des fonctions harmoniques homogènes de degré l-1 de x', y' et z'. On en déduira que ces composantes sont des combinaisons linéaires des $r'^{l-1} Y_{l-1}^{m'}(\theta',\phi')$ et que Q_{lm} s'exprime en fonction des $Q_{l-1\ m'}$.

5 - Opérateurs en mécanique quantique

Pour un ensemble de N charges ponctuelles, la définition générale (14) s'écrit :

$$Q_{lm} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \sum_{n=1}^{N} q_n (r_n)^l Y_l^m(\theta_n, \phi_n) \qquad (55)$$

où r_n, θ_n, ϕ_n sont les composantes sphériques de la position $\vec{r}_n$ de la $n^{ième}$ particule, de charge q_n. L'expression :

$$(r_n)^l Y_l^m(\theta_n,\phi_n)$$

est une fonction homogène (harmonique) de degré n des coordonnées cartésiennes x_n, y_n, z_n de cette particule. Cette fonction peut être notée $F_{lm}(\vec{r}_n)$:

$$F_{lm}(\vec{r}_n) = F_{lm}(x_n, y_n, z_n) = (r_n)^l Y_l^m(\theta_n,\phi_n) \qquad (56)$$

l'opérateur quantique correspondant à (55) sera simplement obtenu en remplaçant x_n, y_n et z_n par les opérateurs X_n, Y_n et Z_n (aucune symétrisation n'est nécessaire : ces opérateurs commutent) :

$$Q_{lm}^{(op.)} = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_n q_n F_{lm}(\vec{R}_n) \qquad (57)$$

Exemples :

La charge totale (l = m = 0) donne un opérateur qui est simplement un nombre (opérateur scalaire), commutant avec tout autre opérateur ; le dipôle électrique donne :

$$\vec{p}^{(op.)} = \sum_n q_n \vec{R}_n \qquad (58)$$

etc...

Montrons que chaque opérateur Q_{lm} est la composante $Q = m$ d'un opérateur tensoriel irréductible d'ordre $K = l$. Nous allons pour cela raisonner dans l'espace des états $\mathcal{E}$ d'une particule unique ; la généralisation à un ensemble de plusieurs particules est immédiate. Par définition de l'opérateur quantique associé à F_{lm}, on a :

$$F_{lm}^{(op.)} \, | \, \vec{r} > \; = \; r^l \; Y_l^m \, (\theta,\phi) | \, \vec{r} > \qquad (59)$$

Calculons l'action en représentation $|\vec{r}>$ du transformé de $F_{lm}^{(op.)}$ par rotation :

$$F_{lm}^{(op.)\,\prime} \; = \; R_{\vec{u}} \, (\phi) \; F_{lm}^{(op.)} \; R_{\vec{u}}^{+} \, (\phi) \qquad (60)$$

Si nous introduisons également le point $\vec{r}'$ transformé de $\vec{r}$ par la rotation $(R_{\vec{u}} \, (\phi))^{-1}$ dans l'espace habituel :

$$\vec{r}' \; = \; (R_{\vec{u}} \, (\phi))^{-1} \; \vec{r} \qquad (61)$$

nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} & R_{\vec{u}}(\phi) \; F_{lm}^{(op.)} \; R^{+}_{\vec{u}}(\phi) \; |\vec{r}> \\ & \quad = R_{\vec{u}}(\phi) \; F_{lm}^{(op.)} \; |\vec{r}'> \\ & \quad = r'^{\,l} \; Y_l^m(\theta',\phi') \; R_{\vec{u}}(\phi) \; |\vec{r}'> \\ & \quad = r'^{\,l} \; Y_l^m(\theta',\phi') \; |\vec{r}> \end{aligned} \qquad (62)$$

or :

$$Y_l^m \, (\theta',\phi') \; = \sum_{m'} \; (R^{[j=l]} \, (\vec{u},\phi) \,)_{m'm} \; Y_l^{m'} \, (\theta,\phi) \qquad (62')$$

[transformation par rotation d'un moment cinétique $j = l$], de sorte que l'égalité (62), valable quel que soit le ket de base $|\vec{r}>$, donne :

$$R_{\vec{u}}(\phi)\ F_{lm}^{(op.)}\ R_{\vec{u}}^{+}(\phi)$$

$$= \sum_{m'} \left(R^{[j=l]}(\vec{u},\phi)\right)_{m'm}\ F_{lm}^{(op.)} \qquad (63)$$

Cette relation n'est autre que la définition même d'un opérateur tensoriel irréductible. En effectuant la somme des opérateurs F_{lm} associés à chacune des particules, et agissant dans des espaces des états différents, on démontre que Q_{lm} se transforme par rotation également suivant (63).

La parité de l'opérateur Q_{lm} est $(-1)^l$. En effet, si S_o désigne l'opération de parité (complément V-A) :

$$S_o\ F_{lm}^{(op.)}\ S_o^{+}\ |\vec{r}\rangle = S_o\ F_{lm}^{(op.)}\ |-\vec{r}\rangle$$

$$= S_o\ r^l\ Y_l^m(\pi-\theta\ ,\ \phi+\pi)\ |-\vec{r}\rangle$$

$$= (-1)^l\ r^l\ Y_l^m(\theta,\phi)\ S_o\ |\vec{r}\rangle$$

$$= (-1)^l\ F_{lm}^{(op.)}\ |\vec{r}\rangle \qquad (64)$$

l'opérateur Q_o (scalaire) est donc pair, $\vec{Q}_1$ (dipôle) est impair, etc...

B - MOMENTS MULTIPOLAIRES MAGNETIQUES

1 - Développement du champ magnétique statique $\vec{B}$ à l'extérieur d'un système de courants

Considérons maintenant un système de courants stationnaires de densité $\vec{J}(\vec{r})$; on a :

$$\vec{\nabla}\ .\ \vec{J}(\vec{r}) = -\frac{\delta\rho}{\delta t} = 0 \qquad (65)$$

Nous remarquons déjà une première différence entre le problème de magnétostatique considéré ici et celui d'électrostatique du §A précédent : nous ne pouvons pas nous donner de façon indépendante les 3

composantes de $\vec{J}$ en chaque point de l'espace [alors que $\rho(\vec{r})$ était absolument quelconque dans S_o]. Une autre différence est bien sur le caractère vectoriel des sources de champs $\vec{J}$. Nous introduirons le potentiel vecteur $\vec{A}$ qui satisfait à :

$$\Delta\vec{A} = -\mu_o \vec{J} \tag{66}$$

La solution de cette équation, satisfaisant aux conditions aux limites appropriées, est :

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_o}{4\pi}\int d^3r' \ \frac{\vec{J}(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \tag{67}$$

comme :

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} \times \frac{\vec{J}(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \vec{\nabla}_{\vec{r}}\left[\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\right] \times \vec{J}(\vec{r}') \tag{68}$$

on en déduit (loi de Biot et Savart) :

$$\begin{aligned} B(\vec{r}) &= \vec{\nabla}_{\vec{r}} \times \vec{A}(\vec{r}) \\ &= \frac{\mu_o}{4\pi}\int d^3r' \ \frac{\vec{J}(\vec{r}') \times [\vec{r}-\vec{r}']}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3} \end{aligned} \tag{69}$$

Si maintenant nous utilisons le développement (37), il vient :

$$\begin{aligned} \vec{B}(\vec{r}) &= \frac{\mu_o}{4\pi}\int d^3r' \ \vec{J}(\vec{r}') \times \vec{\nabla}_{\vec{r}'}\left[\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\right] \\ &= \frac{\mu_o}{4\pi} \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1}(-1)^m \frac{Y_l^m(\theta,\phi)}{r^{l+1}} \\ &\qquad \times \int d^3r' \ \vec{J}(\vec{r}') \times \vec{\nabla}_{\vec{r}'}[r'^l \, Y_l^m(\theta',\phi')] \end{aligned} \tag{70}$$

Le problème est maintenant de ramener cette expression à un développement du même type que (34) [sans produit vectoriel]. Ce problème est a priori soluble : dans une région de l'espace où $\vec{J}$ est nul, $\vec{B}$ obéit aux mêmes équations [divergence et rotationnel nul] que $\vec{E}$ dans des régions où ρ est nul. L'identification des développements nous

conduira à introduire des constantes M_{lm} qui jouent vis à vis de $\vec{B}$ le rôle des Q_{lm} vu du champ $\vec{E}$; les M_{lm} seront les moments multipolaires magnétiques du système de courants stationnaires.

Dans (70) apparait le vecteur $\vec{\nabla}[r^l Y_l^m]$, qu'il s'agit de transformer. C'est un vecteur à divergence et rotationnels nuls, puisque c'est le gradient d'une fonction harmonique [c'est par exemple la contribution d'ordre l,m au développement du champ $\vec{E}_e(\vec{r})$ obtenu à partir de (42)]. On a donc :

$$\vec{\nabla}[r^l \; Y_l^m(\theta,\phi)] = \vec{\nabla} \times \vec{K}_{lm}(\vec{r}) \tag{71}$$

où $\vec{K}_{lm}$ est une fonction à déterminer. Montrons que :

$$\vec{K}_{lm} = -\frac{1}{l+1} \{\vec{r} \times \vec{\nabla}[r^l Y_l^m(\theta,\phi)]\} \tag{72}$$

En effet, la formule qui donne le rotationnel d'un produit vectoriel entraîne que :

$$\vec{\nabla} \times \{\vec{r} \times \vec{\nabla}[r^l Y_l^m]\} = -3\,\vec{\nabla}[r^l Y_l^m] + \vec{\nabla}[r^l Y_l^m] - (\vec{r} \cdot \vec{\nabla}) \quad \vec{\nabla}[r^l Y_l^m] \tag{73}$$

[on a utilisé le fait que $\vec{\nabla} \cdot \vec{r} = 3$ et que $\Delta(r^l Y_l^m) = 0$]. D'autre part, la formule du gradient d'un produit scalaire de vecteur donne :

$$\vec{\nabla}\{\vec{r} \cdot \vec{\nabla}[r^l Y_l^m]\} = \vec{\nabla}[r^l Y_l^m] + (\vec{r} \cdot \vec{\nabla}) \quad \vec{\nabla}[r^l Y_l^m] \tag{74}$$

[car $\vec{\nabla} \times \vec{r} = 0$, et le rotationnel d'un gradient est nul]. On a également :

$$\vec{r} \cdot \vec{\nabla}[r^l Y_l^m] = r\frac{\partial}{\partial r}(r^l Y_l^m) = l\, r^l Y_l^m \tag{75}$$

qui, reporté dans (74), permet de faire apparaître $\vec{\nabla}[r^l Y_l^m]$ dans les deux membres et donne :

$$(l-1)\,\vec{\nabla}[r^l Y_l^m] = (\vec{r} \cdot \vec{\nabla}) \quad \vec{\nabla}[r^l Y_l^m] \tag{76}$$

En combinant cette égalité avec (73), on obtient (72).

Dans l'expression (70) de B apparaît alors l'intégrale :

$$\vec{I}_{l,m} = \int d^3r' \; \vec{J}(\vec{r}') \times \vec{\nabla}_{\vec{r}'} [r'^l Y_l^m]$$

$$= -\frac{1}{l+1} \int d^3r' \; \vec{J}(\vec{r}') \times \{\vec{\nabla}_{r'} \times (\vec{r}' \times \vec{\nabla}_{r'} [r'^l Y_l^m])\} \quad (77)$$

qui vaut :

$$\vec{I}_{lm} = -\frac{1}{l} \int d^3r' \; [\vec{\nabla}_{r'} \cdot (\vec{r}' \times \vec{J})] \; \vec{\nabla}_{r'} [r'^l Y_l^m] \quad (78)$$

En effet, la $i^{ème}$ composante de $\vec{I}_{lm}$ est donnée par :

$$-(l+1) [\vec{I}_{lm}]_i = \int d^3r' \sum_{jk} \sum_{mn,pq} \epsilon_{ijk} \; \epsilon_{kmn} \; \epsilon_{npq} \; J_j \; \partial_m x'_p \; \partial_q [r'^l Y_l^m]$$

$$= \int d^3r' \sum_{j} \sum_{mn,pq} [\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}] \epsilon_{npq} \; J_j \; \partial_m x'_p \; \partial_q [r'^l Y_l^m]$$

$$= \int d^3r' \sum_{jpq} \epsilon_{jpq} \; J_j \; \partial_i x'_p \; \delta_q [r'^l Y_l^m] - \epsilon_{ipq} \; J_j \; \partial_j x'_p \; \partial_q [r'^l Y_l^m] \quad (79)$$

Le second terme du second membre est nul ; en effet, par intégration par parties, on fait apparaître l'expression

$$\sum_j \partial_j J_j = \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (80)$$

Comme $J_j \; \partial_i \; x_p$ peut être remplacé par $J_j \; [x_p \; \partial_i + \delta_{pi}]$, il vient :

$$-(l+1) \; \vec{I} = -\int d^3r' \; \{\vec{\nabla}_{\vec{r}'} \cdot (\vec{J} \times \vec{r}')\} \; \vec{\nabla}_{\vec{r}'} [r'^l Y_l^m]$$

$$- \int d^3r' \; \vec{J}(\vec{r}') \times \vec{\nabla}_{\vec{r}'} [r'^l Y_l^m]$$

[où, au second membre, apparaît le terme $-\vec{I}$], ce qui donne bien le résultat annoncé.

Le champ $\vec{B}$ se met donc sous la forme :

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{l,m} \frac{(-1)^{m+1}}{l(2l+1)} \frac{Y_l^m(\theta,\phi)}{r^{l+1}}$$

$$\int d^3r' \left[\vec{\nabla}_{\vec{r}'} \cdot (\vec{r}' \times \vec{J}) \right] \vec{\nabla}_{r'} [r'^l Y_l^m] \qquad (73)$$

Le courant $\vec{J}$ n'intervient ici que par l'intermédiaire de la divergence $\vec{\nabla} \cdot (\vec{r} \times \vec{J})$. Développons cette fonction sous la forme :

$$D(\vec{r}) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{r} \times \vec{J}) = \sum_{l'm'} d_{l'm'}(r)\, Y_{l'}^{m'*}(\theta,\phi) \qquad (74)$$

D'autre part, dans (73) apparaît le gradient de $[r'^l Y_l^m]$, qui est une fonction harmonique homogène de degré (l-1) des coordonnées ; elle se développe donc sur les $Y_{l-1}^{m'}$ et du fait de l'orthogonalité des harmoniques sphériques, on voit que seule la valeur $l' = l - 1$ dans la somme (74) intervient. Si donc nous posons :

$$\mathcal{D}(\vec{r}) = \sum_{l'm'} \frac{1}{l'+1} d_{l'm'}(r)\, Y_{l'}^{m'*}(\theta,\phi) \qquad (74')$$

il vient :

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{lm} \frac{(-1)^{m+1}}{2l+1} \int d^3r'\, \mathcal{D}(\vec{r}')\, \vec{\nabla}_{r'} \left[r'^l Y_l^{-m} \frac{Y_l^m}{r'^{l+1}} \right] \qquad (75)$$

On reconnait le gradient :

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}'} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = - \vec{\nabla}_{\vec{r}} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \qquad (76)$$

et :

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{lm} \frac{(-1)^m}{2l+1} \vec{\nabla} \left(\frac{Y_l^m}{r^{l+1}} \right) \int d^3r'\, \mathcal{D}(\vec{r}') \left[r'^l Y_l^m(\theta',\phi') \right]$$

$$= - \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{lm} (-1)^m \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, M_{l-m}\, \vec{\nabla} \left[\frac{Y_l^m(\theta,\phi)}{r^{l+1}} \right] \qquad (77)$$

où l'on a posé :

$$\boxed{M_{lm} = - \frac{1}{l+1} \int d^3r'\, \vec{\nabla} \cdot \left[\vec{r}' \times \vec{J}(\vec{r}') \right] r'^l\, Y_l^m(\theta',\phi')} \qquad (78)$$

Les moments multipolaires magnétiques M_{lm} sont en tous points les analogues des Q_{lm}.

2 - Cas de charges ponctuelles

Considérons un ensemble de charges ponctuelles, dont le mouvement donne lieu à une densité de courant $\vec{J}$ quasistationnaire. Si S_o est une surface à l'intérieur de laquelle se déplacent les particules, $\vec{J}$ est identiquement nul à tout instant, a l'extérieur de S_o. Alors, le théorème de la divergence permet d'écrire :

$$\int_{S_o} d^3r' \, \vec{\nabla} \cdot \{ r'^l \, Y_l^m(\theta',\phi') \, \vec{r}' \times \vec{J}(\vec{r}') \} = 0 \qquad (79)$$

[puisque cette intégrale se ramène au flux sur S_o d'un vecteur identiquement nul] . En développant la divergence du vecteur entre accolades de cette égalité on fait apparaître l'expression (78) et il vient :

$$\boxed{M_{lm} = \frac{1}{l+1} \int d^3r' \, [\vec{r}' \times \vec{J}(\vec{r}')] \cdot \vec{\nabla} [r'^l \, Y_l^m(\theta',\phi')]} \qquad (80)$$

qui donne donc une définition des moments multipolaires magnétiques équivalente à (78). Sous cette forme, il est immédiat d'écrire la valeur de M_{lm} pour un système de charges en mouvement quasistationnaire :

$$M_{lm} = \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{1}{l+1} \frac{q_n}{m_n} (\vec{r}_n \times \vec{p}_n) \right] \cdot \vec{\nabla} [r_n^l \, Y_l^m(\theta_n,\phi_n)] \qquad (81)$$

Si, de plus, les particules ont un spin qui porte un moment magnétique dipolaire $\vec{\mu}_n$, le moment M_{lm} devient :

$$M_{lm} = \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{l+1} \frac{q_n}{m_n} [(\vec{r}_n \times \vec{p}_n) + \vec{\mu}_n] \cdot \vec{\nabla} [r_n^l \, Y_l^m(\theta_n,\phi_n)] \qquad (81')$$

Exercice :

Démontrer cette formule.

3 - Discussion physique

a) Moment l = 0

On voit immédiatement sur (80) que le moment multipolaire M_{oo} est identiquement nul. Il n'existe donc pas de monopôle magné-

$$\vec{M}_1 = \frac{q}{2m} [\vec{l} + g_s \vec{s}] \qquad (86)$$

où s est le spin total $\sum_n s_n$.

La discussion continuerait de même pour les moments multipolaires magnétiques d'ordre l = 2,3, etc...

4 - Opérateurs quantiques

En mécanique quantique, on reprend les expression précédentes, et on remplace $\vec{r}_n$ par l'opérateur $\vec{R}_n$, $\vec{p}_n$ par l'opérateur $\vec{P}_n$, et $\vec{s}_n$ dans (85) par l'opérateur spin $\vec{S}_n$. Par exemple, $\vec{M}_1$ devient l'opérateur

$$\vec{M}_1 = \sum_{n=1}^{N} \frac{q_n}{2m_n} \vec{L}_n + g_n \mu_B \frac{\vec{S}_n}{\hbar} \qquad (87)$$

où le magnéton de Bohr μ_B est défini par

$$\vec{\mu}_B = \frac{q(el.).\hbar}{2m_{(el.)}} \qquad (88)$$

[$q_{(ee)}$ et $m_{(el.)}$ sont les charge et masse de l'électron]. On remarque immédiatement sur (87) que, comme $\vec{Q}_1$, le moment dipolaire magnétique $\vec{M}_1$ est vectoriel ; cependant, ce n'est pas un opérateur impair, mais pair. Cette propriété se généralise : les M_{lm} sont des opérateurs tensoriels irréductibles K = l, Q = m, de parité $(-)^{l+1}$, opposée à celle des multipôles électriques correspondants (*).

(*) *Un tel résultat se comprend bien si l'on examine (81), où il apparaît des expressions du type* $\vec{L} \cdot \vec{\nabla}$ [ ] ; *le groupe* $\vec{L} \cdot \vec{\nabla}$ *est scalaire et l'expression a la nature tensorielle de la fonction entre crochets, c'est-à-dire* $R^l \; Y_l^m$ *qui est, nous l'avons vu, un tenseur* $T^{(K=l)}_{Q=m}$. *D'autre part,* $\vec{\nabla} \{r^l \; Y_l^m\}$ *a* $(-1)^{l+1}$ *comme parité, l'opérateur L est pair, ce qui explique la parité de* M_{lm}.

C - MOMENTS MULTIPOLAIRES D'UN SYSTEME QUANTIQUE DANS UNE MULTIPLICITE DE MOMENT CINETIQUE J DONNE

1 - Généralités

Considérons un système quantique (noyau, atome, molécule,...) isolé dont le moment cinétique J est donné [son état appartient à un sous-espace de dimensions (2J+1) engendré par les kets $|J,M\rangle$] . Les propriétés électriques et magnétiques de ce système dépendent de ses moments multipolaires Q_{lm} et M_{lm}, qui permettent de calculer les intéractions du système avec des charges et courants extérieurs. Le fait que les Q_{lm} et les M_{lm} soient les opérateurs tensoriels irréductibles permet de leur appliquer le théorème de Wigner-Eckart et les règles de sélection correspondantes (en particulier la règle du triangle). Comme nous allons le voir, ceci permet de considérablement limiter le nombre de moments multipolaires à faire intervenir. De plus, si les états $|J,M\rangle$ ont une parité $\Pi = \pm 1$ définie, la valeur moyenne des Q_{lm} sera nulle chaque fois que l est impair ; celle des M_{lm} nulle chaque fois que l est pair [les moments non-nuls seront $\vec{M}_1$, $\vec{E}_2$, $\vec{M}_3$, etc...] . Examinons les cas les plus simples.

a) Cas où J = 0

Le nombre quantique J = 0 est nul pour un certain nombre de systèmes physiques (particule , atomes de gaz rares comme ^4He etc...). Le théorème de Wigner-Eckart impose alors K = 0 : les interactions électromatiques de tels systèmes avec l'expérieur sont donc entièrement caractérisées par un paramètre unique, leur charge totale Q_0. Donc, les particules de spin nul n'ont de moments ni dipolaire, ni quagrupolaire etc...

Remarque :

Un atome de ^4He, dont l'état fondamental électronique ^1So est de moment cinétique J = 0 (et dont le spin nucléaire S est également nul) a une charge totale nulle. C'est donc, dans cet état, une particule totalement insensible aux interactions électromagnétiques. Il faut cependant garder à l'esprit qu'un champ électrique $\vec{E}$ (par exemple) peut mélanger l'état fondamental ^1So aux niveaux $^1P_1$ de l'atome, ce qui fait apparaitre un dipôle électrique proportionnel à $\vec{E}$ (calcul de la polarisabilité de l'état fondamental ^1So dans le

cadre de la théorie des perturbations du premier ordre). Il en résulte une énergie de couplage de l'atome avec le champ $\vec{E}$ qui est du second ordre en $\vec{E}$ (produit du champ par le dipôle induit). Par l'effet de la distorsion de ses couches électroniques l'atome d'Hélium redevient donc sensible aux interactions électromagnétiques (mais d'un ordre plus élevé). Il est clair que les règles de sélection que nous énonçons dans ce paragraphe tombent dès qu'on ne peut plus négliger le mélange des états $|J,M\rangle$ avec d'autres états de nombre quantique J différent.

b) Cas $J = 1/2$

Beaucoup de particules ont un spin 1/2 : électron, proton, neutron, ion $^4He^+$, noyau de ^3He, etc... Ces particules sont caractérisées du point de vue des interactions électromagnétiques avec l'extérieur par leur charge (éventuellement nulle, comme dans le cas du neutron) et leur moment dipolaire magnétique ; le moment dipolaire électrique est nul par parité.

Remarque :

L'opération de parité n'est pas considérée comme loi de symétrie fondamentale en physique. Ceci explique des recherches expérimentales du moment dipolaire électrique du neutron ou du noyau de ^3He (la particule α, noyau de ^4He, ne peut pas avoir de dipôle d'après l'invariance par rotation). Un tel moment n'a jusqu'à maintenant jamais été mis en évidence (les limites supérieures expérimentales sont maintenant très faibles) ; il faut remarquer qu'un résultat expérimental positif impliquerait également une violation de la symétrie par renversement du temps (cf. Chapitre VII, § D-2-d).

c) Cas $J = 1$

On peut citer en exemple le niveau 6^3P, du mercure, etc... Des particules de J = 1 sont caractérisées par leur charge, leur dipôle magnétique et leur quadrupôle électrique.

2 - Moment quadrupolaire électrique d'un noyau

Examinons plus en détail un cas important d'application, le moment quadrupolaire électrique d'un noyau de spin nucléaire $I \geqslant 1$. Le fait de considérer I comme un nombre quantique fixé

revient à ignorer l'existence des autres niveaux du noyau, ce qui est justifié dans beaucoup de problèmes, du fait de la haute énergie des niveaux nucléaires excités. Cette approximation est par exemple très bonne en physique atomique ou nucléaire où l'échelle des énergies est de l'ordre de l'électron-volt.

Si X_n, Y_n et Z_n désignent les coordonnées des nucléons, q_p la charge du proton, l'égalité (55) donne :

$$Q_{2\ \pm 2} = \frac{\sqrt{6}}{4}\, q_p \sum_{\text{protons}} (X_n \pm iY_n)^2$$

$$Q_{2\ \pm 1} = \mp \frac{\sqrt{6}}{2}\, q_p \sum_{\text{protons}} Z_n\, (X_n \pm iY_n)$$

$$Q_{2\ 0} = \frac{1}{2}\, q_p \sum_{\text{protons}} (3\, Z_n^2 - R_n^2) \qquad (89)$$

[où $R_n^2 = X_n^2 + Y_n^2 + Z_n^2$]. Le théorème de Wigner-Eckart indique alors que le quadrupôle électrique $\overline{\overline{Q}}$ est proportionnel à l'opérateur [cf. VII (146)]

$$\overline{\overline{I}}_{\pm 2} = \frac{1}{2}\, (I_\pm)^2$$

$$\overline{\overline{I}}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{2}\, (I_\pm I_z + I_z I_\pm)$$

$$\overline{\overline{I}}_{0} = \frac{1}{\sqrt{6}}\, (3\, I_z^2 - \vec{I}^2) \qquad (90)$$

de sorte que l'on peut écrire :

$$\overline{\overline{Q}} = \alpha(\tau\ ,\ I)\ \overline{\overline{I}} \qquad (91)$$

où la constante de proportionnalité est traditionnellement écrite sous la forme :

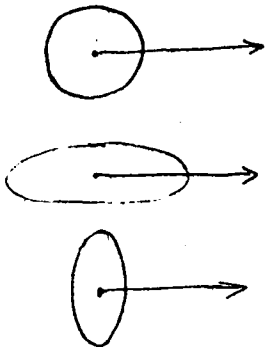
$$\alpha(\tau\ ,\ I) = \frac{\sqrt{6}/2}{\hbar^2\ I\ (2I - 1)}\ q_p\ Q(\tau\ ,\ I) \qquad (92)$$

[rappelons que $I \neq 0$ et $I \neq 1/2$]. La constante Q, homogène à une surface caractérise entièrement le moment quadrupolaire du noyau ;

elle est généralement donnée en barns (1 barn = 10^{-24} cm^2). Calculons la valeur moyenne de Q_{20} dans l'état $|I,I\rangle$ où la valeur propre de Iz a sa valeur maximale ; les facteurs numériques de (92) se simplifient alors et il vient :

$$Q = \sum_n \langle I,I| \; 3 Z_n^2 - R_n^2 \; |I,I\rangle \qquad (93)$$

Le signe de Q dépend de la façon dont la charge des protons est répartie dans le noyau. Q est nul pour une répartition sphérique positif pour un ellipsoïde des charges allongé (cigare), négatif pour un ellipsoïde aplati (galet).



$|I,I\rangle$ $\qquad Q = 0$

$|I,I\rangle$ $\qquad Q > 0$

$|I,I\rangle$ $\qquad Q < 0$

Remarques :

(i) - Un exemple important d'application des considérations qui précèdent est le calcul de l'hamiltonien hyperfin d'un atome. Si le spin nucléaire I est nul, cet hamiltonien est nul. Si I = 1/2, l'hamiltonien hyperfin est constitué du terme dipolaire magnétique (cf. par exemple le complément A_{XII} de la réf. (13)). Si I > 1, le potentiel électrique "vu" par les électrons dépend du quadrupôle électrique du noyau, ce qui se traduit par l'apparition d'un hamiltonien hyperfin quadrupolaire .

(ii) - Le calcul des probabilités de transitions électromagnétiques de systèmes quantiques entre multiplicités de nombres quantiques J différents ferait un autre exemple important de la théorie des moments multipolaires : évaluation de la polarisabilité des atomes, émission de photons quadrupolaires etc.,.

COMPLEMENT IX-A

OPERATEURS CHANGEANT LA SYMETRIE D'UN VECTEUR D'ETAT PAR PERMUTATION

Nous établissons dans ce complément un certain nombre de formules qui sont utiles dans le chapitre IX. On peut construire à partir d'un ket non-symétrisé comme celui écrit en (IX-6) :

$$\overbrace{|1 : k_1 \; ; \; 2 : k_2 \; ; \; \ldots \; ; \; n_\alpha : k_{n_\alpha}}^{n_\alpha} \; ; \; \overbrace{n_\alpha + 1 : k_{n_\alpha+1} \; ; \; \ldots \; n : k_n >}^{n_\beta}$$

$$= |1 : \phi_{k_1} > \otimes |2 : \phi_{k_2} > \otimes \ldots \otimes |n : \phi_{k_n} > \qquad (1)$$

des kets ayant la symétrie requise par échange des particules, soit lorsque les n_α premières sont d'espèces α (et les n_β suivantes d'espèces β), soit lorsque n_α est augmenté d'une unité (et n_β diminué de la même façon). Nous désirons trouver des opérateurs Q permettant de passer d'une situation à l'autre, et examiner leurs propriétés. Nous étudierons en premier le cas où les particules sont des fermions.

1. Fermions

a) Position du problème

Lorsque les n_α premières particules sont d'espèce α , il faut utiliser les antisymétriseurs (*) :

$$A(1,2,\dots n_\alpha) = \frac{1}{n_\alpha!} \sum_\lambda \varepsilon_\lambda \; P_\lambda(1,2,\dots n_\alpha) \tag{2}$$

$$A(n_\alpha+1, \dots n) = \frac{1}{n_\beta!} \sum_\lambda \varepsilon_\lambda \; P_\lambda(n_\alpha+1, \dots n) \tag{3}$$

où ε_λ désigne la parité de la permutation P_λ , les sommes sur λ comprennent toutes les permutations possibles des particules concernées (particules numérotées de 1 à n_α dans le premier cas, de $n_\alpha+1$ à n dans le second). Cette opération conduit aux kets :

$$|\overbrace{\alpha : k_1, k_2, \dots, k_{n_\alpha}}^{n_\alpha} ; \overbrace{\beta : k_{n_\alpha+1}, \dots k_n}^{n_\beta}\rangle$$

$$= \sqrt{n_\alpha!\, n_\beta!}\; A(1,\dots n_\alpha)\, A(n_\alpha+1, \dots n)$$

$$|1:k_1 \; ; \; 2:k_2 \; ; \; \dots \; ; \; n_\alpha : k_{n_\alpha} \; ; \; n_\alpha+1 : k_{n_\alpha+1} \; ; \; n:k_n\rangle \tag{4}$$

On obtient une base orthonormée de l'espace des états d'un système de n_α particules α et n_β particules β en prenant l'ensemble des kets (4), pour des valeurs quelconques des indices k satisfaisant :

$$k_1 < k_2 < \dots < k_{n_\alpha}$$
$$k_{n_\alpha+1} < \dots < k_n \tag{5}$$

(le même état individuel n'apparaît jamais deux fois, ni pour les particules α, ni pour les particules β, mais il peut bien sûr être occupé par une particule α et une particule β).

Pour un système physique de $n_\alpha+1$ particules identiques α et $n_\beta-1$ particules identiques β , il faut utiliser les antisymétriseurs :

(*) Voir par exemple le chap. XIV, §B, de la référence (13) pour un rappel des propriétés des opérateurs A et P .

$$A(1,2,\ldots, n_\alpha, n_\alpha+1) = \frac{1}{(n_\alpha+1)!} \sum_\lambda \varepsilon_\lambda P_\lambda(1,2,\ldots n_\alpha, n_\alpha+1)$$

$$A(n_\alpha+2, \ldots, n) = \frac{1}{(n_\beta-1)!} \sum_\lambda \varepsilon_\lambda P_\lambda(n_\alpha+2, \ldots, n) \qquad (6)$$

qui sont analogues à ceux émis en (4), mais avec un regroupement différent des particules.

b) Changement de la symétrie d'un ket

Que se produit-il maintenant si l'on applique les opérateurs A écrits en (6) aux kets (4), déjà antisymétrisés de façon différente ? Il apparaît alors le produit d'opérateurs :

$$A(1,\ldots,n_\alpha+1)\, A(n_\alpha+2\ldots n)\, A(1\ldots n_\alpha)\, A(n_\alpha+1\ldots n)$$
$$= A(1,\ldots, n_\alpha+1)\, A(1\ldots n_\alpha) \times A(n_\alpha+2\ldots n)\, A(n_\alpha+1\ldots n)$$
$$= A(A,\ldots, n_\alpha+1)\, A(n_\alpha+1, \ldots n) \qquad (7)$$

Pour démontrer que le produit d'opérateurs A se réduit à cette forme simple, (où la particule $n_\alpha+1$ apparaît dans deux opérateurs A), on peut utiliser l'égalité satisfaite par toute permutation P_λ des n_α premières particules [cf. référence (13), relation (B-53) du chapitre XIV] :

$$P_\lambda\,(1,\ldots n_\alpha)\, A(1\ldots n_\alpha+1) = A(1\ldots n_\alpha+1)\, P_\lambda\,(1\ldots n_\alpha)$$
$$= \varepsilon_\lambda\, A(1,\ldots, n_\alpha+1) \qquad (8)$$

Le nombre ε_λ est la parité ± 1 de la permutation P_λ, qui est le même, que P_λ soit considéré comme permutation de n_α ou $n_\alpha+1$ particules (ε_λ dépend du nombre, pair ou impair, de transpositions P_{ij} dont P_λ est le produit). Par suite :

$$A(1, \ldots, n_\alpha+1)\, A(1, \ldots, n_\alpha) = \frac{1}{n_\alpha!} A(1, \ldots, n_\alpha+1) \sum_\lambda \varepsilon_\lambda P_\lambda\,(1, \ldots, n_\alpha)$$
$$= \frac{1}{n_\alpha!} A(1, \ldots, n_\alpha+1) \sum_\lambda (\varepsilon_\lambda)^2$$
$$= A(1, \ldots, n_\alpha+1) \qquad (9)$$

et de même :

$$A(1,\ldots n_\alpha)\, A(1,\ldots n_\alpha+1) = A(1,\ldots n_\alpha+1) \qquad (10)$$

Nous pouvons transformer l'expression (7) en utilisant les relations :

$$A\,(1, \ldots, n_\alpha+1) = \frac{1}{n_\alpha+1} A\,(1, \ldots, n_\alpha)\,[1 - \sum_{j=1}^{n_\alpha} P_{j,n_\alpha+1}]$$

$$= \frac{1}{n_\alpha+1}\,[\,1 - \sum_{j=1}^{n_\alpha} P_{j,n_\alpha+1}\,]\,A\,(1, \ldots n_\alpha) \qquad (11)$$

où apparaissent toutes les transpositions $P_{j,\,n_\alpha+1}$ de la particule $n_\alpha+1$ avec les n_α précédentes.

La première de ces égalités exprime qu'on peut construire toute permutation des particules numérotées 1, ... $n_\alpha+1$ de la façon suivante :

. partant de l'ordre de référence des particules, on effectue une transposition de la particule $n_\alpha+1$ avec celle des particule (j) qui l'a remplacée dans la disposition finale ;

. on effectue ensuite la permutation nécessaire des particules 1, ..., n_α.

Cette façon de faire étant unique et la parité d'une transposition étant -1, on arrive à la première égalité (11) [le coefficient $1/(n_\alpha+1)$ provient du n! dans la définition A ; cf. (2)] . La deuxième égalité s'établit de façon analogue (★).

(★) Elle correspond à la décomposition (unique) suivante de toute permutation des particules 1, 2, ..., $n_\alpha+1$:

. à partir de la disposition finale des particules, considérons la disposition intermédiaire où la particule (j) qui occupait la dernière place est transposée avec la particule $(n_\alpha+1)$ [cette dernière est ainsi ramenée à sa place de référence] .
La disposition intermédiaire peut être obtenue à partir de la disposition initiale par une permutation $P_\lambda\,(1, 2, \ldots, n_\alpha)$.

. La seconde opération est la transposition des particules (j) et $(n_\alpha+1)$.

La seconde des égalités (11) donne alors :

$$A\,(1,\ \ldots\ n_\alpha{+}1)\ A\,(n_\alpha{+}2\ \ldots\ n)\ A\,(1,\ \ldots\ n_\alpha)\ A\,(n_\alpha{+}1\ \ldots\ n)$$

$$= \frac{1}{n_\alpha+1}\left[\,1 - \sum_{j=1}^{n_\alpha} P_{j,\ n_\alpha+1}\,\right] A\,(1,\ \ldots\ n_\alpha)\ A\,(n_\alpha{+}1\ \ldots\ n) \tag{12}$$

Par suite, l'opérateur $Q_A\ (n_\alpha \to n_\alpha{+}1,\ n_\beta \to n_\beta{-}1)$ qui change la symétrie des kets s'écrit :

$$Q_A\ (n_\alpha \to n_\alpha{+}1,\ n_\beta \to n_\beta{-}1)$$

$$= \frac{1}{n_\alpha+1}\left[\,1 - \sum_{j=1}^{n_\alpha} P_{j,\ n_\alpha+1}\,\right] \tag{13}$$

Un raisonnement similaire donnerait :

$$A\,(1,\ \ldots,\ n_\alpha{-}1)\ A\,(n_\alpha,\ \ldots\ n)\ A\,(1,\ \ldots\ n_\alpha)\ A\,(n_\alpha{+}1\ \ldots\ n)$$

$$= A\,(n_\alpha,\ \ldots,\ n)\ A\,(1,\ \ldots\ n_\alpha) \tag{14}$$

(où la particule n_α apparaît deux fois) et comme :

$$A\,(n_\alpha,\ \ldots\ n) = \frac{1}{n_\beta+1}\left[\,1 - \sum_{j=n_\alpha+1}^{n} P_{n_\alpha+1,j}\,\right] A\,(n_\alpha{+}1,\ \ldots\ n) \tag{15}$$

on arriverait à :

$$Q_A\ (n_\alpha \to n_\alpha{-}1,\ n_\beta \to n_\beta{+}1) = \frac{1}{n_\beta+1}\left[\,1 - \sum_{j=n_\alpha+1}^{n} P_{n_\alpha+1,j}\,\right] \tag{16}$$

c) Vecteur d'état obtenu

Construisons explicitement le vecteur d'état obtenu par action de deux opérateurs d'antisymétrisation supplémentaires sur le ket écrit en (4). Cette fois, il est commode d'utiliser l'analogue de la première égalité (11) qui s'écrit :

$$A\,(n_\alpha{+}1,\ \ldots,\ n) = \frac{1}{n_\beta}\ A\,(n_\alpha{+}1,\ \ldots\ n)\left[\,1 - \sum_{j=n_\alpha+2}^{n} P_{n_\alpha+1,j}\,\right]$$

(17)

et nous obtenons :

$$A\,(A,\ \ldots\ n_\alpha{+}1)\ A\,(n_\alpha{+}2\ \ldots\ n)\ A\,(1\ \ldots\ n_\alpha)\ A\,(n_\alpha{+}1,\ \ldots\ n)$$

$$= \frac{1}{n_\beta}\ A\,(1,\ \ldots\ n_\alpha{+}1)\ A\,(n_\alpha{+}2,\ \ldots\ n)\left[\,1 - \sum_{j=n_\alpha+2}^{n} P_{n_\alpha+1,j}\,\right] \qquad (18)$$

Compte tenu des facteurs de normalisation $\sqrt{n_\alpha!\ n_\beta!}$ dans le ket (4), ce dernier devient donc, après changement d'une particule β en α :

$$P_{\beta\to\alpha}\ A\,(1,\ \ldots\ n_\alpha{+}1)\ A\,(n_\alpha{+}2\ \ldots\ n)\ |\alpha : k_1\ \ldots\ k_{n_\alpha}\ ;\ \beta : k_{n_\alpha+1}\ \ldots\ k_n>$$

$$= P_{\beta\to\alpha}\ Q_A\,(n_\alpha \to n_\alpha{+}1,\ n_\beta \to n_\beta{-}1)\ |\alpha : k_1\ \ldots\ k_{n_\alpha}\ ;\ \beta : k_{n_\alpha+1}\ \ldots\ k_n>$$

$$= \frac{1}{n_\beta}\sqrt{\frac{n_\beta}{n_\alpha+1}}\ \Bigg\{ \overbrace{|\alpha : k_1\ \ldots\ k_{n_\alpha},\ k_{n_\alpha+1}}^{n_\alpha+1}\ ;\ \overbrace{\beta : k_{n_\alpha+2},\ \ldots\ k_n}^{n_\beta-1}>$$

$$- \sum_{j=n_\alpha+2}^{n} |\alpha : k_1,\ \ldots,\ k_{n_\alpha},\ \cancel{k_{n_\alpha+1}}^{\,k_{n_j}}\ ;\ \beta : k_{n_\alpha+2},\ \ldots\ \cancel{k_{n_j}}^{\,k_{n_\alpha+1}}\ldots k_n> \Bigg\} \qquad (19)$$

Le ket obtenu est donc la superposition de n_β kets où $n_\alpha{+}1$ particules sont dans des états individuels $|\phi_k>$ ainsi que $n_\beta{-}1$ particules β ; chacun de ces kets est non-nul si l'état individuel supplémentaire occupé par les particules α n'était pas déjà occupé par l'une d'entre elles (c'est-à-dire si $k_{n_j} \neq k_1, k_2, \ldots, k_{n_\alpha}$).

Un raisonnement analogue donnerait l'effet de l'opérateur $P_{\alpha\to\beta}\ Q_A\,(n_\alpha \to n_\alpha{-}1,\ n_\beta \to n_\beta{+}1)$.

2. Bosons

Si les particules sont des bosons et non des fermions, quelques modifications doivent être faites dans les raisonnements précédents. Il faut partout remplacer les antisymétriseurs A par des symétriseurs S, ce qui revient à remplacer ε_λ par 1 dans les équations (2), (3) et suivantes ;

ceci entraîne la disparition du signe moins qui affecte ces sommations sur j dans (11), (13) et (15).

Pour les états de base (4), les limitations (5) sur les indices individuels deviennent trop restrictives, et il y faut y substituer des signes $\leqslant$ aux signes $<$. Le même nombre quantique k, associé à l'état individuel $|\phi_k>$ peut donc apparaître $n_\alpha(k)$ fois pour les particules α, $n_\beta(k)$ fois pour les particules β ; ces nombres sont appelés "nombres d'occupation" de l'état individuel $|\phi_k>$. Pour que les kets de base (4) restent normalisés, il faut y remplacer le coefficient $\sqrt{n_\alpha!\ n_\beta!}$ par :

$$\frac{\sqrt{n_\alpha!\ n_\beta!}}{\sqrt{n_\alpha(k_\alpha)!\ n_\alpha(k'_\alpha)!\ldots \times n_\beta(k_\beta)!\ n_\beta(k'_\beta)!\ldots}}$$

(k_α, k'_α,... repèrent les états individuels occupés par les particules α, k_β , k'_β,... ceux occupés par les particules β .

L'équation (19) doit alors être remplacée par :

$$P_{\beta\to\alpha}\ S\ (1, \ldots n_\alpha{+}1)\ S\ (n_\alpha{+}2 \ldots n)\ |\alpha : k_1 \ldots k_{n_\alpha}\ ;\ \beta : k_{n_\alpha+1} \ldots k_n>$$

$$= P_{\beta\to\alpha}\ Q_S\ (n_\alpha \to n_\alpha{+}1,\ n_\beta \to n_\beta{-}1)\ |\alpha : k_1 \ldots k_{n_\alpha}\ ;\ \beta : k_{n_\alpha+1} \ldots k_n>$$

$$= \frac{1}{n_\beta}\sqrt{\frac{n_\beta}{n_\alpha{+}1}}\left\{\sqrt{\frac{n_\alpha(k_{n_\alpha+1})+1}{n_\beta(k)}}\ |\overbrace{\alpha:k_1,\ldots k_{n_\alpha}, k_{n_\alpha+1}}^{n_\alpha+1}\ ;\ \overbrace{\beta:k_{n_\alpha+2}, \ldots k_n}^{n_\beta-1}>\right.$$

$$\left. + \sum_{j=n_\alpha+2}^{n}\sqrt{\frac{n_\alpha(k_j)+1}{n_\beta(k_j)}}\ |\overbrace{\alpha:k_1\ldots, k_{n_\alpha}, k_{n_j}}\ ;\ \beta:k_{n_\alpha+2},\ldots \not{k_{n_j}} \ldots k_n>\right\} \qquad (20)$$

$k_{n_\alpha+1}$

[où la somme sur j fait apparaître $n_\beta(k_j)$ fois le même ket au second membre ; le second membre de (20) n'est jamais nul, mais ceci n'exclut pas que $P_{\beta\to\alpha}\ Q_S\ (n_\alpha \to n_\alpha{+}1,\ n_\beta \to n_\beta{-}1)$ donne zéro par action sur une combinaison linéaire de kets où les particules occupent des états individuels].

3. Opérateurs de création et d'annihilation

Posons, comme au chapitre IX :

$$M_{\alpha\beta} = (\varepsilon)^{N_\alpha} \sum_k a_k^+ b_k$$

$$M_{\beta\alpha} = (\varepsilon)^{N_\alpha+1} \sum_k b_k^+ a_k \qquad (21)$$

et calculons l'action de $M_{\alpha\beta}$ sur le ket écrit en (4). Nous obtenons :

$$M_{\alpha\beta} \,|\alpha : \overbrace{k_1, k_2, \ldots k_{n_\alpha}}^{n_\alpha} ; \beta : \overbrace{k_{n_\alpha+1}, k_{n_\alpha+2}, \ldots k_n}^{n_\beta}\rangle$$

$$= (\varepsilon)^{n_\alpha+1} \sqrt{[\, n_\alpha(k_{n_\alpha+1}) + 1 \,]\, n_\beta(k_{n_\alpha+1})}$$

$$x\,|\alpha : \overbrace{k_{n_\alpha+1}, k_1, k_2, \ldots, k_{n_\alpha}}^{n_\alpha+1} ; \beta : \overbrace{k_{n_\alpha+2}, \ldots k_n}^{n_\beta-1}\rangle$$

$$+ \varepsilon \times (\varepsilon)^{n_\alpha+1} \sum_{k=k_{n_\alpha+2}}^{k_n}{}' \sqrt{[\, n_\alpha(k) + 1 \,]\, n_\beta(k)}$$

$$x\,|\alpha : \overbrace{k, k_1, k_2, \ldots k_{n_\alpha}}^{n_\alpha+1} ; \beta : \overbrace{k_{n_\alpha+2}, \ldots, k_{n_\alpha+1}, \ldots, k_n}^{n_\beta-1}\rangle$$

(22)

où $n_\alpha(k)$ et $n_\beta(k)$ sont les nombres d'occupation de l'état individuel $|\phi_k\rangle$ pour les particules α et β, dans le ket initial sur lequel agit $M_{\alpha\beta}$ [on a $\sum_k n_\alpha(k) = n_\alpha$, $\sum_k n_\beta(k) = n_\beta$].

Pour des fermions $n_\alpha(k) = 0$ et $n_\beta(k) = 1$, de sorte que les radicaux disparaissent simplement du second membre de (22) ; la présence du ε supplémentaire qui précède la somme sur k provient du fait que, pour des fermions :

$$b_{k_{n_\alpha+1}} |\beta : k_{n_\alpha+1}, k_{n_\alpha+2}, \ldots k_n >$$

$$= |\beta : k_{n_\alpha+2}, \ldots, k_n > \qquad (23\text{-a})$$

mais :

$$b_k |\beta: k_{n_\alpha+1}, k_{n_\alpha+2}, \ldots, k, \ldots, k_n >$$

$$= - b_k |\beta: k, k_{n_\alpha+2}, \ldots, k_{n_\alpha+1}, \ldots, k_n >$$

$$= - |\beta: k_{n_\alpha+2}, \ldots, k_{n_\alpha+1}, \ldots, k_n > \qquad (23\text{-b})$$

(pour des bosons, aucun signe moins ne s'introduit). Le $(\varepsilon)^{n_\alpha}$ disparaît si l'on fait passer au dernier rang (des états occupés par les particules α) l'état $k_{n_\alpha+1}$ dans le premier terme et l'état k dans le second. Dans ces conditions, le second membre de (22) s'identifie à celui de (19), multiplié par $\sqrt{(n_\alpha+1)\ n_\beta}$.

Pour des bosons, il faut remarquer dans (22) que la somme $\sum_k'$ ne comprend qu'une seule fois chaque état initialement occupé par les particules β , alors que la somme $\sum_j$ dans (20) comprend $n_\beta(k)$ fois le même terme. La même identification est alors possible.

Donc :

$$M_{\beta\alpha} = \sqrt{(n_\alpha+1)\ n_\beta}\ \ P_{\beta\to\alpha}\ Q_{S,A}(n_\alpha \to n_\alpha+1,\ n_\beta \to n_\beta-1) \qquad (24)$$

Pour l'opérateur $M_{\beta\alpha}$, le raisonnement est semblable. Nous ne l'explicitons que pour des fermions. On utilise la première relation (11) [en changeant n_α en $n_\alpha-1$] ainsi que (14) pour écrire :

$$A\ (1, \ldots n_\alpha-1)\ A\ (n_\alpha \ldots n)\ A\ (1 \ldots n_\alpha)\ A\ (n_\alpha+1, \ldots n)$$

$$= \frac{1}{n_\alpha}\ A\ (1 \ldots n_\alpha-1)\ A\ (n_\alpha \ldots n) \left[1 - \sum_{j=1}^{n_\alpha-1} P_{j,\, n_\alpha} \right] \qquad (25)$$

de sorte que le changement de symétrie du ket (4) donne maintenant :

$$\frac{1}{n_\alpha}\sqrt{\frac{n_\alpha}{n_\beta+1}}\left\{ |\alpha : k_1 \ldots k_{n_\alpha-1} ; \beta : k_{n_\alpha} \ldots k_n \rangle \right.$$

$$\left. - \sum_{j=1}^{n_\alpha-1} |\alpha : k_1 \ldots \cancel{k_j}^{k_{n_\alpha}} \ldots k_{n_\alpha-1} ; \beta : \cancel{k_{n_\alpha}}^{k_j} \ldots k \ldots k_n \rangle \right\}$$

D'autre part, la définition (21) de $M_{\beta\alpha}$ implique que :

$$M_{\beta\alpha} |\alpha : k_1 \ldots k_{n_\alpha} ; \beta : k_{n_\alpha+1} \ldots k_n \rangle$$

$$= (\varepsilon)^{n_\alpha} \left\{ (\varepsilon)^{n_\alpha-1} |\alpha : k_1 \ldots k_{n_\alpha-1} ; \beta : k_{n_\alpha} \ldots k_n \rangle \right.$$

$$\left. -(\varepsilon)(\varepsilon)^{n_\alpha-1} |\alpha : k_1 \ldots \cancel{k_j}^{k_{n_\alpha}} \ldots k_{n_\alpha-1} ; \beta : \cancel{k_{n_\alpha}}^{k_j} \ldots k \ldots k_n \rangle \right\} \qquad (26)$$

Par suite :

$$M_{\beta\alpha} = \varepsilon \sqrt{(n_\beta+1)\, n_\alpha}\; P_{\alpha\to\beta}\, Q_A(n_\alpha \to n_\alpha-1,\ n_\beta \to n_\beta+1) \qquad (27)$$

[le $(\varepsilon)^{N_\alpha+1}$ de la définition de $M_{\beta\alpha}$ évite un facteur de proportionnalité dépendant de n_α].

COMPLEMENT IX-B

ISOSPIN D'UN SYSTEME DE DEUX NUCLEONS

Pour rendre plus concrète la théorie générale du § B du chapitre IX, nous l'appliquons dans ce complément à un cas simple, celui où le nombre de nucléons (neutrons ou protons) est n = 2.

Rappelons les formules suivantes du chapitre IX :

$$K_+ = M_{\alpha\beta} = (-1)^{n_\alpha} \sum_k a_k^+ b_k \leftrightarrow \hbar J_+ \qquad (1\text{-a})$$

$$K_- = M_{\beta\alpha} = (-1)^{n_\alpha+1} \sum_k b_k^+ a_k \leftrightarrow \hbar J_- \qquad (1\text{-b})$$

$$K_z = \frac{1}{2} (N_\alpha - N_\beta) \leftrightarrow \hbar J_z \qquad (1\text{-c})$$

Un léger changement de notation nous permettra de rendre plus évidente la nature des particules considérées : nous remplacerons α par p (proton), β par n (neutron). Dans ce qui suit, nous prendrons successivement les deux points de vue différents (*) : p et n repèrent, soit des particules discernables de natures différentes, soit deux valeurs d'un nombre quantique interne d'isospin associées respectivement à des états internes des particules notés $|p\rangle$ et $|n\rangle$. Commençons par examiner le cas où les particules occupent des états individuels ; lorsque les deux nucléons sont supposés sans interaction mutuelle et placés dans un potentiel extérieur, on sait que les états stationnaires du système peuvent être cherchés avec cette condition. Un tel modèle peut être utilisé dans le cadre de l'approximation du "potentiel self consistant" (modèle en couches des noyaux). Dans un deuxième temps, nous examinerons le cas où le vecteur d'état décrivant les nucléons est quelconque (particules corrélées), ce qui permet d'étudier les états stationnaires du système en tenant compte des interactions entre particules.

1. Particules dans des états individuels

a) Premier point de vue : Commençons par considérer proton et neutron comme des particules discernables. L'état à deux protons :

$$|2p : \psi_k , \psi_{k'} \rangle$$

est clairement un ket propre de K_z de valeur propre + 1 ; on vérifie aisément que l'action de K_+ sur un tel ket donne zéro. Il en découle (**) que cet état est un état $|\sigma , K, M_K\rangle$ où $K = M_K = 1$,et nous noterons :

$$|K = 1 , M_K = 1 \rangle_{kk'} = |2p : \psi_k , \psi_{k'} \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \{|p_1 : \psi_k ; p_2 : \psi_{k'}\rangle - |p_1 : \psi_{k'} ; p_2 : \psi_k\rangle\} \qquad (2\text{-a})$$

Par action de K_- , on construit l'état $M_K = 0$ du triplet d'isospin correspondant ; or ;

$$a_k(p) \; |2p : \psi_k ; \psi_{k'}\rangle = |p : \psi_{k'}\rangle$$

(*) Ce sont les deux points de vue des §§ A-3 et B-2 du chapitre IX.

(**) On peut également utiliser (IX-62) pour vérifier que $|2p : \psi_k , \psi_{k'}\rangle$ est ket propre de $\overline{K^2}$.

$$a_{k'}(p)\ |2p:\psi_k\ ,\psi_{k'}> = \ -\ |p:\psi_k>$$

(dans le second cas, un changement de signe est nécessaire pour amener en tête l'état individuel $|\psi_{k'}>$. On obtient alors [le facteur $\sqrt{2}$ provient du radical dans (IX-64)] :

$$|K=1,\ M_K=0>_{kk'} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|p:\psi_{k'}\ ;\ n:\psi_k> - |p:\psi_k\ ;\ n:\psi_{k'}>\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\{|p_1:\psi_{k'}\ ;\ n_2:\psi_k> - |p_1:\psi_k\ ;\ n_2:\psi_{k'}>\} \qquad (2\text{-b})$$

Neutron et proton étant des particules discernables, aucune symétrisation n'est nécessaire lorsque l'on numérote les particules.

Une nouvelle action de K_- donne enfin :

$$|K=1,\ M_K=-1>_{kk'} = -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2\{|2n:\psi_{k'},\ \psi_k> - |2n:\psi_k,\ \psi_{k'}>\}$$

$$= |2n:\psi_k\ ,\ \psi_{k'}>$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\{|n_1:\psi_k\ ;\ n_2:\psi_{k'}> - |n_1:\psi_{k'};\ n_2:\psi_k>\} \qquad (2\text{-c})$$

Nous avons ainsi construit un triplet d'isospin.

Il n'est pas plus compliqué d'obtenir un singulet $K = M_K = 0$. Puisque $M_K = 0$, il faut prendre une combinaison linéaire des états $|p:\psi_{k'}\ ;\ n:\psi_k>$ et $|p:\psi_k\ ;\ n:\psi_{k'}>$, qui sont déjà présents dans (2-b) ; il faut, de plus, que l'action de K_+ (ou de K_-) donne zéro, ce qui conduit immédiatement (à une phase arbitraire près) au ket :

$$|K=0,\ M_K=0>_{kk'} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|p:\psi_{k'}\ ;\ n:\psi_k> + |p:\psi_k\ ;\ n:\psi_{k'}>\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\{|p_1:\psi_{k'}\ ;\ n_2:\psi_k> + |p_1:\psi_k\ ;\ n_2:\psi_{k'}>\} \qquad (2\text{-d})$$

Remarques

(i) Si les deux états $|\psi_k>$ et $|\psi_{k'}>$ sont identiques (k=k'), on constate

que les kets $|K=1, M_K\rangle$ s'annulent, et que seul le singulet d'isospin subsiste. Ce résultat n'est pas surprenant : il n'est pas possible de mettre deux nucléons identiques dans le même état individuel, et il faut donc nécessairement prendre un proton et un neutron (*).

(ii) Il faut garder à l'esprit que les états $|\psi_k\rangle$ et $|\psi_{k'}\rangle$ comprennent une partie orbitale et une partie de spin des particules (neutron et proton ont un spin 1/2). On peut donc remplacer k par deux indices r et $\mu = \pm 1/2$, le premier repérant l'état orbital, le second celui de spin :

$$k \leftrightarrow \begin{cases} r = 1, 2, 3.... & \text{(orbital)} \\ \mu = \pm 1/2 & \text{(spin)} \end{cases} \qquad (3)$$

Examinons le cas où r=r', c'est-à-dire où $|\psi_k\rangle$ et $|\psi_{k'}\rangle$ ont des parties orbitales identiques. Si, par exemple, $\mu = +1/2$ et $\mu' = -1/2$, on remarque sur les équations (IX-72) que les trois états K=1 sont des singulets S=0 de spin (ordinaire). Dans le cas de valeurs extrêmes de $M_k = \pm 1$, cela était prévisible : le principe d'antisymétrisation de Pauli impose à deux fermions identiques de spin 1/2 d'être dans un état de singulet de spin (ordinaire) lorsque leur état orbital individuel est le même. Pour les états $K = M_K = 0$, on voit sur (2-d) que c'est un état triplet de spin ordinaire :

$$|S = 1, M_S = 0\rangle$$

Faisons maintenant $\mu = \mu' = \pm 1/2$. Nous avons déjà vu que les kets K = 1 s'annulent dans ce cas ; on vérifie sur (2-d) que l'état $|K=0, M=0\rangle$ admet $S=1, M_S=\pm 1$ comme nombres quantiques, ce qui permet de compléter le triplet de spin ordinaire.

Il faut donc bien distinguer isospin et spin ordinaire ; la discussion précédente montre que les nombres quantiques associés peuvent être différents, et comment s'imbriquent les actions des opérateurs correspondants (l'action de $S_\pm$ sur un singulet d'isospin peut, par exemple, don-

---

(*) Sur la figure 2 du chapitre IX, on aurait trois sous-espaces $M_K=1, 0, -1$. Tous les états k = k' étant des singulets d'isospins, l'action de $K_+=M_{\alpha\beta}$ et de $K_-=M_{\beta\alpha}$ sur de tels kets donne zéro ; les seuls kets non-nuls sont dans l'espace du milieu $M_K=0$ (charge $Q=q_p$). Par contre, il existe des kets k≠k' dans les trois espaces ($Q=2q_p$, q_p et 0).

ner un autre singulet d'isospin, orthogonal au premier). La situation, pour deux nucléons dans le même état orbital $|U_r>$ est résumée sur le tableau I :

$$
\begin{array}{lll}
K=1 & \left\{\begin{array}{l} |2p:U_r, + ; U_r, - > \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{|p:U_r, - ; n:U_r, + > - |p:U_r, + ; n:U_r, ->\} \\ |2n:U_r, + ; U_r, - > \end{array}\right. & \begin{array}{l} S=0 \\ S=0 \\ S=0 \end{array} \\
K=0 & |p:U_r, + ; n:U_r, + > & \\
K=0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\{|p:U_r, - ; n:U_r, +> + |p:U_r, + ; n:U_r, -> & S=1 \\
K=0 & |p:U_r, - ; n:U_r, -> &
\end{array}
$$

Tableau I

b) Deuxième point de vue : Considérons maintenant neutron et proton comme deux états internes différents (de charges différentes) d'une même particule, le nucléon ; tous les nucléons sont identiques. Les kets écrits en (2) correspondent, dans ce point de vue, aux kets :

$$
\begin{aligned}
|K=1, M_K=1>_{kk'} &= |\psi_k, p ; \psi_{k'}, p > \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|1:\psi_k,p ; 2:\psi_{k'},p> - |1:\psi_{k'},p ; 2:\psi_k,p >\right\}
\end{aligned}
\tag{4-a}
$$

$$
\begin{aligned}
|K=1, M_K=0>_{kk'} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\psi_k,n ; \psi_{k'},p> + |\psi_k,p ; \psi_{k'},n>\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{|1:\psi_k,n ; 2:\psi_{k'},p> - |1:\psi_{k'},p ; 2:\psi_k,n> \right. \\
&\quad \left. + |1:\psi_k,p ; 2:\psi_{k'},n> - |1:\psi_{k'},n ; 2:\psi_k,p>\right\}
\end{aligned}
\tag{4-b}
$$

$$
\begin{aligned}
|K=1, M_K=-1>_{kk'} &= \frac{1}{2}\left\{|\psi_k,n ; \psi_{k'},n> + |\psi_k,n ; \psi_{k'},n >\right\} \\
&= |\psi_k,n ; \psi_{k'},n> \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|1:\psi_k,n ; 2:\psi_{k'},n> - |1:\psi_{k'},n ; 2:\psi_{k'},n>\right\}
\end{aligned}
\tag{4-c}
$$

Ces formules peuvent être obtenues de deux façons : soit par action de l'opérateur J_- hermitique conjugué de celui écrit en (IX-61) , c'est-à-dire en utilisant l'analogie entre l'isospin et un spin 1/2 dans l'esprit de la discussion du § B-2 (cette façon de faire est probablement la plus rapide) ; soit en utilisant la correspondance des équations (1),

mais il faut alors prendre garde au changement de signe $(-1)^{n_\alpha}$ qui s'introduit lorsque K_+ fait passer de $M_K = 0$ à $M_K = +1$. Quoi qu'il en soit, la différence entre les formules (2) et (4) est claire : dans les premières, la particule (1) est toujours un proton, (2) est un neutron, alors que dans les secondes (1) et (2) peuvent être, soit l'un, soit l'autre (lorsque $M_K = 0$).

Complétons les formules (4) par le singulet d'isospin :

$$|K=0,\ M_K=0\rangle_{kk'} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\psi_k,\ p\ ;\ \psi_{k'},\ n\rangle - |\psi_k,\ n\ ;\ \psi_{k'},\ p\rangle\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{|1{:}\psi_k,\ p\ ;\ 2{:}\psi_k,\ n\rangle - |1{:}\psi_{k'},\ n\ ;\ 2{:}\psi_{k'},\ p\rangle\right.$$

$$\left. - |1{:}\psi_k,\ n\ ;\ 2{:}\psi_{k'},\ p\rangle + |1{:}\psi_{k'},\ p\ ;\ 2{:}\psi_k,\ n\rangle\right\} \qquad (4\text{-d})$$

On peut reprendre point par point les remarques faites plus haut, dans le premier point de vue : par exemple, si k=k', les formules ne donnent aucun ket K=1 qui soit non-nul. En fait, les seules différences par rapport au premier point de vue apparaissent pour les états $|K=1,\ M_K=0\rangle$ et $|K=0,\ M_K=0\rangle$ qui s'écrivent mathématiquement de façon distincte. Les conséquences physiques n'en sont cependant pas affectées ; par exemple, si $|\psi_k\rangle$ et $|\psi_{k'}\rangle$ sont associés à des états orbitaux identiques et des états de spin opposés, on vérifie cependant encore que les états $|K=1,\ M_K=0\rangle$ sont des états singulets de spin ordinaire, les états $|K=0,\ M_K=0\rangle$ des états triplets.

2. Particules corrélées

Les raisonnements précédents peuvent être repris pour deux nucléons dans un état corrélé :

$$|\Phi(1,2)\rangle = \sum_{kk'} c_{kk'}\ |\psi_k(1)\rangle \otimes |\psi_{k'}(2)\rangle \qquad (5)$$

Les formules (2) sont alors remplacées par :

$$|K=1,\ M_K=1\rangle_\Phi = |2p : \Phi\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\Phi(p_1,\ p_2)\rangle - |\Phi(p_2,\ p_1)\rangle\} \qquad (6\text{-a})$$

$$|K=1, M_K=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\Phi(p_1,n_2)\rangle - |\Phi(n_2,\ p_1)\rangle\} \qquad (6\text{-b})$$

$$|K=1,\ M_K=-1\rangle_\Phi = |2n:\Phi\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\Phi(n_1,\ n_2)\rangle - |\Phi(n_2,\ n_1)\rangle\} \qquad (6\text{-c})$$

et :

$$|K=0,\ M_K=0\rangle_\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\Phi(p_1,\ n_2)\rangle + |\Phi(p_2,n_1)\rangle\} \qquad (6\text{-d})$$

Si le vecteur d'état (IX-75) est pair par échange des particules (1) et (2) [$c_{kk'} = c_{k'k}$] , les états K=1 s'annulent (ce qui généralise ce qui a été dit plus haut lorsque k=k') : deux neutrons ou deux protons ne peuvent pas être dans un état de parité +1 par échange des particules. Si, par contre :

$$|\Phi(1,2)\rangle = -|\Phi(2,1)\rangle$$

[$c_{kk'} = -c_{k'k}$], c'est l'état singulet d'isospin qui disparaît . L'interprétation de ce résultat est claire : si un ket $|\Phi\rangle$ est antisymétrique par échange des particules, il est acceptable, soit pour deux neutrons, soit pour deux protons, soit encore pour un système neutron-proton. Si $|\Phi\rangle$ est état propre de l'hamiltonien H (qui commute avec $\vec{K}$), les trois kets sont états propres de H avec la même énergie.

Supposons maintenant que H commute avec $\vec{S}$ (opérateur de spin total des deux particules). Pour un système de deux particules, les états propres de H peuvent être cherchés sous la forme (★) :

$$|\Phi(1,2)\rangle = |\Phi_{orbital}(1,2)\rangle \otimes |S,M_S\rangle$$

si π (orbitale) = ± 1 est la parité du ket orbital, la parité du ket total est :

$$(-1)^S \times \pi\,(\text{orbitale}).$$

L'état fondamental d'un système lié de deux particules est en général un état de parité orbitale $\pi = +1$ (pas de noeud dans la fonction d'onde). Pour cet état fondamental, la valeur S=1 est donc associée à des singulets d'isospin K=0, la valeur S=0 a des triplets K=1.

(★) Pour un système de trois particules (ou plus) de spin 1/2, $\vec{S}^2$ et S_z ne forment plus un E.C.O.C. dans l'espace des états de spin, et ceci n'est plus possible en général.

Remarque

Le schéma du tableau I est applicable au cas où $|\Phi_{orbital}(1,2)>$ est quelconque mais pair par échange des particules.

Considérons donc un système de nucléons dans un tel état orbital et étudions les dégénérescences possibles suivant la symétrie de l'hamiltonien dans l'espace de spin.

Si aucune autre symétrie que celle d'isospin n'existe, on est en présence de quatre niveaux, dont un (K=1) est triplement dégénéré.

Si l'on suppose que H commute avec $\vec{S}$ (invariance par rotation de spin), le groupe de symétrie de l'hamiltonien devient SU(2) ⊗ SU(2) ; les trois niveaux K=0 se fondent alors en un seul et l'on obtient au total deux niveaux de dégénérescence 3.

Si maintenant l'on suppose que H n'agit pas dans l'espace de spins, on introduit une hypothèse plus forte (*). Le groupe de symétrie est associé à l'équivalence de quatre états internes des particules : $|p, +>$ $|p, ->$, $|n, +>$ et $|n, ->$; c'est donc le groupe SU(4) (**), dont le produit tensoriel SU(2) ⊗ SU(2) est un sous-groupe. Comme l'énergie ne dépend alors plus que de la fonction d'onde orbitale, les six états se confondent alors en un seul niveau dégénéré.

Exemple : L'expérience prouve que le seul état lié de deux nucléons est le deuteron (ensemble proton-neutron constitué par le noyau de deuteron dans son état fondamental) ; il n'y a pas d'état lié proton-neutron au neutron-neutron. Si l'on ignore les interactions électromagnétiques, il découle des considérations précédentes que :

. le deuteron est un singulet d'isospin ;

. si l'on admet que π (orbitale) = ± 1, ce qui est normal pour un état lié fondamental, alors S=1 (le moment orbital des particules étant nul, ce spin est à l'origine du moment nucléaire I=1 du deuteron).

(*) Par exemple, l'opérateur $\vec{S}^2$ (carré du spin total) commute avec $\vec{S}$, mais agit dans l'espace des spins.

(**) La symétrie SU(4) a été introduite dès 1937 par Wigner pour classer les niveaux d'énergie des noyaux.

A chacune des trois valeurs possibles de M_S, +1, 0 et -1, est associé un singulet d'isospin K = 0.

. Les interactions proton-neutron dépendent nécessairement du spin (ordinaire), la dégénérescence totale du niveau fondamental étant 3 (et non 6).

3. Systèmes plus complexes

Le noyau de ^4He est le seul système stable de quatre nucléons ; c'est donc, comme le deutéron, un singulet d'isospin. De nombreux autres exemples en physique nucléaire peuvent être donnés.

L'utilité de la notion d'isospin ne se limite pas à classer les spectres des noyaux. Elle s'applique également à d'autres particules. Les trois mésons π par exemple (π^+ , π^o et π') peuvent être classés dans un triplet K = 1 d'isospin.

Exercice :

Déduire des considérations précédentes que la réaction suivante viole la conservation de l'isospin :

$$d + d \rightarrow {}^4He + \pi^o$$

(d : deutéron). En conséquence, elle ne peut se produire sous l'effet des interactions fortes, mais seulement électromagnétiques (d'où une section efficace faible).