

Chapitre 7

Rotations à trois dimensions. Le groupe $\text{SO}(3)$

7.1 Rotations de \mathbb{R}^3 , le groupe $\text{SO}(3)$, ses générateurs infinitésimaux

7.1.1 Le groupe $\text{SO}(3)$, groupe à trois paramètres

Dans l'espace euclidien à trois dimensions, toute rotation est définie par l'angle ψ de rotation autour d'un axe de vecteur directeur unitaire \hat{n} , et les rotations associées à (\hat{n}, ψ) et à $(-\hat{n}, -\psi)$ sont identiques. On notera $R_{\hat{n}}(\psi)$ cette rotation. De façon très explicite, on écrit $\vec{x} = \vec{x}_{\parallel} + \vec{x}_{\perp} = (\vec{x} \cdot \vec{n})\vec{n} + (\vec{x} - (\vec{x} \cdot \vec{n})\vec{n})$ et $\vec{x}' = \vec{x}_{\parallel} + \cos \psi \vec{x}_{\perp} + \sin \psi \vec{n} \wedge \vec{x}_{\perp}$, d'où la formule d'O. Rodrigues

$$\vec{x}' = R_{\hat{n}}(\psi)\vec{x} = \cos \psi \vec{x} + (1 - \cos \psi)(\vec{x} \cdot \vec{n})\vec{n} + \sin \psi (\vec{n} \wedge \vec{x}) . \quad (7.1)$$

Le fait qu'une rotation de \mathbb{R}^n laisse un axe invariant est vrai en toute dimension n *impair*. Soit R une matrice de $\text{SO}(n)$, $R.R^T = I$, $\det R = 1$. Alors on peut écrire $\det(R - I) = \det R(I - R^T) = (1)^n \det R \det(R - I) = -\det(R - I)$ si n est impair, donc $\det(R - I) = 0$, R a un vecteur propre de valeur propre 1, cqfd.

Comme un vecteur unitaire \hat{n} dans \mathbb{R}^3 dépend de deux paramètres, par exemple l'angle θ qu'il fait avec l'axe Oz et l'angle ϕ que fait sa projection dans le plan Ox, Oy avec l'axe Ox (voir figure 1) un élément de $\text{SO}(3)$ est paramétrisé par 3 variables continues. On prendra ainsi

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi, \quad 0 \leq \psi \leq \pi . \quad (7.2)$$

$\text{SO}(3)$ est donc un groupe de dimension 3. Pour la rotation d'axe \hat{n} colinéaire à l'axe Oz , on a la matrice

$$\mathcal{R}_z(\psi) = \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.3)$$

tandis qu'autour des axes Ox et Oy

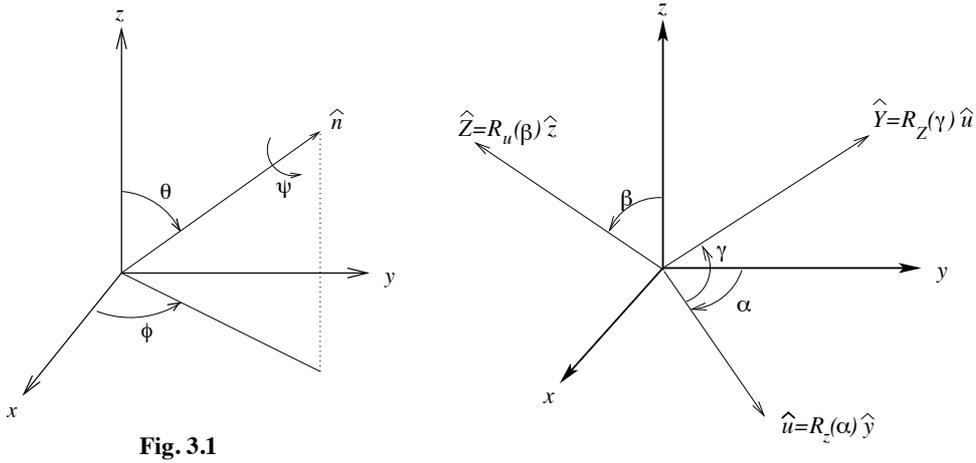


Fig. 3.1

FIGURE 7.1 – Deux paramétrisations des rotations : par le vecteur \hat{n} et l'angle ψ ; par les angles d'Euler

$$\mathcal{R}_x(\psi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \psi & -\sin \psi \\ 0 & \sin \psi & \cos \psi \end{pmatrix} \quad \mathcal{R}_y(\psi) = \begin{pmatrix} \cos \psi & 0 & \sin \psi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \psi & 0 & \cos \psi \end{pmatrix}. \quad (7.4)$$

Une relation que nous allons abondamment utiliser est que

$$RR_{\hat{n}}(\psi)R^{-1} = R_{\hat{n}'}(\psi) \quad (7.5)$$

où \hat{n}' est le transformé de \hat{n} par la rotation R , $\hat{n}' = R\hat{n}$. Exercice : la vérifier, soit en examinant l'action des deux membres sur le vecteur \hat{n}' , cf TD 5, soit en utilisant (7.1). Inversement toute rotation d'angle ψ autour d'un vecteur \hat{n}' peut se mettre sous la forme (7.5) : dans le langage introduit au chap. 5 (§ 5.1.2), on dira que les “classes de conjugaison” du groupe $SO(3)$ sont caractérisées par l'angle ψ .

Une autre description fait appel aux *angles d'Euler* : étant donné un repère orthonormé (Ox, Oy, Oz) , toute rotation peut être considérée comme résultant de la composition d'une rotation d'angle α autour de Oz qui amène Oy en Ou , suivie d'une rotation d'angle β autour de Ou amenant Oz en OZ , et enfin d'une rotation d'angle γ autour de OZ (voir figure 2). On prend donc $0 \leq \alpha \leq 2\pi$, $0 \leq \beta \leq \pi$, $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ et on écrit

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_Z(\gamma)R_u(\beta)R_z(\alpha) \quad (7.6)$$

mais selon (7.5)

$$R_Z(\gamma) = R_u(\beta)R_z(\gamma)R_u^{-1}(\beta) \quad \text{et} \quad R_u(\beta) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)$$

d'où en reportant dans (7.6)

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma). \quad (7.7)$$

où on a utilisé le fait que $R_z(\alpha)R_z(\gamma)R_z^{-1}(\alpha) = R_z(\gamma)$ car les rotations autour d'un même axe commutent (elles forment un sous-groupe abélien, isomorphe à $\text{SO}(2)$). Cette méthode permet de comparer les deux paramétrisations précédentes et d'en tirer les relations entre (θ, ϕ, ψ) et (α, β, γ) .

Exercice : En utilisant (7.5), écrire la matrice R qui amène le vecteur unitaire \hat{z} porté par Oz sur le vecteur unitaire \hat{n} , puis l'expression de $R_{\hat{n}}(\psi)$ en termes de R_y et R_z , et en déduire les relations entre θ, ϕ, ψ et les angles d'Euler.

7.1.2 Générateurs infinitésimaux de $\text{SO}(3)$

Comme on l'a vu au chapitre 4, dans un groupe de Lie comme $\text{SO}(3)$, une étude des éléments au voisinage de l'identité, ou des générateurs infinitésimaux, suffit à reconstruire tout le groupe. Étudions donc ce que sont les générateurs infinitésimaux de $\text{SO}(3)$.

Pour un angle $d\psi$ très petit (infinitésimal), $R_{\hat{n}}(d\psi)$ diffère de l'opérateur identité par un terme d'ordre $d\psi$, coefficient d'un opérateur appelé *générateur infinitésimal*. Dans ce chapitre, nous suivons l'usage en écrivant les générateurs infinitésimaux des rotations comme des opérateurs hermitiens $J = J^\dagger$. Ainsi on écrit au premier ordre en $d\psi$

$$R_{\hat{n}}(d\psi) = (I - id\psi J_{\hat{n}}) \quad (7.8)$$

où $J_{\hat{n}}$ est le générateur de ces rotations¹, une matrice hermitique 3×3 , de façon à garantir l'unitarité (ou simplement comme ici, l'orthogonalité) de $R_{\hat{n}} : R_{\hat{n}} \cdot R_{\hat{n}}^\dagger = I$.

Pour trouver l'expression explicite de ces générateurs infinitésimaux, il est utile de les considérer soit comme des matrices 3×3 agissant sur les composantes des vecteurs \vec{x} de \mathbb{R}^3 , soit comme des opérateurs différentiels agissant sur les fonctions de \vec{x} . Pour une rotation infinitésimale $R_{\hat{n}}(d\psi)$ agissant sur \vec{x} , le vecteur transformé \vec{x}' est tel que $\vec{x}' - \vec{x}$ est orthogonal à \vec{x} et à \hat{n} , donc s'écrit

$$\vec{x}' = \vec{x} + d\psi \hat{n} \wedge \vec{x}, \quad (7.9)$$

(une version infinitésimale de (7.1)). Une fonction scalaire de \vec{x} se transforme, cf chap. 2, selon $f'(\vec{x}') = f(\vec{x})$ soit pour une rotation infinitésimale

$$f'(\vec{x}) = f(R^{-1}\vec{x}) = f(\vec{x} - d\psi \hat{n} \wedge \vec{x}) = (1 - d\psi \hat{n} \cdot \vec{x} \wedge \vec{\nabla})f(\vec{x}) = (1 - id\psi \hat{n} \cdot \vec{J})f(\vec{x}) \quad (7.10)$$

avec $J_{\hat{n}} = -i\hat{n} \cdot \vec{x} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$ soit encore

$$\boxed{J_{\hat{n}} = \hat{n} \cdot \vec{J} \quad \text{avec} \quad \vec{J} = -i\vec{x} \wedge \frac{\partial}{\partial \vec{x}}} \quad (7.11)$$

Remarque. Dans le cours de mécanique quantique, on s'est intéressé à l'opérateur de moment cinétique orbital \vec{L} qui diffère du présent générateur \vec{J} par un facteur \hbar : $\vec{L} = \hbar\vec{J}$. Attention ! \vec{J} , opérateur de moment angulaire total du cours de mécanique quantique, ne doit pas être confondu avec le présent \vec{J} .

1. Ne pas confondre $J_{\hat{n}}$ indexé par le vecteur \hat{n} , avec J_k , k ième composante de \vec{J} . La relation entre les deux va être donnée ci-dessous.

Par ailleurs, introduisons les trois matrices de base J_1 , J_2 et J_3 qui décrivent les rotations infinitésimales autour des axes correspondants. De la version infinitésimale de (7.3) on tire

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.12)$$

ce qu'on peut exprimer par une formule unique

$$(J_k)_{ij} = -i\epsilon_{ijk} \quad (7.13)$$

à l'aide du tenseur complètement antisymétrique ϵ_{ijk} . Les trois matrices J_i , $i = 1, 2, 3$ satisfont les très importantes relations de commutation suivantes

$$\boxed{[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k} \quad (7.14)$$

qu'on vérifie bien entendu aussi sur la forme (7.11). Par exemple (7.11) nous donne $J_1 = J_x = -i(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})$, $J_2 = J_y = -i(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})$ d'où on tire $[J_1, J_2] = iJ_3$.

Les générateurs infinitésimaux étant déterminés, comment reconstruit-on les rotations finies? On va adapter au groupe SO(3) ce qu'on a vu au § 4.1.3. Les rotations $R_{\hat{n}}(\psi)$ autour d'un axe \hat{n} donné forment un sous-groupe (on parle de *sous-groupe à un paramètre*); ces matrices commutent, le sous-groupe est commutatif (ou *abélien*). Par la propriété de groupe,

$$R_{\hat{n}}(\psi + d\psi) = R_{\hat{n}}(d\psi)R_{\hat{n}}(\psi) = (I - id\psi J_{\hat{n}})R_{\hat{n}}(\psi) , \quad (7.15)$$

ou encore

$$\frac{\partial R_{\hat{n}}(\psi)}{\partial \psi} = -iJ_{\hat{n}}R_{\hat{n}}(\psi) \quad (7.16)$$

équation différentielle, qui, compte tenu de $R(0) = I$, s'intègre en

$$R_{\hat{n}}(\psi) = e^{-i\psi J_{\hat{n}}} . \quad (7.17)$$

Comme l'a montré (7.11), on peut toujours écrire

$$J_{\hat{n}} = \sum_k n_k J_k \quad \text{donc} \quad R_{\hat{n}}(\psi) = e^{-i\psi \sum_k n_k J_k} . \quad (7.18)$$

Attention! En raison de la non-commutation des générateurs infinitésimaux J_1 , J_2 et J_3 , cf (7.14), la propriété "bien connue" de la fonction exponentielle $e^a e^b = e^{a+b}$ ne s'applique pas : il ne faut pas écrire $e^{-i\psi \sum_k n_k J_k} \stackrel{?}{=} \prod_k e^{-i\psi n_k J_k}$.

Remarque. Noter que l'équation (7.5) implique que

$$R e^{-i\psi J_{\hat{n}}} R^{-1} = e^{-i\psi R J_{\hat{n}} R^{-1}} = e^{-i\psi J_{\hat{n}'}} \quad (7.19)$$

avec $\hat{n}' = R\hat{n}$, donc

$$R J_{\hat{n}} R^{-1} = J_{\hat{n}'}. \quad (7.20)$$

7.1.3 Algèbre de Lie $so(3)$

Récapitulons : nous venons d'introduire l'algèbre de commutation des générateurs infinitésimaux (ou algèbre de Lie) du groupe $SO(3)$, notée $so(3)$. Elle est définie par les relations (7.14). On utilise aussi beaucoup les trois combinaisons

$$J_z \equiv J_3, \quad J_+ = J_1 + iJ_2, \quad J_- = J_1 - iJ_2 . \quad (7.21)$$

Il est immédiat de calculer

$$[J_3, J_+] = J_+ \quad (7.22a)$$

$$[J_3, J_-] = -J_- \quad (7.22b)$$

$$[J_+, J_-] = 2J_3 . \quad (7.22c)$$

On vérifie aussi que l'opérateur

$$\vec{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = J_3^2 + J_3 + J_- J_+ = J_3^2 - J_3 + J_+ J_- \quad (7.23)$$

commute avec tous les J

$$[\vec{J}^2, J_i] = 0 . \quad (7.24)$$

\vec{J}^2 est l'opérateur de Casimir. Comme on l'a vu, nous sommes intéressés aux "représentations unitaires", où les générateurs J_i , $i = 1, 2, 3$ sont hermitiques, donc

$$J_i^\dagger = J_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad J_\pm^\dagger = J_\mp . \quad (7.25)$$

L'importance de l'opérateur de Casimir \vec{J}^2 est liée au lemme de Schur : \vec{J}^2 commutant avec tous les générateurs infinitésimaux, il commute avec leur exponentielle, donc avec les opérateurs de rotation, et ce, dans toute représentation. Dans une représentation irréductible, \vec{J}^2 est donc un multiple de l'identité.

7.2 Représentations de $so(3)$ et de $SO(3)$

On a vu dans les chapitres précédents que l'action du groupe $SO(3)$ sur les vecteurs et les tenseurs de l'espace \mathbb{R}^3 fournissait un exemple de représentation. Nous allons maintenant nous intéresser à la construction des représentations générales de $SO(3)$. Pour les besoins de la physique, en particulier de la mécanique quantique, on a surtout besoin de représentations unitaires, dans lesquelles les matrices de représentation sont unitaires. En fait, comme on le verra, il suffit d'étudier la façon dont sont représentés les éléments du groupe au voisinage de l'identité, c'est-à-dire étudier les représentations des générateurs infinitésimaux de $SO(3)$.

Il suffit donc pour trouver les représentations unitaires du groupe $SO(3)$ de trouver les représentations par des matrices hermitiques de son algèbre de Lie $so(3)$.

7.2.1 Représentations de l'algèbre $\text{so}(3)$

Définition

Il convient d'abord de définir ce qu'on entend par *représentation de l'algèbre de Lie $\text{so}(3)$* . Par définition, une représentation de l'algèbre de Lie $\text{so}(3)$ est un ensemble de matrices J_i que nous prendrons hermitiennes, de taille $N \times N$ a priori arbitraire, satisfaisant les relations de commutation (7.14) ou de façon équivalente, (7.22).

On peut démontrer et nous admettrons qu'il y a une relation (presque) biunivoque entre les représentations du groupe de Lie $\text{SO}(3)$ et celles de son algèbre de Lie $\text{so}(3)$: les générateurs infinitésimaux dans une représentation du groupe fournissent une représentation de $\text{so}(3)$, et inversement par exponentiation des générateurs infinitésimaux dans une représentation de $\text{so}(3)$, on reconstruit la représentation de $\text{SO}(3)$. Ce dernier point réserve toutefois une surprise...

Algèbres $\text{so}(3)$ et $\text{su}(2)$

Comme on sait bien, les trois matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.26)$$

satisfont la relation $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$, autrement dit les matrices $\frac{1}{2}\sigma_i$ satisfont (7.14) et forment donc une représentation de dimension 2 de l'algèbre $\text{so}(3)$. Mais ces matrices forment aussi une base des générateurs infinitésimaux (hermitiens et de trace nulle) du groupe $\text{SU}(2)$ des matrices unitaires de déterminant 1. On en conclut que les groupes $\text{SU}(2)$ et $\text{SO}(3)$ ont la même algèbre de Lie (les mathématiciens disent que les algèbres de Lie $\text{su}(2)$ et $\text{so}(3)$ sont isomorphes). Et l'on voit que les deux groupes vont être liés de façon très étroite : quand on exponentie une représentation de $\text{so}(3) \simeq \text{su}(2)$, construit-on une représentation du groupe $\text{SO}(3)$ ou de $\text{SU}(2)$? Nous reviendrons plus bas sur cette question.

Représentations de $\text{so}(3)$ de spin j

Procédons à la construction des représentations de l'algèbre $\text{so}(3) \simeq \text{su}(2)$. Comme précédemment, J_{\pm} et J_z désignent les représentants des générateurs infinitésimaux dans une certaine représentation. Ils satisfont aux relations de commutation (7.22) et d'hermiticité (7.25). La commutation des opérateurs J_z et \vec{J}^2 garantit qu'on peut en chercher des vecteurs propres communs. Comme on l'a indiqué à la fin du § 7.1.3, \vec{J}^2 est un multiple de l'opérateur identité, c'est-à-dire est diagonal avec une seule valeur propre dans toute représentation irréductible. Les valeurs propres des opérateurs hermitiques \vec{J}^2 et J_z étant réelles et \vec{J}^2 étant semi-défini positif, on peut toujours écrire leurs valeurs propres respectives sous la forme $j(j+1)$ et m , avec j réel positif ou nul, et on considère donc un vecteur propre commun $|j m\rangle$

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |j m\rangle &= j(j+1) |j m\rangle \\ J_z |j m\rangle &= m |j m\rangle . \end{aligned} \quad (7.27)$$

avec m un réel a priori arbitraire. Par abus de langage, on dira que $|jm\rangle$ est un “vecteur propre de valeurs propres (j, m) ”.

(i) Agissons avec J_+ et $J_- = J_+^\dagger$ sur $|jm\rangle$. Utilisant la relation $J_\pm J_\mp = \vec{J}^2 - J_z^2 \pm J_z$ (conséquence de (7.22)), on calcule la norme carrée de $J_\pm |jm\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle jm|J_-J_+|jm\rangle &= (j(j+1) - m(m+1)) \langle jm|jm\rangle \\ &= (j-m)(j+m+1) \langle jm|jm\rangle \\ \langle jm|J_+J_-|jm\rangle &= (j(j+1) - m(m-1)) \langle jm|jm\rangle \\ &= (j+m)(j-m+1) \langle jm|jm\rangle . \end{aligned} \quad (7.28)$$

Ces normes carrées ne peuvent être négatives donc

$$\begin{aligned} (j-m)(j+m+1) &\geq 0 & : & \quad -j-1 \leq m \leq j \\ (j+m)(j-m+1) &\geq 0 & : & \quad -j \leq m \leq j+1 \end{aligned} \quad (7.29)$$

qui impliquent

$$-j \leq m \leq j . \quad (7.30)$$

En outre $J_+|jm\rangle = 0$ si et seulement si $m = j$ et $J_-|jm\rangle = 0$ si et seulement si $m = -j$

$$J_+|jj\rangle = 0 \quad J_-|j-j\rangle = 0 . \quad (7.31)$$

(ii) Si $m \neq j$, $J_+|jm\rangle$ est un vecteur non nul, vecteur propre de valeurs propres $(j, m+1)$. En effet

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 J_+|jm\rangle &= J_+ \vec{J}^2 |jm\rangle = j(j+1) J_+|jm\rangle \\ J_z J_+|jm\rangle &= J_+(J_z+1)|jm\rangle = (m+1) J_+|jm\rangle . \end{aligned} \quad (7.32)$$

De même si $m \neq -j$, $J_-|jm\rangle$ est un vecteur propre (non nul) de valeurs propres $(j, m-1)$.

(iii) Considérons la suite des vecteurs

$$|jm\rangle, J_-|jm\rangle, J_-^2|jm\rangle, \dots, J_-^p|jm\rangle \dots$$

S'ils sont non nuls ils constituent des vecteurs propres de J_z de valeurs propres $m, m-1, m-2, \dots, m-p \dots$. Les valeurs propres autorisées de J_z étant bornées par (7.30), cette suite doit s'arrêter au bout d'un nombre fini d'étapes. Soit p l'entier tel que $J_-^p|jm\rangle \neq 0$, $J_-^{p+1}|jm\rangle = 0$. En vertu de (7.31), $J_-^p|jm\rangle$ est un vecteur propre de valeurs propres $(j, -j)$ donc $m-p = -j$ c'est-à-dire

$$(j+m) \text{ est entier.} \quad (7.33)$$

Opérant de même avec J_+, J_+^2, \dots sur $|jm\rangle$, on est mené à la conclusion que

$$(j-m) \text{ est entier} \quad (7.34)$$

et par conséquent j et m sont simultanément entiers ou demi-entiers. Pour chaque valeur de j

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

m peut prendre les $2j + 1$ valeurs²

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j. \quad (7.35)$$

Partant du vecteur $|j m = j\rangle$, (“vecteur de plus haut poids”), choisi de norme 1, on construit la base orthonormée $|j m\rangle$ par application répétée de J_- et on a

$$J_+ |j m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j m+1\rangle \quad (7.36a)$$

$$J_- |j m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j m-1\rangle \quad (7.36b)$$

$$J_z |j m\rangle = m |j m\rangle. \quad (7.36c)$$

Ces $2j + 1$ vecteurs forment la base de la “représentation de spin j ” de l’algèbre. Comme on l’a mentionné plus haut, cette représentation de l’algèbre $\text{so}(3)$ s’étend en une représentation du groupe $\text{SO}(3)$... à une petite subtilité près dans le cas de spin demi-entier, comme nous allons voir.

7.2.2 Représentation de spin j du groupe $\text{SO}(3)$

Les matrices de la représentation de spin j sont telles que sous l’action de la rotation $R \in \text{SO}(3)$

$$|j m\rangle \mapsto D^j(R) |j m\rangle = |j m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^j(R). \quad (7.37)$$

Selon la paramétrisation (\hat{n}, ψ , angles d’Euler, ...), on écrira aussi $\mathcal{D}_{m'm}^j(\hat{n}, \psi)$, $\mathcal{D}_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma)$, etc. Par (7.7), on a donc

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j m' | D(\alpha, \beta, \gamma) | j m \rangle \\ &= \langle j m' | e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z} | j m \rangle \\ &= e^{-i\alpha m'} d_{m'm}^j(\beta) e^{-i\gamma m} \end{aligned} \quad (7.38)$$

où la matrice d^j est définie par

$$d_{m'm}^j(\beta) = \langle j m' | e^{-i\beta J_y} | j m \rangle. \quad (7.39)$$

Une formule explicite pour d^j sera donnée au paragraphe suivant. On a encore

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m'm}^j(\hat{z}, \psi) &= e^{-i\psi m} \delta_{mm'} \\ \mathcal{D}_{m'm}^j(\hat{y}, \psi) &= d_{m'm}^j(\psi). \end{aligned} \quad (7.40)$$

Exercice : Calculer $\mathcal{D}^j(\hat{x}, \psi)$. (On pourra utiliser (7.5).)

On note que $\mathcal{D}^j(\hat{z}, 2\pi) = (-1)^{2j} I$, puisque $(-1)^{2m} = (-1)^{2j}$, et la propriété est vraie pour tout axe \hat{n} par conjugaison (7.5)

$$\mathcal{D}^j(\hat{n}, 2\pi) = (-1)^{2j} I. \quad (7.41)$$

2. En fait, on vient de trouver une condition nécessaire sur les j, m . Le fait que tous ces j donnent effectivement des représentations va être vérifié au paragraphe suivant.

Cela peut paraître très surprenant, la rotation de 2π , donc une opération identité, étant représentée par la matrice $-I$ dans une représentation de spin demi-entier. L'interprétation est que les représentations de spin demi-entier sont des représentations "à une phase près", en fait ici à un signe près, de $\mathrm{SO}(3)$. La rotation identité (ou de 2π) est représentée soit par I soit par $-I$. Comme nous l'avons discuté au § 6.1.1, ces représentations à une phase près sont admises par la physique quantique.

On vérifie aussi que les matrices \mathcal{D}^j sont de déterminant 1, (ou de façon équivalente, que les représentants des générateurs infinitésimaux sont de trace nulle). En effet si $\hat{n} = R\hat{z}$, $\mathcal{D}(\hat{n}, \psi) = \mathcal{D}(R)\mathcal{D}(\hat{z}, \psi)\mathcal{D}^{-1}(R)$, donc

$$\det \mathcal{D}(\hat{n}, \psi) = \det \mathcal{D}(\hat{z}, \psi) = \det e^{-i\psi J_z} = \prod_{m=-j}^j e^{-im\psi} = 1. \quad (7.42)$$

Enfin, puisque le caractère peut être évalué sur le représentant $\mathcal{D}(\hat{z}, \psi)$ de la classe de conjugaison

$$\chi_j(\psi) = \mathrm{tr} \mathcal{D}(\hat{z}, \psi) = \sum_{m=-j}^j e^{-im\psi} = \frac{\sin(j + \frac{1}{2})\psi}{\sin \frac{1}{2}\psi}, \quad (7.43)$$

comme annoncé plus haut en (5.8).

Il peut être utile d'écrire explicitement ces matrices dans les cas $j = \frac{1}{2}$ et $j = 1$. Le cas de $j = \frac{1}{2}$ est très simple, puisque

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{\frac{1}{2}}(R) &= U = e^{-i\frac{1}{2}\psi \hat{n} \cdot \vec{\sigma}} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\psi}{2} - i \cos \theta \sin \frac{\psi}{2} & -i \sin \frac{\psi}{2} \sin \theta e^{-i\phi} \\ -i \sin \frac{\psi}{2} \sin \theta e^{i\phi} & \cos \frac{\psi}{2} + i \cos \theta \sin \frac{\psi}{2} \end{pmatrix} \\ &= e^{-i\frac{\alpha}{2}\sigma_3} e^{-i\frac{\beta}{2}\sigma_2} e^{-i\frac{\gamma}{2}\sigma_3} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} & \cos \frac{\beta}{2} e^{\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Pour $j = 1$, dans la base $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$ et $|1, -1\rangle$ où J_z est diagonale

$$J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad J_+ = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_- = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.44)$$

d'où

$$d^1(\beta) = e^{-i\beta J_y} = \begin{pmatrix} \frac{1+\cos \beta}{2} & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \frac{1-\cos \beta}{2} \\ \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \cos \beta & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} \\ \frac{1-\cos \beta}{2} & \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \frac{1+\cos \beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.45)$$

Exercice : vérifier ces expressions en calculant J_y^2 , en notant que $J_y^3 = J_y$ et en construisant l'exponentielle $e^{-i\beta J_y}$ par son développement en série.

De $\mathrm{SO}(3)$ à $\mathrm{SU}(2)$

On voit aussi que dans cette construction des représentations de $\mathrm{SO}(3)$ par exponentiation des

représentations de son algèbre de Lie $so(3)$, on a été naturellement mené à l'étude du groupe $SU(2)$, puisque la représentation de $spin \frac{1}{2}$ de l'algèbre $so(3)$ fournit une matrice de $SU(2)$, unitaire et de déterminant 1 comme on vient de le voir. Comme on l'a vu, le groupe $SU(2)$ a une algèbre de Lie isomorphe à celle de $SO(3)$. Les représentations des deux algèbres sont donc les mêmes, et les représentations de $spin j$ entier ou demi-entier sont des représentations (au sens ordinaire) du groupe $SU(2)$. La relation entre les groupes $SO(3)$ et $SU(2)$, ayant même structure locale (même algèbre de Lie) mais une structure globale (topologie) différente, est un sujet fort intéressant mais que nous ne pouvons poursuivre ici.

Irréductibilité

On démontre que la représentation de $spin j$ est irréductible : elle n'admet pas de sous-espace invariant.

Sinon elle serait complètement réductible et il existerait nécessairement des opérateurs diagonaux par blocs, différents de l'identité et commutant avec les matrices de la représentation, en particulier avec les générateurs J_i . Or dans la base (7.36) toute matrice M commutant avec J_z est diagonale, $M_{mm'} = \mu_m \delta_{mm'}$, (le vérifier!), et la commutation avec J_+ force tous les μ_m à être égaux : la matrice M est multiple de l'identité et la représentation est bien irréductible.

On peut aussi se demander pourquoi l'étude des représentations de dimension finie que nous venons de construire suffit aux besoins du physicien, par exemple en mécanique quantique, où la scène se passe en général dans un espace de Hilbert de dimension infinie. On peut en fait appliquer les résultats du § 5.1.4 et affirmer que

Toute représentation de $SO(3)$ dans un espace de Hilbert est équivalente à une représentation unitaire, et donc est complètement réductible en une somme (finie ou infinie) de représentations irréductibles de dimension finie.

Orthogonalité et complétude des représentations irréductibles de $SO(3)$ et $SU(2)$

Comme on l'a déjà mentionné, les relations d'orthogonalité et de complétude du type (5.22, 5.23, 5.24) des éléments de matrice et des caractères des représentations irréductibles sont encore satisfaites dans un groupe de Lie compact comme $SO(3)$ ou $SU(2)$. Le seul point qui mérite d'être explicité est la mesure d'intégration "de Haar" sur le groupe, ou la forme de la distribution delta de Dirac correspondante. L'une et l'autre dépendent de la paramétrisation choisie pour le groupe. Dans les paramètres $\hat{n} = (\theta, \phi)$, ψ , on montre que, pour $U \in SU(2)$

$$d\mu(U) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\psi}{2} \sin \theta \, d\psi \, d\theta \, d\phi \quad (7.46)$$

avec un volume

$$\text{vol}(SU(2)) = \int_{SU(2)} d\mu(U) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\psi \sin^2 \frac{\psi}{2} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi^2 \quad (7.47)$$

tandis que pour $SO(3)$, on a encore $d\mu(R) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\psi}{2} \sin \theta \, d\psi \, d\theta \, d\phi$ mais comme ψ est restreint à $(0, \pi)$,

$$\text{vol}(SO(3)) = \pi^2. \quad (7.48)$$

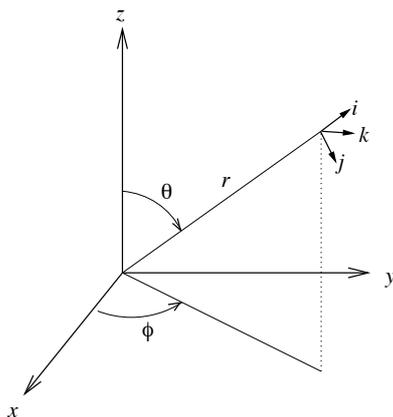


FIGURE 7.2 – Coordonnées sphériques : le vecteur unitaire \vec{i} est radial, \vec{j} est dans le plan vertical d'angle azimutal ϕ .

Dans ces conditions on a pour $U \in \text{SU}(2)$

$$(2j+1) \int \frac{d\mu(U)}{2\pi^2} \mathcal{D}_{mn}^j(U) \mathcal{D}_{m'n'}^{j*}(U) = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \quad (7.49)$$

$$\sum_{j=0, \frac{1}{2}, \dots} \sum_{m, n=-j, \dots, j} (2j+1) \mathcal{D}_{mn}^j(U) \mathcal{D}_{mn}^{j*}(U') = 2\pi^2 \delta(U, U') \quad (7.50)$$

et pour les caractères $\chi_j(\psi) = \frac{\sin(j+\frac{1}{2})\psi}{\sin\frac{1}{2}\psi}$

$$\int_0^{2\pi} d\psi \sin^2 \frac{\psi}{2} \chi_j(\psi) \chi_{j'}(\psi) = \pi \delta_{jj'} \quad (7.51)$$

$$\sum_{j=0, \frac{1}{2}, \dots} \chi_j(\psi) \chi_j(\psi') = \frac{\pi}{\sin^2 \frac{\psi}{2}} \delta(\psi, \psi'), \quad (7.52)$$

avec $\delta(\psi, \psi') = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (\delta(\psi - \psi' + k4\pi) + \delta(\psi + \psi' + k4\pi))$. Exercice : vérifier ces relations d'orthogonalité et de complétude, la deuxième en utilisant (5.40).

7.3 Coordonnées sphériques. Harmoniques sphériques.

Dans les coordonnées sphériques $\vec{r} = (r, \phi, \theta)$ (cf Fig. 7.2), on écrit le gradient

$$\vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial r} + \vec{j} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{k} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (7.53)$$

donc $\vec{r} \wedge \vec{\nabla} = \vec{j} \left(-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \vec{k} \frac{\partial}{\partial \theta}$ et en projetant sur les axes Ox, Oy, Oz , on trouve que les générateurs J_i s'écrivent

$$J_3 = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (7.54)$$

$$J_1 = -i \left[-\cos \phi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \phi} - \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \quad (7.55)$$

$$J_2 = -i \left[-\sin \phi \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \phi} + \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \quad (7.56)$$

$$(7.57)$$

On vérifie que le laplacien s'écrit

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \vec{J}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \vec{J}^2. \quad (7.58)$$

L'opérateur de Casimir de SO(3), $\vec{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$, est au facteur $1/r^2$ près, la partie angulaire du laplacien en coordonnées sphériques. On note $\Delta_{S^2} = -\vec{J}^2$ ce "laplacien sur la sphère unité"

$$\Delta_{S^2} = -\vec{J}^2 = \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (7.59)$$

Les *harmoniques sphériques* $Y_l^m(\theta, \phi)$ sont des fonctions propres de \vec{J}^2 et J_z dans ces coordonnées, auxquelles on impose d'être monovaluées, ce qui n'a lieu que si l et m sont entiers. Dans le langage de la mécanique quantique, nous dirons que les états propres $|lm\rangle$ de \vec{J}^2 et J_z sont représentés par les fonctions d'onde

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l, m \rangle. \quad (7.60)$$

Les expressions des premiers Y_l^m peuvent être utiles

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (7.61)$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (7.62)$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^3 \theta - 1) \quad Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}. \quad (7.63)$$

Ces fonctions $Y_l^m(\theta, \phi)$ sont dotées de nombreuses propriétés remarquables :

(i) Elles satisfont les équations différentielles

$$(\Delta_{S^2} + l(l+1)) Y_l^m = 0 \quad (7.64)$$

$$J_z Y_l^m = -i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m = m Y_l^m \quad (7.65)$$

et peuvent s'écrire

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \sin^{-m} \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l-m} \sin^{2l} \theta. \quad (7.66)$$

(ii) Elles sont normalisées à 1 sur la sphère unité et plus généralement y satisfont des propriétés d'orthogonalité et de complétude

$$\int d\Omega Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (7.67a)$$

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta', \phi') &= \delta(\Omega, \Omega') := \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')}{\sin \theta} \\ &= \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\phi - \phi') \end{aligned} \quad (7.67b)$$

où la "fonction delta" de Dirac est adaptée à la mesure d'intégration $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$. Eq. (7.67b) veut dire que toute fonction de (θ, ϕ) peut se développer sur les Y_l^m selon

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l,m} f_{lm} Y_l^m(\theta, \phi) \quad \text{avec} \quad f_{lm} = \int d\Omega' Y_l^{m*}(\theta', \phi') f(\theta', \phi')$$

(iii) On peut considérer $Y_l^m(\theta, \phi)$ comme fonction du vecteur unitaire \hat{n} d'angles directeurs θ, ϕ . Si le vecteur \hat{n} est transformé en \hat{n}' par la rotation R , on a

$$Y_l^m(\hat{n}') = Y_l^{m'}(\hat{n}) \mathcal{D}^l(R)_{m'm} \quad (7.68)$$

ce qui exprime que les Y_l^m se transforment comme des vecteurs de la représentation de spin l .

(iv) On vérifie sur l'expression ci-dessus les relations de symétrie en m

$$Y_l^{m*}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \phi) \quad (7.69)$$

et de parité

$$Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi). \quad (7.70)$$

Noter qu'à $\theta = 0$, $Y_l^m(0, \phi)$ s'annule sauf pour $m = 0$, cf. (7.74, 7.76).

(v) Les harmoniques sphériques satisfont aussi des relations de récurrence de deux types : celles issues de l'action de J_{\pm} , opérateurs différentiels qui agissent selon (7.36)

$$e^{\pm i\phi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] Y_l^m = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_l^{m \pm 1} \quad (7.71)$$

et celles provenant de la multiplication des représentations, (cf. plus bas, § 7.4)

$$\sqrt{2l+1} \cos \theta Y_l^m = \left(\frac{(l+m)(l-m)}{2l-1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l-1}^m + \left(\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{2l+3} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l+1}^m. \quad (7.72)$$

(vi) Les harmoniques sphériques donnent des éléments de matrice particuliers des matrices de rotations \mathcal{D}

$$\left[\frac{2l+1}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{m0}^l(\phi, \theta, 0) = Y_l^{m*}(\theta, \phi). \quad (7.73)$$

(vii) Finalement on introduit les *polynômes et fonctions de Legendre* $P_l(u)$ et $P_l^m(u)$ définis pour l entier et $u \in [-1, 1]$ par

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \quad (7.74)$$

$$P_l^m(u) = (1 - u^2)^{\frac{1}{2}m} \frac{d^m}{du^m} P_l(u) \quad \text{pour } 0 \leq m \leq l. \quad (7.75)$$

Les harmoniques sphériques sont reliées aux fonctions de Legendre $P_l^m(\cos \theta)$ (pour $m \geq 0$) par

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)}{4\pi(l+m)} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (7.76)$$

donc

$$\mathcal{D}_{m0}^l(0, \theta, 0) = d_{m0}^l(\theta) = (-1)^m \left[\frac{(l-m)}{(l+m)} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \theta) = \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_l^{m*}(\theta, 0). \quad (7.77)$$

En particulier, $d_{00}^l(\theta) = P_l(\cos \theta)$. En général, $d_{m'm}^l(\theta)$ est relié au polynôme de Jacobi

$$P_l^{(\alpha, \beta)}(u) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} (1-u)^{-\alpha} (1+u)^{-\beta} \frac{d^l}{du^l} [(1-u)^{\alpha+l} (1+u)^{\beta+l}] \quad (7.78)$$

par

$$d_{m'm}^j(\theta) = \left[\frac{(j+m')!(j-m)!}{(j+m)!(j-m')!} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} \right)^{m+m'} \left(\sin \frac{\theta}{2} \right)^{m-m'} P_{j-m'}^{(m'-m, m'+m)}(\cos \theta). \quad (7.79)$$

Les polynômes de Legendre $P_l(u)$ sont des polynômes orthogonaux sur l'intervalle $[-1, 1]$: $\int_{-1}^1 du P_l(u) P_{l'}(u) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$. Ils satisfont les relations de récurrence $(2l+1)uP_l(u) = (l+1)P_{l+1} + lP_{l-1}$, ainsi que l'équation différentielle $(\Delta_{S^2} + l(l+1))P_l(\hat{n} \cdot \hat{n}') = 0$, le laplacien agissant sur le vecteur unitaire \vec{n} . Les premiers P_l sont

$$P_0 = 1 \quad P_1 = u \quad P_2 = \frac{1}{2}(3u^2 - 1) \quad P_3 = \frac{1}{2}(5u^3 - 3u), \dots \quad (7.80)$$

Vérifier que (7.74) implique $P_l(1) = 1$, $P_l(-x) = (-1)^l P_l(x)$. Une "fonction génératrice" des P_l est donnée par

$$\frac{1}{\sqrt{1-2ut+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(u) \quad (7.81)$$

avec comme conséquence que si $r' < r$, et θ l'angle entre \vec{r} et \vec{r}'

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r'^l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta) \quad (7.82)$$

formule importante pour le développement d'un potentiel coulombien.

Ces polynômes nous seront utiles par exemple pour les "développements en ondes partielles", cf plus bas (7.110).

On a alors la "formule d'addition"

$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta) = \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\hat{n}) Y_l^{m*}(\hat{n}') \quad (7.83)$$

où θ désigne l'angle entre les directions \hat{n} et \hat{n}' . Cette formule peut se vérifier en démontrant que le membre de droite satisfait bien les équations différentielles satisfaites par P_l .

7.4 Produit tensoriel de représentations

7.4.1 Produit direct de représentations et l'"addition de moments angulaires"

Intéressons nous au produit de deux représentations de spin j_1 et j_2 et à leur décomposition sur des états de spin total donné ("décomposition en représentations irréductibles"). On part donc

de la représentation produit engendrée par les vecteurs

$$|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \quad \text{abrégé en} \quad |m_1 m_2\rangle \quad (7.84)$$

sur lesquels agissent les générateurs infinitésimaux sous la forme

$$\vec{J} = \vec{J}^{(1)} \otimes I^{(2)} + I^{(1)} \otimes \vec{J}^{(2)}. \quad (7.85)$$

L'indice supérieur indique sur quel espace agissent les opérateurs. Par abus de notation, on écrit souvent au lieu de (7.85)

$$\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)} \quad (7.85')$$

et (en Mécanique Quantique), on parle de l'“addition des moments angulaires” $J^{(1)}$ et $J^{(2)}$. Il s'agit donc de décomposer les vecteurs (7.84) sur une base de vecteurs propres de \vec{J} et J_z . Comme $\vec{J}^{(1)2}$ et $\vec{J}^{(2)2}$ commutent entre eux et avec \vec{J}^2 et J_z , on peut chercher des vecteurs propres communs qu'on notera

$$|(j_1 j_2) J M\rangle \quad \text{ou plus simplement} \quad |J M\rangle \quad (7.86)$$

étant entendu qu'on s'est fixé la valeur de j_1 et j_2 . La question est donc double : quelles valeurs J et M peuvent-ils prendre et quelle est la matrice du changement de base $|m_1 m_2\rangle \rightarrow |J M\rangle$? En d'autres termes quelle est la décomposition (de Clebsch-Gordan) et quels sont les coefficients de Clebsch-Gordan ?

Les valeurs possibles de M , valeur propre de $J_z = J_z^{(1)} + J_z^{(2)}$ sont aisées à trouver

$$\begin{aligned} \langle m_1 m_2 | J_z | J M \rangle &= (m_1 + m_2) \langle m_1 m_2 | J M \rangle \\ &= M \langle m_1 m_2 | J M \rangle \end{aligned} \quad (7.87)$$

et la seule valeur de M telle que $\langle m_1 m_2 | J M \rangle \neq 0$ est donc

$$M = m_1 + m_2. \quad (7.88)$$

A j_1, j_2 et M fixés, il y a autant de vecteurs indépendants ayant cette valeur de M qu'il y a de couples (m_1, m_2) satisfaisant (7.88), soit

$$n(M) = \begin{cases} 0 & \text{si } |M| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |M| & \text{si } |j_1 - j_2| \leq |M| \leq j_1 + j_2 \\ 2 \inf(j_1, j_2) + 1 & \text{si } 0 \leq |M| \leq |j_1 - j_2| \end{cases} \quad (7.89)$$

(voir Fig. 7.3 pour laquelle $j_1 = 5/2$ and $j_2 = 1$). Soit N_J le nombre de fois où la représentation de spin J apparaît dans la décomposition du produit des représentations de spin j_1 et j_2 . Les $n(M)$ vecteurs de valeur propre M pour J_z peuvent aussi s'interpréter comme provenant des N_J vecteurs $|J M\rangle$ pour les différentes valeurs de J compatibles avec cette valeur de M

$$n(M) = \sum_{J \geq |M|} N_J \quad (7.90)$$

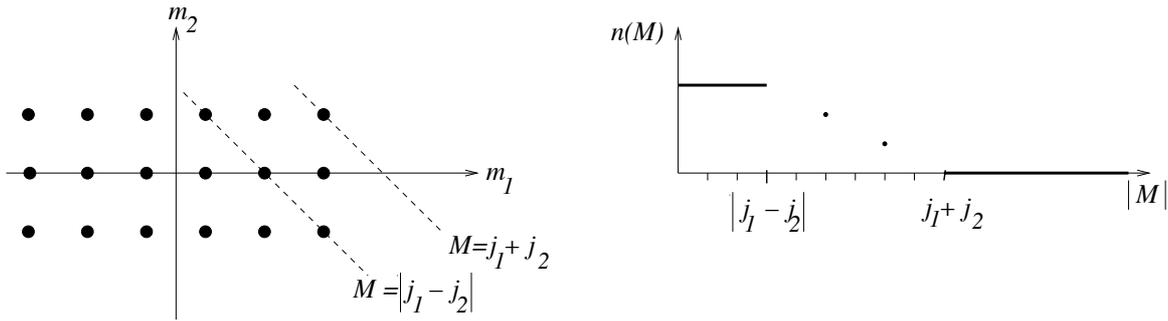


FIGURE 7.3 – Les valeurs possibles de M et leur multiplicité

soit en retranchant membre à membre deux telles relations

$$\begin{aligned}
 N_J &= n(J) - n(J + 1) \\
 &= 1 \quad \text{si et seulement si} \quad |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \\
 &= 0 \quad \text{sinon.}
 \end{aligned}
 \tag{7.91}$$

En conclusion, nous venons de démontrer que les $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ vecteurs (7.84) (à j_1 et j_2 fixés) peuvent se réexprimer en fonction des vecteurs $|JM\rangle$ où

$$\begin{aligned}
 J &= |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 \\
 M &= -J, -J + 1, \dots, J.
 \end{aligned}
 \tag{7.92}$$

Noter qu'en définitive les multiplicités N_J valent 0 ou 1 ; c'est une particularité de SU(2) que des multiplicités supérieures à 1 n'apparaissent pas dans la décomposition du produit de deux représentations irréductibles, c'est-à-dire ici de spin fixé.

Exercices : 1. Vérifier que la multiplicité totale est $\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ comme il se doit.

2. Vérifier que ces règles d'“addition des moments angulaires” sont bien ce qu'on obtient par la méthode générale du chapitre 5, en utilisant les caractères de SU(2) et leur orthogonalité pour la mesure (7.51), autrement dit calculer $\int_0^{2\pi} \frac{d\psi}{\pi} \sin^2 \frac{\psi}{2} \chi_{j_1}(\psi) \chi_{j_2}(\psi) \chi_J(\psi)$.

7.4.2 Coefficients de Clebsch-Gordan, symboles 3-j

Le changement de base $|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \rightarrow |(j_1 j_2) JM\rangle$ s'effectue à l'aide des coefficients de Clebsch-Gordan (C.G.) $\langle (j_1 j_2); JM | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle$

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J \langle (j_1 j_2) JM | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle |(j_1 j_2) JM\rangle
 \tag{7.93}$$

$$|(j_1 j_2); JM\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle (j_1 j_2) JM | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle^* |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle.
 \tag{7.94}$$

Leur valeur dépend en fait d'un choix de phase relative entre les vecteurs (7.84-7.86) ; la convention habituelle est que pour chaque valeur de J , on choisit

$$\langle j_1 m_1 = j_1; j_2 m_2 = J - j_1 | J M = J \rangle \quad \text{réel.} \quad (7.95)$$

Les autres vecteurs sont alors définis sans ambiguïté par (7.36) et on va montrer que tous les C.G. sont réels. Les C.G. satisfont des relations de récurrence consécutives de (7.36). Appliquant en effet J_{\pm} aux deux membres de (7.93a), on obtient

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \langle (j_1 j_2) J M | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle \\ = \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)} \langle (j_1 j_2) J M \pm 1 | j_1 m_1 \pm 1; j_2 m_2 \rangle \\ + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} \langle (j_1 j_2) J M \pm 1 | j_1 m_1; j_2 m_2 \pm 1 \rangle \end{aligned} \quad (7.96)$$

qui permet à l'aide de la normalisation $\sum_{m_1, m_2} |\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | (j_1 j_2) J M \rangle|^2 = 1$ et de la convention (7.95) de déterminer tous les C.G. Comme annoncé, ils sont clairement tous réels.

Les C.G. du groupe $SU(2)$, qui décrivent un changement de base orthogonale, satisfont des propriétés d'orthogonalité et de complétude

$$\begin{aligned} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | (j_1 j_2) J M \rangle \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | (j_1 j_2) J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \\ \text{si } |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \\ \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | (j_1 j_2) J M \rangle \langle j_1 m'_1; j_2 m'_2 | (j_1 j_2) J M \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \\ \text{si } |m_1| \leq j_1, |m_2| \leq j_2. \end{aligned} \quad (7.97)$$

Noter que dans la première ligne, m_2 est fixé par la donnée de m_1 , à M donné ; et que dans la deuxième, M est fixé en termes de m_1 et de m_2 . Chaque relation n'implique donc qu'une seule somme.

Exercice. Montrer en appliquant une opération du groupe $SU(2)$ aux deux membres de (7.93) que l'on peut décomposer le produit des matrices \mathcal{D}^{j_1} et \mathcal{D}^{j_2} sous la forme³

$$\mathcal{D}_{m_1 m'_1}^{j_1} \mathcal{D}_{m_2 m'_2}^{j_2} = \sum_{J, M, M'} \langle J M | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle^* \langle J M' | j_1 m'_1; j_2 m'_2 \rangle \mathcal{D}_{M M'}^J. \quad (7.98)$$

Plutôt que les coefficients de Clebsch-Gordan, on peut considérer un ensemble de coefficients équivalents, dits *symboles 3-j*. Ils sont définis par

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2+M}}{\sqrt{2J+1}} \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | (j_1 j_2) J M \rangle \quad (7.99)$$

3. Dans le cas présent de $SO(3)$, où tous les coefficients de C-G sont réels, la conjugaison complexe ne s'impose pas, mais nous la laissons pour bien mettre en évidence la structure du développement.

et ont l'intérêt de jouir de propriétés de symétrie simples :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

est invariant par permutation circulaire des trois colonnes et change par le signe $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ quand deux colonnes sont permutées ou quand on change les signes de m_1 , m_2 et m_3 . Le lecteur trouvera dans la littérature de nombreuses tables et formules explicites.

Contentons-nous de donner les valeurs pour les spins les plus bas

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} : \begin{cases} |(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})1, 1\rangle & = & |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})1, 0\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle) \\ |(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})0, 0\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle) \\ |(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})1, -1\rangle & = & |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{cases} \quad (7.100)$$

et

$$\frac{1}{2} \otimes 1 : \begin{cases} |(\frac{1}{2}, 1)\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle & = & |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 1\rangle \\ |(\frac{1}{2}, 1)\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{2}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 0\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, 1\rangle) \\ |(\frac{1}{2}, 1)\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{3}} (|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, -1\rangle + \sqrt{2}|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, 0\rangle) \\ |(\frac{1}{2}, 1)\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle & = & |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, -1\rangle \\ |(\frac{1}{2}, 1)\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{3}} (-|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 0\rangle + \sqrt{2}|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, 1\rangle) \\ |(\frac{1}{2}, 1)\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle & = & \frac{1}{\sqrt{3}} (-\sqrt{2}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, -1\rangle + |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, 0\rangle) \end{cases} \quad (7.101)$$

On note sur le cas $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2}$ la propriété que les vecteurs de spin total $j = 1$ sont symétriques dans l'échange des deux spins, celui de spin 0 antisymétrique. La propriété est générale : dans la composition de deux représentations de spin $j_1 = j_2$, les vecteurs résultants de spin $j = 2j_1, 2j_1 - 2, \dots$ sont symétriques, ceux de spin $2j_1 - 1, 2j_1 - 3, \dots$ sont antisymétriques. Cela est apparent sur l'expression (7.99) ci-dessus, compte tenu des propriétés annoncées des symboles $3-j$.

Dans le même ordre d'idées, soit le produit complètement antisymétrique de $2j + 1$ copies d'une représentation de spin j . On peut montrer que cette représentation est de spin 0 (exercice suivant). (Cela a une conséquence en physique atomique, dans le remplissage des couches électroniques : une couche complète a un moment orbital total et un spin total nuls donc aussi un moment angulaire total nul.)

Exercice. On considère le produit complètement antisymétrique de $N = 2j + 1$ représentations de spin j . Montrer que cette représentation est engendrée par le vecteur $\epsilon_{m_1 m_2 \dots m_N} |j m_1, j m_2, \dots, j m_N\rangle$, qu'il est invariant par l'action de SU(2) et donc que la représentation construite est celle de spin $J = 0$.

7.4.3 Théorème de Wigner–Eckart

Selon le théorème de Wigner (chap. 6, § 1), la transformation d'un opérateur sur \mathcal{H} sous l'action d'une rotation R de SO(3) obéit à : $A \rightarrow U(R)AU(R)^\dagger$. Supposons qu'on a un ensemble de tels

opérateurs, A_α , $\alpha = 1, 2, \dots$, qui se transforment linéairement les uns dans les autres dans ces transformations, c'est-à-dire qui forment une représentation :

$$A_\alpha \rightarrow U(R)A_\alpha U(R)^\dagger = \sum_{\alpha'} A_{\alpha'} \mathcal{D}_{\alpha'\alpha}(R) . \quad (7.102)$$

Si la représentation D est irréductible, les opérateurs A_α forment ce qu'on appelle un opérateur (ou "tenseur") irréductible. Dans le cas qui nous occupe ici du groupe $SO(3)$ ou $SU(2)$, un tel opérateur irréductible a un spin j fixé et $2j+1$ composantes indexées par $m = -j, -j+1, \dots, j$. Par exemple, en physique atomique, l'opérateur moment cinétique \vec{J} et l'opérateur moment dipolaire électrique $\sum_i q_i \vec{r}_i$ se transforment comme des vecteurs sous l'effet des rotations, donc $j = 1$, $m = -1, 0, 1$. Supposons donc que les A_m se transforment par la représentation irréductible D^j et appliquons les sur des états $|j'm'\rangle$ se transformant selon la représentation irréductible $D^{j'}$. L'état résultant se transforme selon

$$U(R)A_m|j'm'\rangle = U(R)A_m U(R)^\dagger U(R)|j'm'\rangle = \mathcal{D}_{m_1 m}^j(R) \mathcal{D}_{m'_1 m'}^{j'}(R) A_{m_1} |j'm'_1\rangle \quad (7.103)$$

c'est-à-dire selon le produit des représentations D^j et $D^{j'}$. On peut développer ce produit sur des représentations irréductibles comme on l'a vu plus haut en (7.98) :

$$\mathcal{D}_{m_1 m}^j(R) \mathcal{D}_{m'_1 m'}^{j'}(R) = \sum_{j'' m'' m''_1} \langle j'' m'' | j, m; j', m' \rangle \langle j'' m''_1 | j, m_1; j', m'_1 \rangle^* \mathcal{D}_{m''_1 m''}^{j''}(R) . \quad (7.104)$$

Les matrices des représentations satisfont les propriétés d'orthogonalité (7.49) et de décomposition (7.104). On peut donc écrire

$$\begin{aligned} \langle j'' m'' | A_m | j' m' \rangle &= \langle j'' m'' | U(R)^\dagger U(R) A_m | j' m' \rangle \\ &= \int_{SO(3)} \frac{d\mu(R)}{\text{vol}(SO(3))} \langle j'' m'' | U(R)^\dagger U(R) A_m | j' m' \rangle \\ &= \int_{SO(3)} \frac{d\mu(R)}{\text{vol}(SO(3))} \sum_{m_1, m'_1, m''_1} \mathcal{D}_{m''_1 m''}^{j''*}(R) \langle j'' m''_1 | A_{m_1} | j' m'_1 \rangle \mathcal{D}_{m_1 m}^j(R) \mathcal{D}_{m'_1 m'}^{j'}(R) \\ &= \frac{1}{2j''+1} \sum_{m_1, m'_1, m''_1} \langle j'' m'' | j, m; j', m' \rangle \langle j'' m''_1 | j, m_1; j', m'_1 \rangle^* \langle j'' m''_1 | A_{m_1} | j' m'_1 \rangle , \end{aligned} \quad (7.105)$$

avec la mesure $d\mu(R)$ et le volume $\text{vol}(SO(3)) = \pi^2$ discutés plus haut en (7.48). Notons

$$\langle j'' \| A \| j' \rangle = \frac{1}{2j''+1} \sum_{m_1, m'_1, m''_1} \langle j'' m''_1 | j, m_1; j', m'_1 \rangle^* \langle j'' m''_1 | A_{m_1} | j' m'_1 \rangle . \quad (7.106)$$

Il en découle que (théorème de Wigner–Eckart) :

$$\langle j'' m'' | A_m | j' m' \rangle = \langle j'' \| A \| j' \rangle \langle j'' m'' | j, m; j', m' \rangle \quad (7.107)$$

dans laquelle les éléments de matrice "réduits" $\langle . \| A \| . \rangle$ sont indépendants de m, m', m'' . L'élément de matrice du membre de gauche dans (7.107) s'annule si le coefficient de Clebsch–Gordan est nul (en particulier si la représentation j'' n'apparaît pas dans le produit de j et j'). Ce

théorème a de nombreuses conséquences en physique atomique et nucléaire, où il occasionne des “règles de sélection”. Voir par exemple le cas des opérateurs moments multipolaires électriques au paragraphe suivant.

Exercices.

1. Toujours pour le groupe SO(3), soit A_m les composantes d’un opérateur vectoriel irréductible (par exemple, l’opérateur moment dipolaire du paragraphe suivant). Montrer en utilisant le théorème de Wigner–Eckart que

$$\langle j, m_2 | A_m | j, m_1 \rangle = \langle j, m_2 | J_m | j, m_1 \rangle \frac{\langle \vec{J} \cdot \vec{A} \rangle}{j(j+1)}$$

où $\langle \vec{J} \cdot \vec{A} \rangle$ désigne la valeur moyenne de $\vec{J} \cdot \vec{A}$ dans l’état j . En d’autres termes, on peut remplacer \vec{A} par sa projection $\vec{J} \frac{\langle \vec{J} \cdot \vec{A} \rangle}{j(j+1)}$.

2. Reprendre la discussion du théorème de Wigner–Eckart en supposant que les représentations j' et j'' apparaissent avec des multiplicités $m_{j'}$ et $m_{j''}$ et montrer que

$$\langle j'', m''; i'' | A_m | j', m'; i' \rangle = \langle j'' m'' | j, m; j', m' \rangle \langle j''; i'' || A || j'; i' \rangle \quad i' = 1, \dots, m_{j'}, \quad i'' = 1, \dots, m_{j''}$$

En particulier pour un opérateur A invariant ($j = 0$), (comme un Hamiltonien dans le cas d’une symétrie),

$$\langle j'', m''; i'' | A | j', m'; i' \rangle = \delta_{j'j''} \delta_{m'm''} \langle j'; i'' || A || j'; i' \rangle \quad i', i'' = 1, \dots, m_{j'}$$

et le problème de diagonalisation est ramené à celui d’une matrice $m_{j'} \times m_{j'}$.

7.5 Quelques applications physiques

7.5.1 Moments multipolaires

On considère un potentiel créé par une distribution de charge statique $\rho(\vec{r})$

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{d^3r' \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

et on le développe sur les harmoniques sphériques en utilisant les identités (7.82) et (7.83). Il vient

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{l,m} \frac{1}{2l+1} \frac{Y_l^{m*}(\hat{n})}{r^{l+1}} Q_{lm} \quad (7.108)$$

où les Q_{lm} , définis par

$$Q_{lm} = \int d^3r' \rho(\vec{r}') r'^l Y_l^m(\hat{n}') \quad (7.109)$$

sont les *moments multipolaires* de la distribution de charge ρ . Par exemple, si $\rho(\vec{r}) = \rho(r)$ est invariant par rotation, seul Q_{00} est non nul, égal à la charge totale (à $1/\sqrt{4\pi}$ près)

$$Q_{00} = \frac{Q}{\sqrt{4\pi}} = \sqrt{4\pi} \int r^2 dr \rho(r) \quad \phi(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Les trois composantes de Q_{1m} reconstruisent le moment dipolaire $\int d^3r' \rho(\vec{r}') \vec{r}'$. Plus généralement, sous l’effet des rotations, les Q_{lm} forment les composantes d’un opérateur tensoriel se transformant selon la représentation de spin l (et cf. (7.70), de parité $(-1)^l$). En Mécanique Quantique, les Q_{lm} deviennent des opérateurs.

Exercice. En appliquant le théorème de Wigner–Eckart, montrer que $\langle j m_1 | Q_l^m | j m_2 \rangle$ n’est non nul que si $l \leq 2j$.

7.5.2 Etats propres de moment angulaire en Mécanique Quantique

Les harmoniques sphériques peuvent s'interpréter comme les fonctions d'onde dans les coordonnées θ, ϕ des états propres du moment angulaire $\vec{L} = \hbar\vec{J} = \hbar\vec{r} \wedge \vec{\nabla}$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l, m \rangle$$

en analogie avec

$$e^{-i\vec{x}\cdot\vec{p}} = \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle .$$

En particulier, dans un processus de collision décrit par un Hamiltonien invariant par rotation, un état d'impulsion initiale \vec{p}_i selon l'axe des z , (c'est-à-dire $\theta = \phi = 0$), interagit avec un certain centre diffuseur et ressort dans un état d'impulsion \vec{p}_f , avec $|p_i| = |p_f| = p$, selon la direction $\hat{n} = (\theta, \phi)$. On écrit l'amplitude

$$\begin{aligned} \langle p, \theta, \phi | \mathcal{T} | p, 0, 0 \rangle &= \sum_{l'mm'} Y_l^m(\theta, \phi) \langle p, l, m | \mathcal{T} | p, l', m' \rangle Y_l^{m'*}(0, 0) \\ &= \sum_{l'm} Y_l^m(\theta, \phi) \langle p, l, m | \mathcal{T} | p, l', 0 \rangle Y_l^{0*}(0, 0) \\ &= \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} \mathcal{T}_l(p) P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (7.110)$$

selon à nouveau la formule d'addition et $\langle plm | \mathcal{T} | pl'm' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \mathcal{T}_l(p)$ exprimant l'invariance par rotation. C'est le très utile développement en ondes partielles de l'amplitude de diffusion.

Se reporter aux ouvrages de Mécanique Quantique pour de nombreuses applications détaillées de ces principes.

7.5.3 L'isospin

Le groupe SU(2) n'intervient pas en Physique qu'en tant que (relié au) groupe de rotation de l'espace euclidien. Illustrons une autre de ses apparitions par la symétrie d'isospin. Il existe dans la nature un certain nombre de particules élémentaires présentant des propriétés voisines, mais différant par leur charge électrique. C'est le cas du proton et du neutron, de masses $938,28 \text{ MeV}/c^2$ et $939,57 \text{ MeV}/c^2$ respectivement, mais aussi du triplet de mésons pi, π^0 (masse $134,96 \text{ MeV}/c^2$) et π^\pm ($139,57 \text{ MeV}/c^2$), des mésons K etc. Il a été proposé que cela est la manifestation d'une symétrie brisée par les effets électromagnétiques. En l'absence d'interactions électromagnétiques, le proton et le neutron d'une part, les trois mésons π de l'autre seraient des particules de même nature, de même masse, différant seulement par un nombre quantique "interne", à la façon de deux électrons dotés de spins différents. En fait le groupe régissant cette symétrie est aussi SU(2), mais un SU(2) agissant dans un espace abstrait autre que l'espace usuel. On a donné le nom d'*isospin* ou *spin isotopique* au nombre quantique correspondant. Pour résumer, la proposition est donc qu'il existe un groupe SU(2) de symétrie de l'Hamiltonien des interactions fortes, et que les différentes particules sujettes à ces interactions forment des représentations de SU(2) : représentation d'isospin $I = \frac{1}{2}$ pour le nucléon (proton $I_z = +\frac{1}{2}$,

neutron $I_z = -\frac{1}{2}$), isospin $I = 1$ pour les pions ($\pi^\pm : I_z = \pm 1, \pi^0 : I_z = 0$) etc. L'isospin est donc un "bon nombre quantique", conservé dans ces interactions. Ainsi le processus (virtuel) $N \rightarrow N + \pi$, (N pour nucléon) important en physique nucléaire, est compatible avec les règles d'addition des isospins ($\frac{1}{2} \otimes 1$ "contient" $\frac{1}{2}$). Les différentes réactions $N + \pi \rightarrow N + \pi$ autorisées par la conservation de la charge électrique

$$\begin{aligned} p + \pi^+ &\rightarrow p + \pi^+ & I_z &= \frac{3}{2} \\ p + \pi^0 &\rightarrow p + \pi^0 & I_z &= \frac{1}{2} \\ &\rightarrow n + \pi^+ & &'' \\ p + \pi^- &\rightarrow p + \pi^- & I_z &= -\frac{1}{2} \\ &\rightarrow n + \pi^0 & &'' \\ n + \pi^- &\rightarrow n + \pi^- & I_z &= -\frac{3}{2} \end{aligned}$$

conservent aussi l'isospin total I et sa composante I_z mais l'hypothèse d'invariance par SU(2) d'isospin nous apprend d'avantage. Les éléments de matrice de transition des deux réactions dans le canal $I_z = -\frac{1}{2}$, par exemple, doivent être reliés par les règles d'addition de l'isospin. En inversant les relations (7.101), on obtient

$$\begin{aligned} |p, \pi^- \rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} |I = \frac{3}{2}, I_z = -\frac{1}{2} \rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |I = \frac{1}{2}, I_z = -\frac{1}{2} \rangle \\ |n, \pi^0 \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |I = \frac{3}{2}, I_z = -\frac{1}{2} \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |I = \frac{1}{2}, I_z = -\frac{1}{2} \rangle \end{aligned} \quad (7.111)$$

tandis que pour $I_z = 3/2$

$$|p, \pi^+ \rangle = |I = \frac{3}{2}, I_z = \frac{3}{2} \rangle .$$

L'invariance d'isospin implique que $\langle I I_z | \mathcal{T} | I' I'_z \rangle = \mathcal{T}_I \delta_{I' I} \delta_{I'_z I_z}$. (Exercice : le justifier). En calculant alors les éléments de matrice de l'opérateur de transition \mathcal{T} entre ces différents états,

$$\begin{aligned} \langle p\pi^+ | \mathcal{T} | p\pi^+ \rangle &= \mathcal{T}_{3/2} \\ \langle p\pi^- | \mathcal{T} | p\pi^- \rangle &= \frac{1}{3} (\mathcal{T}_{3/2} + 2\mathcal{T}_{1/2}) \\ \langle n\pi^0 | \mathcal{T} | p\pi^- \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{3} (\mathcal{T}_{3/2} - \mathcal{T}_{1/2}) \end{aligned} \quad (7.112)$$

on trouve que les amplitudes satisfont une relation

$$\sqrt{2} \langle n, \pi^0 | \mathcal{T} | p, \pi^- \rangle + \langle p, \pi^- | \mathcal{T} | p, \pi^- \rangle = \langle p, \pi^+ | \mathcal{T} | p, \pi^+ \rangle = \mathcal{T}_{3/2}$$

conséquence non triviale de l'invariance d'isospin, qui implique des inégalités triangulaires entre les modules carrés de ces amplitudes donc entre les sections efficaces de ces réactions

$$\begin{aligned} [\sqrt{\sigma(\pi^- p \rightarrow \pi^- p)} - \sqrt{2\sigma(\pi^- p \rightarrow \pi^0 n)}]^2 &\leq \sigma(\pi^+ p \rightarrow \pi^+ p) \leq \\ &\leq [\sqrt{\sigma(\pi^- p \rightarrow \pi^- p)} + \sqrt{2\sigma(\pi^- p \rightarrow \pi^0 n)}]^2 \end{aligned} \quad (7.113)$$

qui sont bien vérifiées expérimentalement.

Mieux, on constate qu'à une énergie d'environ 180 MeV, les sections efficaces (proportionnelles aux carrés des amplitudes) sont dans les rapports

$$\sigma(\pi^+p \rightarrow \pi^+p) : \sigma(\pi^-p \rightarrow \pi^0n) : \sigma(\pi^-p \rightarrow \pi^-p) = 9 : 2 : 1$$

ce qui indique qu'à cette énergie, la diffusion dans le canal d'isospin 3/2 est prédominante et signale en fait l'existence d'un état intermédiaire, particule très instable ou "résonance", notée Δ , d'isospin 3/2 donc avec quatre états de charge

$$\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0, \Delta^- .$$

Cette particule a un spin 3/2 et une masse $M(\Delta) \approx 1230 \text{ MeV}/c^2$.

7.6 2 Problèmes

7.6.1 Molécule de fullerène

On se propose d'étudier la molécule C_{60} , récemment découverte, ses propriétés de symétrie et ses états électroniques.

A.

La structure de la molécule de C_{60} peut être obtenue en partant d'un icosaèdre régulier (cf. Fig. 1.6) et en tronquant chacune des pyramides à base pentagonale par un plan perpendiculaire à son axe qui coupe les arêtes au tiers de la distance au sommet. La figure résultante est constituée de 20 hexagones réguliers et de 12 pentagones réguliers, et de 60 sommets qui portent les atomes de carbone.

1. On s'intéresse tout d'abord au groupe I de symétrie de rotation de l'icosaèdre. Montrer qu'il est constitué de cinq classes de conjugaison qu'on caractérisera. Combien de représentations irréductibles possède-t-il ?

Montrer que par restriction à I , les représentations de spin entier de $SO(3)$ fournissent des représentations de I . Pour dresser la table de caractères, on considère les représentations de spin 0, 1 et 2 de $SO(3)$. Calculer leurs caractères pour les classes de I . On rappelle que $-2 \cos \frac{\pi}{5}$ et $2 \cos \frac{2\pi}{5}$ sont les racines de l'équation $z^2 + z - 1 = 0$. Montrer que ces représentations de I sont irréductibles ; on les notera **1**, **3** et **5**. La même méthode appliquée à la représentation de spin 3 de $SO(3)$ donne une représentation réductible qui se scinde en deux représentations de dimensions 3 et 4, qu'on notera $\tilde{\mathbf{3}}$ et **4** et dont on trouvera les caractères dans la table ci-après. Compléter cette table.

2. Le groupe d'invariance de la molécule C_{60} est le groupe noté I_h engendré par les rotations de I et la symétrie τ par rapport au centre de l'icosaèdre. Montrer que ce groupe a la structure d'un produit direct $I \otimes \mathbf{Z}_2$ et que chaque représentation D_ρ de I donne lieu à deux représentations $D_{\rho\pm}$ de I_h . Que sont leurs caractères $\chi_{\rho\pm}$?

\downarrow rep. \ classes \rightarrow	1	C_2	C_3	$C_5^{(1)}$	$C_5^{(2)}$
1					
3					
3	3	-1	0	$-2 \cos \frac{2\pi}{5}$	$2 \cos \frac{\pi}{5}$
4	4	0	1	-1	-1
5					

B. 1. Les six électrons de chaque carbone se répartissent en deux électrons sur une couche $1s$ interne, trois électrons de valence qui sont responsables des liaisons entre atomes voisins et un dernier qui va nous intéresser. C'est donc pour 60 électrons qu'il s'agit de trouver des niveaux d'énergie, au prix de certaines approximations qui vont en particulier nous faire négliger les interactions entre électrons.

Soit $v(\vec{r} - \vec{r}_i)$ le potentiel créé par l'ion C^+ placé en \vec{r}_i sur un de ces électrons en \vec{r} . Soit $f_i(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{r}_i)$ une fonction d'onde normalisée de cet électron au voisinage du i -ème atome ($i = 1, \dots, 60$), solution de

$$\left(-\hbar^2 \frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + v(\vec{r} - \vec{r}_i) - e_0 \right) \psi(\vec{r} - \vec{r}_i) = 0 .$$

Dans toute la suite du problème, la fonction ψ sera supposée donnée et pour simplifier, on la supposera à symétrie sphérique autour de \vec{r}_i :

$$f_i(\vec{r}) = \psi(|\vec{r} - \vec{r}_i|) .$$

On considère l'espace E des fonctions d'onde à un électron obtenues par combinaisons linéaires des f_i ,

$$f(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{60} c_i f_i(\vec{r}) .$$

L'hamiltonien auquel est soumis chaque électron s'écrit

$$H = \left(-\hbar^2 \frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + \sum_i v(\vec{r} - \vec{r}_i) \right) .$$

On va chercher une approximation de ses états propres dans l'espace E en minimisant par rapport aux coefficients c_i le rapport $\frac{\langle f|H|f \rangle}{\langle f|f \rangle}$; on admettra que cela revient à diagonaliser la matrice 60×60

$$h_{ij} = \langle f_i | H | f_j \rangle \quad (7.114)$$

c'est-à-dire à résoudre $\sum_j h_{ij} c_j = \mathcal{E} c_i$. C'est ce dernier problème qui doit être simplifié par la théorie des groupes.

Montrer que E constitue l'espace d'une représentation D de I . Écrire la forme de la matrice de la représentation et évaluer son caractère pour les différentes classes. Montrer qu'elle est isomorphe à la représentation régulière. Quelle est sa décomposition en représentations irréductibles

$$D = \oplus n_\rho D_\rho ?$$

2. On examine maintenant la symétrie σ par rapport à un plan passant par les pôles N et S de l'icosaèdre et par deux sommets diamétralement opposés (voir Fig 1.6) : en termes de quels éléments de I et de \mathbf{Z}_2 s'exprime-t-elle ? Combien d'atomes de la molécule laisse-t-elle invariants ?

3. Montrer que l'espace E défini en 1) est aussi l'espace d'une représentation \hat{D} de I_h dont on donnera la valeur du caractère $\hat{\chi}(g)$ en fonction du nombre d'éléments laissés invariants par la transformation g . Quelle est par exemple la valeur de ce caractère pour l'élément σ ?

On se propose de déterminer la décomposition de cette représentation de I_h en représentations irréductibles. Montrer que ce qui précède permet d'écrire

$$\hat{\chi}(g) = \sum_{\rho} n_{\rho+} \chi_{\rho+}(g) + n_{\rho-} \chi_{\rho-}(g) \quad (7.115)$$

pour tout élément g de I_h . Que vaut $n_{\rho+} + n_{\rho-}$? Montrer qu'on peut aisément trouver une combinaison de f_i invariante par I_h . Qu'en déduit-on sur les valeurs de $n_{1\pm}$? En évaluant la somme (7.115) pour g égal successivement à σ (cf. B 2), à τ (cf. A 2) et au produit de τ par une rotation de $2\pi/5$ autour d'un axe joignant une paire de sommets opposés de l'icosaèdre, montrer qu'on peut trouver un nombre suffisant de contraintes pour déterminer complètement les $n_{\rho\pm}$. Vérifier que la solution est

$$n_{3-} = n_{\bar{3}-} = n_{4-} = n_{5-} = 2 .$$

4. Montrer que l'hamiltonien H est invariant sous l'action de I_h et que cela implique la commutation de h (équation (7.114)) avec la matrice de la représentation \hat{D} . On suppose qu'on a su calculer les éléments de matrice de h dans une base de E correspondant à la décomposition de \hat{D} en représentations irréductibles. Que peut-on dire de ces éléments de matrice de h ?

Montrer que la théorie des groupes réduit alors la détermination des niveaux de h à un problème de diagonalisation de petites matrices dont on précisera la taille. Le résultat du calcul est indiqué sur la Fig. 7.4, où les niveaux sont désignés par leur représentation $\rho\pm$, les différentes représentations de I étant notées a, b, c, d, e. Noter que deux niveaux désignés par c+ et e+ sont dégénérés. Au vu des résultats précédents, établir la correspondance entre ces a, b, ... e et les représentations étudiées plus haut et en déduire la multiplicité des niveaux.

C.

1. On place maintenant les 60 électrons qui nous occupent sur les niveaux d'énergie les plus bas du spectre obtenu au B 4), chaque niveau ayant deux états de spin. Écrire la forme générale de la fonction d'onde de ces électrons. Sous quelle représentation de I_h se transforme-t-elle ?

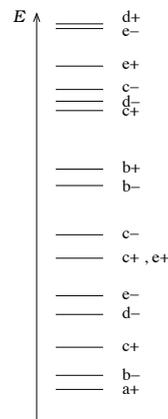


FIGURE 7.4 – Spectre des niveaux de la molécule de fullerène.

2. Le moment électrique dipolaire de la molécule se transforme comme l'opérateur position \vec{r} . En utilisant le théorème de Wigner-Eckart, montrer qu'il s'annule dans l'état fondamental étudié en D 1).

3. On considère maintenant l'ion C_{60}^- obtenu en ajoutant un électron sur le premier ou sur le deuxième niveau électronique non occupé du spectre. Que peut-on dire du moment dipolaire ?

7.6.2 Champ cristallin

Ce problème est consacré au déplacement et à la levée partielle de la dégénérescence des niveaux d'un atome (ou d'un ion) placé dans un cristal et soumis aux anisotropies du champ électrique créé par les ions de ce cristal.

1) Soit G un groupe, H un de ses sous-groupes. Montrer que toute représentation D de G fournit une représentation de H . Si D est irréductible comme représentation de G , peut-on affirmer qu'elle l'est aussi comme représentation de H ? Dans la situation qui nous occupe, G désigne le groupe de symétrie de l'Hamiltonien de l'atome isolé, que vous préciserez, H celui de l'atome dans le cristal, qu'on va étudier dans la suite. Montrer que les niveaux de l'atome considéré se scindent selon les représentations irréductibles de H .

2) On suppose six charges identiques q situées aux points de coordonnées $(x = \pm a, y = z = 0)$, $(x = 0, y = \pm a, z = 0)$ et $(x = y = 0, z = \pm a)$ et on considère le potentiel qu'elles créent au point $\vec{r} = (x, y, z)$. Montrer, sans calcul mais par de simples considérations de symétrie, que pour $r = |\vec{r}| \ll a$,

$$V(x, y, z) \approx \frac{q}{4\pi\epsilon_0 a} \left(6 + \alpha \frac{r^2}{a^2} + \frac{\beta}{a^4} (x^4 + y^4 + z^4 - \gamma r^4) + \dots \right)$$

où α , β et γ sont des constantes numériques qu'on ne cherchera pas à déterminer. (En fait, l'équation de Laplace satisfaite par V fixe $\alpha = 0$ et $\gamma = \frac{3}{5}$.)

Pouvez-vous caractériser géométriquement le groupe de symétrie de ce potentiel ?

Plus généralement, on considère le potentiel créé par des charges identiques situées aux sommets d'un réseau cubique régulier. (On ne se souciera pas des questions de convergence dans la définition de ce potentiel.) Discuter sans calcul le groupe de symétrie H de ce potentiel.

3) On considère d'abord les états à un électron de l'atome isolé. On néglige le spin des électrons. Montrer que ces états sont classifiés par leur moment orbital ℓ . Quelle est la dégénérescence des niveaux d'énergie ? Dans la suite du problème on imagine que l'atome est placé sur un nœud du réseau considéré au 2), et soumis au potentiel créé par les autres charges. Montrer que ses niveaux sont maintenant classifiés par des représentations du groupe H . Pour notre propos, on peut oublier l'inversion d'espace (parité) et ne considérer que le sous-groupe de rotations H' de H .

4) Montrer que H' est d'ordre 24. Il a 5 classes qu'on note E , C_2 , C_3 , C_4 et C'_2 , d'ordres respectifs 1, 6, 8, 6 et 3 ; dans cette notation traditionnelle en cristallographie, l'indice k de la classe C_k indique qu'il s'agit de rotations de $\pm \frac{2\pi}{k}$. Pouvez-vous préciser les axes des rotations de ces différentes classes ? (ce dernier point n'interviendra pas dans la suite).

Combien de représentations irréductibles inéquivalentes ce groupe possède-t-il ? On fournit la table de caractères incomplète suivante, dont vous remplirez les cases vides : A_1 , A_2 , E , T_1 et T_2 sont des notations conventionnelles en physique moléculaire pour ces représentations ; en particulier, A_1 désigne la représentation identité.

\downarrow rep. \ classes \rightarrow	E	C_2	C_3	C_4	C'_2
A_1					
A_2					
E	2	0	-1	0	
T_1	3	-1	0	1	
T_2	3	1	0	-1	

5) Calculer la valeur des caractères des représentations de $SO(3)$ de moment orbital ℓ pour les différentes classes de H' . Montrer que la décomposition des représentations de $SO(3)$ selon les représentations irréductibles de H' peut être déterminée grâce à ces caractères. Calculer effectivement comment se scindent les représentations de moment $0 \leq \ell \leq 3$, c'est-à-dire comment les niveaux de départ se scindent en sous-niveaux. En admettant que pour chaque ℓ , les énergies des sous-niveaux s'ordonnent, le cas échéant, selon $\mathcal{E}_{A_2} < \mathcal{E}_{T_1} < \mathcal{E}_{T_2} < \mathcal{E}_E$, dessiner schématiquement la façon dont les niveaux $0 \leq \ell \leq 3$ se scindent en sous-niveaux, en indiquant à chaque fois la dégénérescence.

