Rotations et Moments Angulaires en Mecanique Quantique - Rotations and angular moments in quantum mechanics

J. van de Wiele

Sommaire

Rotations et moments angulaires en mécanique quantique

J. Van de Wiele

Rotations et moments angulaires en mécanique quantique

J. Van de Wiele[1]

Résumé

Comme en mécanique classique, la rotation en mécanique quantique est une transformation qui fait intervenir le moment cinétique. La différence avec la mécanique classique vient du fait que le moment cinétique est un opérateur vectoriel et non pas un vecteur ordinaire, et que ses composantes ne commutent pas deux-à-deux. Comme pour toute transformation en mécanique quantique, à chaque rotation est associé un opérateur qui agit dans l'espace des états. L'expression de cet opérateur de rotation dépend du type de rotation envisagée : rotation passive si on effectue une rotation du système de référence sans changer le système physique, rotation active si on laisse le système de référence inchangé mais on effectue une rotation sur le système physique.

La première partie (Chaps. 1 et 2) de cet ouvrage traite ces deux aspects. Après avoir défini la transformation géométrique associée à la rotation la plus générale, on donne l'expression de l'opérateur de rotation dans chacun des deux cas. Les lois de transformation des champs scalaires, des champs de vecteurs et des champs de spineurs sont données ainsi que les lois de transformation des opérateurs scalaires, vectoriels et plus généralement des opérateurs de rang quelconque.

La seconde partie (Chaps. 3 et 4) traite l'algèbre des moments angulaires. On définit les coefficients de couplage de 2, 3 et 4 moments angulaires ainsi que les coefficients de recouplage. La notion d'opérateur tensoriel irréductible, généralisation des opérateurs scalaire, vectoriel est introduite ainsi que le théorème de Wigner-Eckart. Les formules d'application dans des cas complexes sont données.

1. Institut de Physique Nucléaire, CNRS-IN2P3, Université Paris-Sud, 91406 Orsay Cedex, France.

Ann. Phys. Fr. **26** • N° 6 • 2001

Abstract

Rotations and angular moments in quantum mechanics

As in classical mechanics, rotation in quantum mechanics is a transformation which deals with angular momentum. The difference with classical mechanics comes from the fact that angular momentum is a vector operator and not a usual vector and its components do not commute. As for any transformation in quantum mechanics, to each rotation we can associate an operator which acts in state space. The expression of this operator depends on whether the rotation is passive, that is we do a rotation of the coordinate axes and the physical system is left unchanged, or active, in which case the coordinate axes are unchanged and the rotation is performed on the physical system.

In the first part (Chaps. 1 and 2) of this book, details concerning both aspects are given. Following the definition of the geometrical transformation associated with the most general rotation, we give the expression of the rotation operator for specific cases. Transformation laws for scalar fields, vector fields and spinor fields are given as well as transformation laws for scalar operators, vector operators and more generally, for operators of any rank.

The second part (Chaps. 3 and 4) deals with angular momentum algebra. We define the coupling coefficients of 2, 3 and 4 angular momenta as well as the recoupling coefficients. The definition of the irreductible tensor operator, which is a generalisation of scalar and vector operators, is given as well as the Wigner-Eckart theorem. The application of this theorem to more complex cases is studied.

Rotations passives

1. Transformations géométriques

Dans le premier paragraphe, nous allons établir les lois de transformation géométriques lorsqu'on passe d'un repère $(\mathcal{S})$ au repère $(\mathcal{S}')$ déduit du premier par rotation.

1.1. Transformation géométrique définie par les angles d'Euler

Soit un repère $(\mathcal{S})$ défini par trois vecteurs unitaires $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ orthogonaux. On considère un second repère $(\mathcal{S}')$ défini par les trois vecteurs unitaires $\mathbf{e}'_{x'}$, $\mathbf{e}'_{y'}$, $\mathbf{e}'_{z'}$ obtenus à partir de $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ par une rotation caractérisée par les trois angles d'Euler γ_1, γ_2, et γ_3 comptés positivement ou négativement.

Les trois rotations successives sont (Fig. 1) :

– une rotation de γ_1 autour de Oz,

– une rotation de γ_2 autour du nouvel axe $Oy = Oy_1$,

– une rotation de γ_3 autour du nouvel axe $Oz = Oz_2$.

Tout point M de l'espace à trois dimensions peut être caractérisé par le vecteur $\mathbf{OM} = \mathbf{r}$ tel que :

$$\mathbf{r} \;=\; x\,\mathbf{e}_x \;+\; y\,\mathbf{e}_y \;+\; z\,\mathbf{e}_z \tag{1-1}$$

x, y et z étant les coordonnées du point M dans le repère $(\mathcal{S})$. Dans le repère $(\mathcal{S}')$, ce *même point* aura les coordonnées x', y' et z' :

$$\mathbf{r} \;=\; x'\,\mathbf{e}'_{x'} \;+\; y'\,\mathbf{e}'_{y'} \;+\; z'\,\mathbf{e}'_{z'}. \tag{1-2}$$

Soit $\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)$ la matrice qui fait passer des anciens vecteurs unitaires aux nouveaux. Nous aurons :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1) & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \tag{1-3}$$

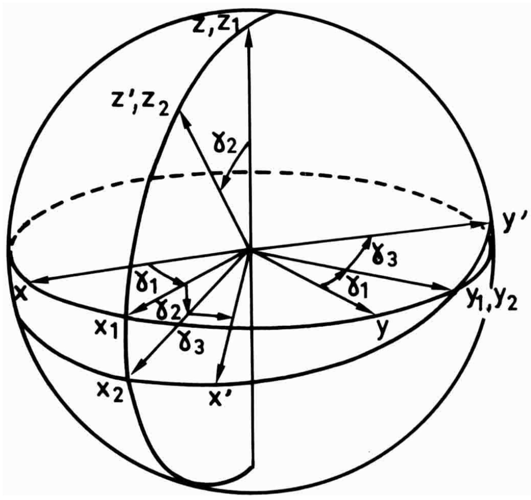

Figure 1. Définition des angles d'Euler. [Definition of the Euler angles.]

Si $\mathbf{e}_{x_1}$, $\mathbf{e}_{y_1}$ et $\mathbf{e}_{z_1}$ sont les vecteurs unitaires obtenus après la rotation de l'angle γ_1 autour de l'axe $Oz = \mathbf{e}_z$, on a

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_{x_1} \\ \mathbf{e}_{y_1} \\ \mathbf{e}_{z_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_1 & \sin\gamma_1 & 0 \\ -\sin\gamma_1 & \cos\gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \tag{1-4}$$

Les vecteurs unitaires $\mathbf{e}_{x_2}$, $\mathbf{e}_{y_2}$ et $\mathbf{e}_{z_2}$ obtenus après la rotation de l'angle γ_2 autour du nouvel axe $Oy = \mathbf{e}_{y_1}$ sont donnés par la relation :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_{x_2} \\ \mathbf{e}_{y_2} \\ \mathbf{e}_{z_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_2 & 0 & -\sin\gamma_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\gamma_2 & 0 & \cos\gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{x_1} \\ \mathbf{e}_{y_1} \\ \mathbf{e}_{z_1} \end{pmatrix}. \tag{1-5}$$

Finalement les vecteurs unitaires du système $(\mathcal{S}')$ sont obtenus après la rotation de l'angle γ_3 autour de l'axe $\mathbf{e}_{z_2}$:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_3 & \sin\gamma_3 & 0 \\ -\sin\gamma_3 & \cos\gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{x_2} \\ \mathbf{e}_{y_2} \\ \mathbf{e}_{z_2} \end{pmatrix} \tag{1-6}$$

soit :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_3 & \sin\gamma_3 & 0 \\ -\sin\gamma_3 & \cos\gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma_2 & 0 & -\sin\gamma_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\gamma_2 & 0 & \cos\gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma_1 & \sin\gamma_1 & 0 \\ -\sin\gamma_1 & \cos\gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \tag{1-7}$$

Nous pouvons en déduire la loi de transformation des coordonnées. L'égalité :

$$\mathbf{r} \;=\; x\,\mathbf{e}_x \;+\; y\,\mathbf{e}_y \;+\; z\,\mathbf{e}_z = \; x'\,\mathbf{e}'_{x'} \;+\; y'\,\mathbf{e}'_{y'} \;+\; z'\,\mathbf{e}'_{z'}$$

s'écrit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} x \; y \; z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \\ \mathbf{e}_y \\ \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} x' \; y' \; z' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix}$$

ou encore, en posant $\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}} \;\equiv\; \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}\,(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)$:

$$\begin{pmatrix} x \; y \; z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} x' \; y' \; z' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & & \\ & \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}} & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}$$

soit :

$$\begin{pmatrix} x \; y \; z \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} x' \; y' \; z' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}} \end{pmatrix}.$$

En multipliant à droite l'égalité ci-dessus par la matrice inverse ${\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}}^{-1}$, on obtient :

$$\begin{pmatrix} x' \; y' \; z' \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} x \; y \; z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \\ {\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}}^{-1} \\ \\ \end{pmatrix}.$$

En prenant la transposée de la relation précédente on a :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} \\ \widetilde{{\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}}^{-1}} \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

La matrice $\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}\,(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)$, produit de trois matrices orthogonales, est une matrice orthogonale : son inverse est égale à sa transposée. On déduit :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} \\ \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}\,(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1) \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

On voit que les coordonnées d'un même point dans les deux référentiels $(\mathcal{S})$ et $(\mathcal{S}')$ se transforment comme les vecteurs unitaires.

Si on définit

$$\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\,(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1) \;\equiv\; \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}\,(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)$$

on a les relations importantes :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;13} \\ \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;23} \\ \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \\ \mathbf{e}_y \\ \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}8)$$

et

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{1-9a}$$

et d'une manière équivalente :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_3 & \sin\gamma_3 & 0 \\ -\sin\gamma_3 & \cos\gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma_2 & 0 & -\sin\gamma_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\gamma_2 & 0 & \cos\gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma_1 & \sin\gamma_1 & 0 \\ -\sin\gamma_1 & \cos\gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \tag{1-9b}$$

Les éléments de la matrice de rotation peuvent être calculés explicitement. On trouve :

$$\begin{pmatrix} \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \cos\gamma_3\cos\gamma_2\cos\gamma_1-\sin\gamma_3\sin\gamma_1 & \cos\gamma_3\cos\gamma_2\sin\gamma_1+\sin\gamma_3\cos\gamma_1 & -\cos\gamma_3\sin\gamma_2 \\ -\sin\gamma_3\cos\gamma_2\cos\gamma_1-\cos\gamma_3\sin\gamma_1 & -\sin\gamma_3\cos\gamma_2\sin\gamma_1+\cos\gamma_3\cos\gamma_1 & \sin\gamma_3\sin\gamma_2 \\ \sin\gamma_2\cos\gamma_1 & \sin\gamma_2\sin\gamma_1 & \cos\gamma_2 \end{pmatrix} \tag{1-10}$$

ou encore :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} &= \cos\gamma_3\cos\gamma_2\cos\gamma_1 - \sin\gamma_3\sin\gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} &= -\sin\gamma_3\cos\gamma_2\cos\gamma_1 - \cos\gamma_3\sin\gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} &= \sin\gamma_2\cos\gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} &= \cos\gamma_3\cos\gamma_2\sin\gamma_1 + \sin\gamma_3\cos\gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} &= -\sin\gamma_3\cos\gamma_2\sin\gamma_1 + \cos\gamma_3\cos\gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} &= \sin\gamma_2\sin\gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13} &= -\cos\gamma_3\sin\gamma_2, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23} &= \sin\gamma_3\sin\gamma_2, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} &= \cos\gamma_2. \end{aligned} \tag{1-11}$$

La relation (1-9a) s'inverse pour donner :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}. \tag{1-9c}$$

Les formules précédentes qui définissent le passage de (x, y, z) à (x', y', z') et réciproquement correspondent à un jeu d'angles d'Euler qui n'est pas unique. D'autres ensembles pourront donner des rotations physiquement équivalentes. Si on fait le changement $\gamma_i \to \gamma_i + 2\pi\, n_i$ dans les formules (1-11) où n_i représente un entier quelconque positif ou négatif, les éléments de matrice $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ ij}$ restent inchangés. On peut aussi chercher les valeurs de ${\gamma_1}'$ et ${\gamma_3}'$ telles que pour tout indice i et j on ait

$$\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ ij}({\gamma_3}', {\gamma_2}' = -\gamma_2, {\gamma_1}') \;=\; \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ ij}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1).$$

D'après (1-11), pour $i = 1$ ou 3, on devra avoir :

$$\begin{aligned} \cos {\gamma_i}' &= -\cos \gamma_i \\ \sin {\gamma_i}' &= -\sin \gamma_i \end{aligned}$$

dont la solution est donnée par

$${\gamma_i}' = \pm\pi + \gamma_i + 2\pi\, n_i.$$

Nous verrons dans le complément C de ce chapitre les relations entre ${\gamma_1}'$ et γ_1 d'une part et entre ${\gamma_3}'$ et γ_3 qui sont les mieux appropriées aux opérateurs lorsque ${\gamma_2}' = -\gamma_2$.

1.2. Transformation géométrique définie par un vecteur unitaire et un angle

Le passage du système $(\mathcal{S})$ au système $(\mathcal{S}')$ peut aussi être défini par un vecteur unitaire $\mathbf{u}$ autour duquel s'effectue la rotation et par un angle γ.

Considérons le trièdre direct défini par les trois vecteurs unitaires $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$, $\mathbf{v}_3$ tels que :

$$\mathbf{v}_3 \;=\; \mathbf{u} \quad ; \quad \mathbf{v}_3 \;=\; \mathbf{v}_1 \wedge \mathbf{v}_2 \quad ; \quad \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \;=\; 0.$$

La correspondance entre les deux trièdres s'écrit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_3 \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}$$

avec

$$a_1^2+b_1^2+c_1^2 = 1, \qquad a_2^2+b_2^2+c_2^2 = 1, \qquad a_3^2+b_3^2+c_3^2 = 1, \qquad a_1a_2+b_1b_2+c_1c_2 = 0,$$

$$a_3 = b_1c_2 - c_1b_2, \qquad b_3 = c_1a_2 - a_1c_2, \qquad c_3 = a_1b_2 - b_1a_2.$$

La relation matricielle s'inverse pour donner :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_3 \end{pmatrix}.$$

Les vecteurs $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$ et $\mathbf{e}_z$ étant unitaires et orthogonaux, on a les relations suivantes :

$$a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 = 0, \qquad a_1c_1 + a_2c_2 + a_3c_3 = 0, \qquad b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3 = 0,$$

et

$$a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = 1, \qquad b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 = 1, \qquad c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 = 1.$$

Après la rotation de l'angle γ autour de l'axe $\mathbf{v}_3 = \mathbf{u}$, les vecteurs $\mathbf{v}_1$ et $\mathbf{v}_2$ seront transformés en $\mathbf{v}'_1$ et $\mathbf{v}'_2$:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}'_1 \\ \mathbf{v}'_2 \\ \mathbf{v}'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ -\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_3 \end{pmatrix}.$$

Il est clair que l'expression des vecteurs $\mathbf{e}'_{x'}, \mathbf{e}'_{y'}, \mathbf{e}'_{z'}$ en fonction de $\mathbf{v}'_1$, $\mathbf{v}'_2$ et $\mathbf{v}'_3$ sera la même que celle de $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ en fonction de $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$ et $\mathbf{v}_3$:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}'_1 \\ \mathbf{v}'_2 \\ \mathbf{v}'_3 \end{pmatrix}$$

soit :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ -\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}.$$

Tenant compte des relations d'orthogonalité, on trouve :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_3^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma & a_3b_3(1-\cos\gamma)+c_3\sin\gamma & a_3c_3(1-\cos\gamma)-b_3\sin\gamma \\ a_3b_3(1-\cos\gamma)-c_3\sin\gamma & b_3^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma & b_3c_3(1-\cos\gamma)+a_3\sin\gamma \\ a_3c_3(1-\cos\gamma)+b_3\sin\gamma & b_3c_3(1-\cos\gamma)-a_3\sin\gamma & c_3^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}.$$

Si on exprime les cosinus directeurs du vecteur $\mathbf{u} = \mathbf{v}_3$ en fonction des angles polaire ϑ et azimutal φ, on a :

$$\begin{aligned} a_3 &= u_x = \sin\vartheta\cos\varphi \\ b_3 &= u_y = \sin\vartheta\sin\varphi \\ c_3 &= u_z = \cos\vartheta. \end{aligned} \tag{1-12}$$

On pose :

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} &= u_x^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma,\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} &= u_x u_y(1-\cos\gamma)-u_z\sin\gamma,\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} &= u_x u_z(1-\cos\gamma)+u_y\sin\gamma,\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} &= u_x u_y(1-\cos\gamma)+u_z\sin\gamma,\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} &= u_y^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma,\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} &= u_y u_z(1-\cos\gamma)-u_x\sin\gamma,\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13} &= u_x u_z(1-\cos\gamma)-u_y\sin\gamma,\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23} &= u_y u_z(1-\cos\gamma)+u_x\sin\gamma,\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} &= u_z^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma.
\end{aligned} \tag{1-13}$$

Alors :

$$\begin{pmatrix}\mathbf{e}'_{x'}\\ \mathbf{e}'_{y'}\\ \mathbf{e}'_{z'}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13}\\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23}\\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{e}_x\\ \mathbf{e}_y\\ \mathbf{e}_z\end{pmatrix}$$

d'où :

$$\begin{pmatrix}x'\\ y'\\ z'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13}\\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23}\\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}. \tag{1-14}$$

Cette relation s'inverse pour donner :

$$\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31}\\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32}\\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x'\\ y'\\ z'\end{pmatrix}. \tag{1-15}$$

Remarque. Si on remplace respectivement x, y et z par u_x, u_y, u_z dans la relation (1-14), on trouve :

$$u'_{x'} = u_x \quad ; \quad u'_{y'} = u_y \quad ; \quad u'_{z'} = u_z. \tag{1-16}$$

2. Transformation d'un champ scalaire

2.1. Définition

Soit $f(x, y, z)$ la valeur numérique d'une fonction en un point M déterminé par ses coordonnées dans le repère $(\mathcal{S})$. On sait comment se transforme la fonction f

dans une rotation quelconque : si x', y' et z' sont les coordonnées du même point M dans le repère $(\mathcal{S}')$, il suffit de remplacer les *anciennes* coordonnées en fonction des nouvelles dans l'expression de $f(x, y, z)$:

$$f(x, y, z) = f(x(x', y', z'), y(x', y', z'), z(x', y', z')) = g(x', y', z').$$

Cette définition s'interprète bien en terme de mécanique quantique. Supposons qu'une particule sans spin soit dans un état physique bien déterminé. Cet état est décrit dans le repère $(\mathcal{S})$ par un ket $\mid \Phi \rangle$. L'amplitude de probabilité de trouver la particule au point M de coordonnées x, y et z dans le repère $(\mathcal{S})$ est égale à la valeur $\Phi(x, y, z) = \langle x,\, y,\, z \mid \Phi \rangle$. Dans le repère $(\mathcal{S}')$, le même état physique est représenté par un nouveau ket $\mid \Phi' \rangle$. L'amplitude de probabilité de trouver la particule en M est alors égale à $\Phi'(x', y', z') = \langle x',\, y',\, z' \mid \Phi' \rangle$. Or cette amplitude dépend du système physique, c'est-à-dire du point M mais pas du repère. On aura donc :

$$\begin{aligned}\langle x',\, y',\, z' \mid \Phi' \rangle &= \Phi'(x', y', z') \\ &= \Phi(x, y, z) \\ &= \langle x,\, y,\, z \mid \Phi \rangle.\end{aligned}$$

À la rotation géométrique passive $\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}$ correspond un opérateur quantique $\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}$ agissant dans l'espace $\mathcal{E}^{\mathbf{r}}$. Par définition, on aura les relations suivantes :

$$\mid \Phi \rangle \;\rightarrow\; \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid \Phi \rangle = \mid \Phi' \rangle \equiv \mid \Phi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle \tag{1-17}$$

avec

$$\Phi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x', y', z') \;=\; \Phi(x, y, z) \tag{1-18}$$

et

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \tag{1-9a}$$

Exemple. Supposons que la particule soit dans un état physique décrit dans le repère $(\mathcal{S})$ par le ket $\mid \Phi \rangle$ tel que $\Phi(x, y, z) = \mathrm{e}^{-a(x^2+y^2+z^2+2xy)}$. Dans le repère $(\mathcal{S}')$ obtenu dans une rotation d'un angle β autour de l'axe Oy, on a :

$$\begin{aligned}x &= \cos\beta x' + \sin\beta z' \\ y &= y' \\ z &= -\sin\beta x' + \cos\beta z'\end{aligned}$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned}\Phi(x, y, z) &= \mathrm{e}^{-a(x^2+y^2+z^2+2xy)} \\ \Phi(x, y, z) &= \mathrm{e}^{-a(x'^2+y'^2+z'^2+2x'y'\cos\beta+2y'z'\sin\beta)} \;=\; \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x', y', z').\end{aligned}$$

Le membre de droite qui a la même valeur numérique que le membre de gauche donne la forme analytique dans le nouveau repère.

2.2. Propriétés générales de l'opérateur de rotation

$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}$ est un opérateur unitaire :

$$\int \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\,*}(x',y',z')\,\Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z')\,\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y'\,\mathrm{d}z' \;=\; \int \Psi^*(x,y,z)\,\Psi(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$$

relation qui s'écrit encore :

$$\langle \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle \;=\; \langle \Psi \mid \Psi \rangle \;=\; \langle \Psi \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\,\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid \Psi \rangle$$

soit :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\,\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \;=\; 1. \tag{1-19a}$$

On admettra pour l'instant que l'on a également :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\,\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger} \;=\; 1. \tag{1-19b}$$

L'unitarité de l'opérateur de rotation quantique entraîne la conservation du produit scalaire :

$$\langle \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \mid \Phi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle \;=\; \langle \Psi \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\,\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid \Phi \rangle \;=\; \langle \Psi \mid \Phi \rangle\cdot \tag{1-20a}$$

D'après la définition du ket transformé, nous avons :

$$\langle x',\,y',\,z' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle \;=\; \langle x',y',z' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid \Psi \rangle \;=\; \langle x,\,y,\,z \mid \Psi \rangle$$

d'où :

$$\langle x',y',z' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \;=\; \langle x,y,z \mid$$

soit

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid \mathbf{r} \rangle = \mid \mathbf{r}' \rangle\cdot \tag{1-20b}$$

Il y a de plus un homomorphisme entre les rotations classiques et quantiques. On a en effet :

$$\begin{aligned} \hat{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}} \mid \mathbf{r} \rangle &= \mid \mathcal{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \rangle \\ \hat{R}_{\mathrm{p}_2}^{\mathbf{r}}\,\hat{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}} \mid \mathbf{r} \rangle &= \hat{R}_{\mathrm{p}_2}^{\mathbf{r}} \mid \mathcal{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \rangle = \mid (\mathcal{R}_{\mathrm{p}_2}^{\mathbf{r}}\mathcal{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}})(\mathbf{r}) \rangle \end{aligned}$$

Soit $\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}$ l'opérateur associé à la transformation géométrique $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}{}_{\mathrm{p}_2\mathrm{p}_1} \equiv (\mathcal{R}_{\mathrm{p}_2}^{\mathbf{r}}\mathcal{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}})$, par définition, on a :

$$\langle (\mathcal{R}_{\mathrm{p}_2}^{\mathbf{r}}\mathcal{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}})(\mathbf{r}) \mid \Phi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle \;=\; \langle (\mathcal{R}_{\mathrm{p}_2}^{\mathbf{r}}\mathcal{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}})(\mathbf{r}) \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid \Phi \rangle = \langle \mathbf{r} \mid \Phi \rangle$$

cette relation étant vérifiée quel que soit le ket $\mid \Phi \rangle$, on a :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger} \mid \mathcal{R}^{\mathbf{r}}{}_{\mathrm{p}_2\mathrm{p}_1}(\mathbf{r}) \rangle \;=\; \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger} \mid (\mathcal{R}_{\mathrm{p}_2}^{\mathbf{r}}\mathcal{R}_{\mathrm{p}_1}^{\mathbf{r}})(\mathbf{r}) \rangle = \mid \mathbf{r} \rangle$$

ce qui donne finalement

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\,(\hat{R}_{\mathrm{p}2}^{\mathbf{r}}\,\hat{R}_{\mathrm{p}1}^{\mathbf{r}}) \;=\; 1.$$

L'inverse d'un opérateur étant unique, on a :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \;=\; \hat{R}_{\mathrm{p}2}^{\mathbf{r}}\,\hat{R}_{\mathrm{p}1}^{\mathbf{r}}. \tag{1-21}$$

L'opérateur $\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}$ associé à la rotation $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}{}_{\mathrm{p_2p_1}}$ est donc égal au produit de $\hat{R}_{\mathrm{p}2}^{\mathbf{r}}$ par $\hat{R}_{\mathrm{p}1}^{\mathbf{r}}$.

2.3. Forme explicite de l'opérateur de rotation

Opérateur défini en fonction d'un vecteur unitaire et d'un angle

Dans une rotation infinitésimale, la loi de transformation des coordonnées s'écrit :

$$\begin{aligned} x &= x' + \gamma(u_y z' - u_z y'),\\ y &= y' + \gamma(u_z x' - u_x z'),\\ z &= z' + \gamma(u_x y' - u_y x'). \end{aligned}$$

On a alors, par définition :

$$\begin{aligned} \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z') = \Psi(x,y,z) &= \Psi(x'+\Delta x', y'+\Delta y', z'+\Delta z')\\ &= \Psi(x',y',z') + \Delta \end{aligned}$$

avec

$$\Delta = \gamma\left((u_y z' - u_z y')\frac{\partial\Psi}{\partial x'}(x',y',z') + (u_z x' - u_x z')\frac{\partial\Psi}{\partial y'}(x',y',z') \right.$$
$$\left. + (u_x y' - u_y x')\frac{\partial\Psi}{\partial z'}(x',y',z') \right)$$

ou encore

$$\begin{aligned} \Delta = \gamma\,\Bigg(u_x &\left[y'\frac{\partial\Psi}{\partial z'}(x',y',z') - z'\frac{\partial\Psi}{\partial y'}(x',y',z') \right]\\ + u_y &\left[z'\frac{\partial\Psi}{\partial x'}(x',y',z') - x'\frac{\partial\Psi}{\partial z'}(x',y',z') \right]\\ + u_z &\left[x'\frac{\partial\Psi}{\partial y'}(x',y',z') - y'\frac{\partial\Psi}{\partial x'}(x',y',z') \right] \Bigg). \end{aligned}$$

Cette égalité devient :

$$\Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z') \;=\; (1 + \frac{i}{\hbar}\gamma\;\mathbf{u}\cdot\mathbf{L}')\Psi(x',y',z'),$$

$\mathbf{L}$ étant l'opérateur moment cinétique orbital. L'indice supérieur " $'$ " qui intervient dans l'écriture de l'opérateur moment cinétique orbital $\mathbf{L}$ correspond au même indice supérieur des variables x', y' et z' :

$$\begin{aligned} L_{x'} &\equiv \frac{\hbar}{i}\left(y'\frac{\partial}{\partial z'} - z'\frac{\partial}{\partial y'}\right), \\ L_{y'} &\equiv \frac{\hbar}{i}\left(z'\frac{\partial}{\partial x'} - x'\frac{\partial}{\partial z'}\right), \\ L_{z'} &\equiv \frac{\hbar}{i}\left(x'\frac{\partial}{\partial y'} - y'\frac{\partial}{\partial x'}\right). \end{aligned}$$

La loi de transformation s'écrit alors :

$$\Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(x,y,z) = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\gamma\ \mathbf{u}\cdot\mathbf{L}\right)\Psi(x,y,z). \tag{1-23}$$

Cette égalité étant vérifiée en tout point, on a :

$$\hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\ |\ \Psi\,\rangle = |\ \Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}\,\rangle = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\gamma\,\mathbf{u}\cdot\mathbf{L}\right)|\ \Psi\,\rangle$$

d'où :

$$\hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\gamma\ \mathbf{u}\cdot\mathbf{L} \qquad .$$

Les rotations autour d'un même axe commutant, on peut intégrer l'équation :

$$R(\gamma + \mathrm{d}\gamma) = R(\mathrm{d}\gamma)\,R(\gamma) = R(\gamma) + \mathrm{d}R = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\ \mathbf{u}\cdot\mathbf{L}\right)R(\gamma)$$

dont la solution est :

$$\hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma\mathbf{u}\cdot\mathbf{L}} \qquad . \tag{1-24}$$

Opérateur défini en fonction des angles d'Euler

Nous allons supposer que les trois angles d'Euler γ_1, γ_2 et γ_3 sont suffisamment petits pour pouvoir faire un développement limité. Les relations $\sin\gamma \simeq \gamma$ et $\cos\gamma \simeq 1 - \gamma^2/2$ donnent au second ordre :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} &= 1 - {\gamma_1}^2/2 - {\gamma_2}^2/2 - {\gamma_3}^2/2 - \gamma_3\gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} &= -\gamma_3 - \gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} &= \gamma_2, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} &= \gamma_1 + \gamma_3, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} &= -\gamma_3\gamma_1 + 1 - {\gamma_1}^2/2 - {\gamma_3}^2/2, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} &= \gamma_2\gamma_1, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13} &= -\gamma_2, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23} &= \gamma_3\gamma_2, \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} &= 1 - {\gamma_2}^2/2. \end{aligned}$$

Comme dans le cas précédent, d'après (1-9c) qui exprime les anciennes coordonnées x, y, z en fonction des nouvelles x', y', z', on obtient :

$$\Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z') \;=\; \Psi(x,y,z) \;=\; \Psi(x'+\Delta x', y'+\Delta y', z'+\Delta z')$$

avec

$$\begin{aligned}
\Delta x' &= \gamma_2\, z' - (\gamma_3+\gamma_1)\, y' - ({\gamma_1}^2/\,2 - {\gamma_2}^2/\,2 - {\gamma_3}^2/\,2 + \gamma_3\gamma_1)\, x',\\
\Delta y' &= (\gamma_3+\gamma_1)x' + \gamma_2\gamma_1)\, z' - (\gamma_3\gamma_1 + {\gamma_3}^2/\,2 - {\gamma_1}^2/\,2)\, y',\\
\Delta z' &= \gamma_3\gamma_1\, y' - \gamma_2\, x' - {\gamma_2}^2/\,2\, z'.
\end{aligned}$$

Un développement en série de Taylor au *second* ordre s'écrit :

$$\begin{aligned}
\Psi(x'+\Delta x', y'+\Delta y', z'+\Delta z') &= \Psi(x',y',z')\\
&\quad + \Delta x'\,\frac{\partial\Psi}{\partial x'} + \Delta y'\,\frac{\partial\Psi}{\partial y'} + \Delta z'\,\frac{\partial\Psi}{\partial z'} + \Delta(2^{nd})
\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
\Delta(2^{nd}) = \frac{1}{2}\Big[&{\Delta x'}^2\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial x'^2} + {\Delta y'}^2\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial y'^2} + {\Delta z'}^2\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial z'^2}\\
&+ 2\Delta x'\Delta y'\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial y'\partial x'} + 2\Delta x'\Delta z'\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial z'\partial x'} + 2\Delta y'\Delta z'\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial z'\partial y'}\Big]\,.
\end{aligned}$$

En ordonnant suivant les puissances de γ, on trouve

$$\begin{aligned}
\Psi(x'+\Delta x', y'+\Delta y', z'+\Delta z') &= \Psi(x',y',z') + \gamma_1\,\left(x'\frac{\partial}{\partial y'} - y'\frac{\partial}{\partial x'}\right)\Psi(x',y',z')\\
&+ \gamma_2\,\left(z'\frac{\partial}{\partial x'} - x'\frac{\partial}{\partial z'}\right)\Psi(x',y',z') + \gamma_3\,\left(x'\frac{\partial}{\partial y'} - y'\frac{\partial}{\partial x'}\right)\Psi(x',y',z')\\
&+ \gamma_2\gamma_1\, t_{21} + \gamma_3\gamma_1\, t_{31} + \gamma_3\gamma_2\, t_{32} + {\gamma_1}^2\, t_{11} + {\gamma_2}^2\, t_{22} + {\gamma_3}^2\, t_{33}
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
t_{21} &= \left[z'\tfrac{\partial}{\partial y'} - y'z'\tfrac{\partial^2}{\partial x'^2} + x'z'\tfrac{\partial^2}{\partial y'\partial x'} + x'y'\tfrac{\partial^2}{\partial z'\partial x'} - x'^2\tfrac{\partial^2}{\partial z'\partial y'}\right]\Psi(x',y',z'),\\
t_{31} &= \left[-x'\tfrac{\partial}{\partial x'} - y'\tfrac{\partial}{\partial y'} + y'^2\tfrac{\partial^2}{\partial x'^2} + x'^2\tfrac{\partial^2}{\partial y'^2} - 2x'y'\tfrac{\partial^2}{\partial y'\partial x'}\right]\Psi(x',y',z'),\\
t_{32} &= \left[y'\tfrac{\partial}{\partial z'} - y'z'\tfrac{\partial^2}{\partial x'^2} + x'z'\tfrac{\partial^2}{\partial y'\partial x'} + x'y'\tfrac{\partial^2}{\partial z'\partial x'} - x'^2\tfrac{\partial^2}{\partial z'\partial y'}\right]\Psi(x',y',z'),\\
t_{11} &= \tfrac{1}{2}\left[-x'\tfrac{\partial}{\partial x'} + y'^2\tfrac{\partial^2}{\partial x'^2} + x'^2\tfrac{\partial^2}{\partial y'^2} - 2x'y'\tfrac{\partial^2}{\partial y'\partial x'} - y'\tfrac{\partial}{\partial y'}\right]\Psi(x',y',z'),\\
t_{22} &= \tfrac{1}{2}\left[-x'\tfrac{\partial}{\partial x'} + z'^2\tfrac{\partial^2}{\partial x'^2} + x'^2\tfrac{\partial^2}{\partial z'^2} - 2x'z'\tfrac{\partial^2}{\partial z'\partial x'} - z'\tfrac{\partial}{\partial z'}\right]\Psi(x',y',z'),\\
t_{33} &= \tfrac{1}{2}\left[-x'\tfrac{\partial}{\partial x'} + y'^2\tfrac{\partial^2}{\partial x'^2} + x'^2\tfrac{\partial^2}{\partial y'^2} - 2x'y'\tfrac{\partial^2}{\partial y'\partial x'} - y'\tfrac{\partial}{\partial y'}\right]\Psi(x',y',z').
\end{aligned}$$

Les différents termes t_{ij} peuvent s'écrire sous la forme d'un produit de deux composantes de l'opérateur moment angulaire orbital. En réarrangeant l'ordre de ces termes, l'égalité entre la fonction originale et sa transformée s'écrit :

$$\begin{aligned}\Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(x',y',z') = \Psi(x',y',z') &+ \frac{i}{\hbar}(\gamma_1 L_{z'} + \gamma_2 L_{y'} + \gamma_3 L_{z'})\Psi(x',y',z') \\ &- \frac{1}{\hbar^2}(\gamma_2\gamma_1 L_{y'}L_{z'} + \gamma_3\gamma_1 {L_{z'}}^2 + \gamma_3\gamma_2 L_{z'}L_{y'})\Psi(x',y',z') \\ &- \frac{1}{2\hbar^2}({\gamma_1}^2 {L_{z'}}^2 + {\gamma_2}^2 {L_{y'}}^2 + {\gamma_3}^2 {L_{z'}}^2)\Psi(x',y',z')\end{aligned}$$

soit encore :

$$\Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(x',y',z') = \hat{O}(\gamma_3,\,\gamma_2,\,\gamma_1)\,\Psi(x',y',z')$$

avec

$$\begin{aligned}\hat{O}(\gamma_3,\,\gamma_2,\,\gamma_1) &= \left(1 + \frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_{z'} - \frac{1}{2\hbar^2}{\gamma_3}^2 {L_{z'}}^2\right) \\ &\times \left(1 + \frac{i}{\hbar}\gamma_2 L_{y'} - \frac{1}{2\hbar^2}{\gamma_2}^2 {L_{y'}}^2\right)\left(1 + \frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_{z'} - \frac{1}{2\hbar^2}{\gamma_1}^2 {L_{z'}}^2\right).\end{aligned}$$

Cet opérateur est égal au produit des développements limités jusqu'au second ordre de 3 opérateurs de forme exponentielle. Nous admettrons que pour des rotations finies, on a :

$$\Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(x',y',z') = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_{z'}}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 L_{y'}}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_{z'}}\Psi(x',y',z').$$

L'opérateur de rotation en fonction des angles d'Euler est donc :

$$\hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_z}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 L_y}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_z} \quad . \tag{1-25}$$

Cet opérateur est bien unitaire et l'ordre des angles γ dans l'expression ci-dessus montre l'homomorphisme qui existe entre les rotations classiques et quantiques. Le développement limité au second ordre est essentiel pour éviter des erreurs dans la détermination de l'opérateur de rotation. En effet, le développement au premier ordre ne fait intervenir que la somme des composantes de l'opérateur moment cinétique orbital. Par contre, au second ordre, il apparait une somme de *produits* de deux composantes : en particulier, on peut noter que les produits $L_{y'}L_{z'}$ et $L_{z'}L_{y'}$ qui sont *différents* sont multipliés respectivement par $\gamma_2\gamma_1$ et par $\gamma_3\gamma_2$, ce qui fixe sans ambiguité possible la position de γ_1 et γ_3 dans (1-25).

2.4. Matrices de rotation

Propriétés des états propres de L^2 et de L_z

Dans de nombreux problèmes de physique il est plus avantageux de travailler en coordonnées sphériques. Un point quelconque de l'espace est alors déterminé par l'ensemble (r,ϑ,φ). L'état du système physique dans le repère $(\mathcal{S})$ est donné par $\Psi(r,\vartheta,\varphi)$ que l'on peut écrire :

$$\Psi(r,\vartheta,\varphi) = \mathcal{R}(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi). \tag{1-26}$$

Dans le nouveau repère $(\mathcal{S}')$ la forme analytique de la partie radiale reste inchangée puisque $r' = r$. Toutes les propriétés de transformation seront localisées dans la partie angulaire exprimée par les harmoniques sphériques. Soient $\mid l\, m\rangle$ les vecteurs propres des opérateurs $\mathbf{L}^2$ et L_z avec les valeurs propres respectives $\hbar^2 l(l+1)$ et $\hbar\, m$. On a :

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) \;=\; \langle\, \vartheta, \varphi \mid l\, m\,\rangle. \tag{1-27}$$

L'opérateur de rotation, défini soit en fonction de la direction $\mathbf{u}$ de l'axe de rotation et de l'angle γ soit en fonction des angles d'Euler, commute avec $\mathbf{L}^2$ mais non avec L_z. En conséquence, si le ket $\mid l\, m\,\rangle$ décrit la partie angulaire du système physique dans $(\mathcal{S})$, la relation de fermeture

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m'=-l}^{l} \mid l\, m'\,\rangle\langle\, l\, m' \mid = 1 \tag{1-28}$$

permet d'obtenir dans $(\mathcal{S}')$:

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid l\, m\,\rangle \;=\mid [\,l\, m\,]^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}\,\rangle \;=\; \sum_{m'=-l}^{l} \langle\, l\, m' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid l\, m\,\rangle \;\mid l\, m'\,\rangle. \tag{1-29a}$$

On définit alors :

$$\langle\, l\, m' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid l\, m\,\rangle \;=\; \mathcal{M}^{(l)}_{m'\,m}(P) \tag{1-30}$$

et la relation précédente s'écrit :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid l\, m\,\rangle \;=\; \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{M}^{(l)}_{m'\,m}(P) \;\mid l\, m'\,\rangle. \tag{1-29b}$$

Il faut remarquer que la sommation a lieu sur les *lignes* et non sur les colonnes comme dans le produit habituel de deux matrices.

Dans les cas où la rotation est caractérisée par les angles d'Euler, Wigner a défini la matrice de rotation $\mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)$ par (voir la relation (1-C38)) :

$$\mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \;=\; \langle l\, m' \mid \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_z}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 L_y}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_z} \;\mid l\, m\,\rangle. \tag{1-31}$$

On peut alors en déduire la loi de transformation des harmoniques sphériques :

$$\begin{aligned}
\langle \vartheta', \varphi' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid l\, m\,\rangle &= \langle \vartheta', \varphi' \mid [l\, m]^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}\,\rangle = [Y_l^m]^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(\vartheta', \varphi') \\
&= \langle\, \vartheta, \varphi \mid l\, m\,\rangle = Y_l^m(\vartheta, \varphi) \\
&= \langle \vartheta', \varphi' \mid \textstyle\sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \mid l\, m'\,\rangle \\
&= \textstyle\sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\langle \vartheta', \varphi' \mid l\, m'\,\rangle \\
&= \textstyle\sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) Y_l^{m'}(\vartheta', \varphi')
\end{aligned}$$

d'où le résultat :

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) \;=\; \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\; Y_l^{m'}(\vartheta', \varphi'). \tag{1-32a}$$

Cette relation indique que la valeur d'une harmonique sphérique dans *l'ancien système* est une combinaison linéaire des harmoniques sphériques de même l dans le nouveau repère. Les coefficients de cette combinaison linéaire sont donnés par la matrice de Wigner associée à l'opérateur de rotation.

Cette relation s'inverse pour donner :

$$Y_l^{m'}(\vartheta', \varphi') = \sum_{m=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)\,*}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,; \gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi). \tag{1-32b}$$

L'égalité ci-dessus signifie que la valeur d'une harmonique sphérique dans le nouveau repère est une combinaison linéaire des harmoniques sphériques de même l dans l'ancien repère. Les coefficients de ce développement sont donnés par les éléments de matrice de la rotation *inverse*.

D'une manière générale, on a les relations suivantes :

$$\Psi_{l\,m}(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,; \gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)\, \Psi_{l\,m'}(r, \vartheta', \varphi') \tag{1-33a}$$

et

$$\Psi_{l\,m'}(r, \vartheta', \varphi') = \sum_{m=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)\,*}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,; \gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)\, \Psi_{l\,m}(r, \vartheta, \varphi). \tag{1-33b}$$

Relations entre les harmoniques sphériques et les matrices de Wigner

(α) Soit M le point de coordonnées $x = r \sin\vartheta \cos\varphi$, $y = r \sin\vartheta \sin\varphi$, $z = r \cos\vartheta$ dans le repère $(\mathcal{S})$. Si on passe au système $(\mathcal{S}')$ par :

– une rotation de $\gamma_1 = \varphi$ autour de Oz,

– une rotation de $\gamma_2 = \vartheta$ autour de Oy_1,

– une rotation de γ_3 quelconque autour de Oz_2,

le point M aura comme coordonnées $x' = 0$, $y' = 0$, $z' = r$. La loi de transformation des harmoniques sphériques donne :

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,; \gamma_3, \gamma_2 = \vartheta, \gamma_1 = \varphi)\, Y_l^{m'}(\vartheta' = 0, \varphi')$$

mais :

$$Y_l^{m'}(\vartheta' = 0, \varphi') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, \delta_{m'\,0} \tag{1-34}$$

d'où :

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, \mathcal{D}^{(l)}_{0\,m}(\mathrm{P}\,; \gamma_3, \gamma_2 = \vartheta, \gamma_1 = \varphi). \tag{1-35a}$$

En utilisant la définition de l'élément de matrice de rotation réduit

$$d^{(l)}_{m'\,m}(P;\vartheta) \;=\; \langle\, l\, m' \mid \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vartheta L_y} \mid l\, m\,\rangle \qquad \text{(1C-39b)}$$

on a :

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) \;=\; \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, d^{(l)}_{0\,m}(P;\vartheta)\, \mathrm{e}^{i\,m\varphi}. \qquad \text{(1-35b)}$$

(β) Soit M le point de coordonnées $x = 0,\ y = 0,\ z = r$ dans le repère ($\mathcal{S}$) et soit le repère ($\mathcal{S}'$) obtenu en faisant successivement :

- une rotation de γ_1 quelconque autour de Oz,
- une rotation de $\gamma_2 = \vartheta'$ autour de Oy_1,
- une rotation de $\gamma_3 = \varphi'$ autour de Oz_2.

D'après la loi de transformation des coordonnées :

$$\begin{aligned} x' &= -r\cos\varphi'\sin\vartheta' \;=\; r\cos(\pi-\varphi')\sin\vartheta' \\ y' &= r\sin\varphi'\sin\vartheta' \;=\; r\sin(\pi-\varphi')\sin\vartheta' \\ z' &= r\cos\vartheta' \end{aligned}$$

d'où :

$$Y_l^{m'}(\vartheta',\pi-\varphi') \;=\; \sum_{m=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}{}^{*}(\mathrm{P}\,;\gamma_3=\varphi,\gamma_2=\vartheta,\gamma_1)\; Y_l^{m'}(\vartheta=0,\varphi).$$

D'autre part,

$$Y_l^{m'}(\vartheta',\pi-\varphi') \;=\; (-1)^{m'}\, Y_l^{m'\,*}(\vartheta',\varphi') \qquad \text{(1-36)}$$

ce qui entraîne :

$$Y_l^{m'}(\vartheta',\varphi') \;=\; (-1)^{m'}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\mathcal{D}^{(l)}_{m'\,0}(\mathrm{P}\,;\gamma_3=\varphi',\gamma_2=\vartheta',\gamma_1) \qquad \text{(1-37a)}$$

et

$$Y_l^{m'}(\vartheta',\varphi') \;=\; (-1)^{m'}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, d^{(l)}_{m'\,0}(P;\vartheta')\,\mathrm{e}^{i\,m'\varphi'}. \qquad \text{(1-37b)}$$

3. Transformation des observables dans $\mathcal{E}^{\mathrm{r}}$

3.1. Définition et propriétés

Pour commencer, considérons un opérateur local quelconque $\hat{O}$. Si $\Psi(\mathbf{r})$ est la fonction d'onde d'un champ scalaire, l'action de l'opérateur $\hat{O}$ sur le ket $\mid \Psi\,\rangle$ donne un nouveau ket $\mid \Phi\,\rangle = \hat{O} \mid \Psi\,\rangle$ tel que $\hat{O}(\mathbf{r})\,\Psi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r})$.

Nous avons vu que pour trouver la transformée d'une fonction quelconque dans une rotation, il suffit de remplacer les anciennes coordonnées en fonction des nouvelles :

$$\begin{aligned}\hat{O}(\mathbf{r})\,\Psi(\mathbf{r}) &= \Phi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}(\mathbf{r}')) = \Phi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}') \\ &= \hat{O}(\mathbf{r}(\mathbf{r}'))\Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}').\end{aligned}$$

Si on définit :

$$\hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}') = \hat{O}(\mathbf{r}(\mathbf{r}')) \tag{1-38}$$

on a alors :

$$\hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}')\,\Phi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}') = \hat{O}(\mathbf{r})\,\Psi(\mathbf{r}). \tag{1-39}$$

L'opérateur $\hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}$ est le transformé de l'opérateur $\hat{O}$ dans la rotation faisant passer du repère $(\mathcal{S})$ au repère $(\mathcal{S}')$. On obtient en remplaçant dans l'opérateur $\hat{O}(\mathbf{r})$ *les anciennes coordonnées* en fonction des nouvelles. La transformation ainsi définie est telle que les valeurs numériques de $\hat{O}$ dans $(\mathcal{S})$ d'une part et de $\hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}$ dans $(\mathcal{S}')$ d'autre part restent les mêmes.

La relation (1-39) s'écrit dans la notation de Dirac :

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}' \mid \hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \mid \Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \rangle &= \langle \mathbf{r} \mid \hat{O} \mid \Psi \rangle \\ &= \langle \mathbf{r} \mid \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \mid \Psi \rangle\end{aligned} \tag{1-40}$$

et la loi de transformation des observables est donnée par :

$$\hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} = \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\,\hat{O}\,\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}}. \tag{1-41}$$

Il est clair que la définition de l'opérateur transformé et la relation ci-dessus restent inchangées si on retire l'hypothèse de la localité. Si $\hat{O}$, $\mid \Psi \rangle$, $\mid \Phi \rangle$ représentent des grandeurs physiques dans le premier repère et $\hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}$, $\mid \Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \rangle$, $\mid \Phi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \rangle$ les grandeurs correspondantes dans le second repère, on a :

$$\begin{aligned}\langle \Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \mid \hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \mid \Phi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \rangle &= \langle \Psi \mid \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}}\,\hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{O}\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}}\,\hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \mid \Phi \rangle \\ &= \langle \Psi \mid \hat{O} \mid \Phi \rangle.\end{aligned} \tag{1-42}$$

3.2. Opérateurs vectoriels et tensoriels

(A) Exemples

(α) Transformation des opérateurs $\hat{X}$, $\hat{Y}$ *et* $\hat{Z}$

Soit le point M de coordonnées (x, y, z) dans le repère $(\mathcal{S})$ et soit $\mid \Psi \rangle$ un ket quelconque. D'après la définition de l'opérateur $\hat{X}$ on a :

$$\langle x,\, y,\, z, \mid \hat{X} \mid \Psi \rangle = x\,\Psi(x, y, z) = x\,\langle x,\, y,\, z, \mid \Psi \rangle \tag{1-43a}$$

et de même :

$$\langle x,\, y,\, z, \mid \hat{Y} \mid \Psi \rangle \;=\; y\,\Psi(x,y,z) \;=\; y\,\langle x,\, y,\, z, \mid\; \Psi \rangle \tag{1-43b}$$

$$\langle x,\, y,\, z, \mid \hat{Z} \mid \Psi \rangle \;=\; z\,\Psi(x,y,z) \;=\; z\,\langle x,\, y,\, z, \mid\; \Psi \rangle. \tag{1-43c}$$

Le transformé de l'opérateur $\hat{X}$ sera $\hat{X}^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}$ tel que :

$$\begin{aligned}\langle x',\, y',\, z', \mid \hat{X}^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle &= \langle x,\, y,\, z, \mid \hat{X} \mid \Psi \rangle\\ &= x\,\Psi(x,y,z)\\ &= x\,\Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z')\\ &= x\,\langle x',\, y',\, z' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle.\end{aligned}$$

De plus, on peut exprimer x en fonction des coordonnées de M dans le nouveau repère (Éq. (1-9c)) :

$$x \;=\; \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,11}^{\mathbf{r}}\, x' \;+\; \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,21}^{\mathbf{r}}\, y' \;+\; \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,31}^{\mathbf{r}}\, z'.$$

On en déduit :

$$\langle x',\, y',\, z', \mid \hat{X}^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle \;=\; (\,\mathcal{R}_{\mathrm{p}\,11}^{\mathbf{r}}\, x' \;+\; \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,21}^{\mathbf{r}}\, y' + \;\mathcal{R}_{\mathrm{p}\,31}^{\mathbf{r}}\, z'\,)\langle x'\, y'\, z' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle.$$

Soient maintenant $\hat{X}'$, $\hat{Y}'$ et $\hat{Z}'$ les opérateurs définis par les mêmes relations que $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$ mais pour un observateur dans le repère $(\mathcal{S}')$:

$$\langle x',\, y',\, z', \mid \hat{X}' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle = x'\,\Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z') \;=\; x'\,\langle x',\, y',\, z' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle \tag{1-44a}$$

$$\langle x',\, y',\, z', \mid \hat{Y}' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle = y'\,\Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z') \;=\; y'\,\langle x',\, y',\, z' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle \tag{1-44b}$$

$$\langle x',\, y',\, z', \mid \hat{Z}' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle = z'\,\Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z') \;=\; z'\,\langle x',\, y',\, z' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \rangle. \tag{1-44c}$$

On a donc :

$$\hat{X}^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}} \;=\; \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\hat{X}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger} \;=\mathcal{R}_{\mathrm{p}\,11}^{\mathbf{r}}\,\hat{X}' \;+\; \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,21}^{\mathbf{r}}\,\hat{Y}' + \;\mathcal{R}_{\mathrm{p}\,31}^{\mathbf{r}}\,\hat{Z}'. \tag{1-45}$$

Par un raisonnement analogue sur les autres composantes, on trouve :

$$\begin{pmatrix}\hat{X}\\[2ex] \hat{Y}\\[2ex] \hat{Z}\end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix}\hat{X}^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}\\[2ex] \hat{Y}^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}\\[2ex] \hat{Z}^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\hat{X}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\\[2ex] \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\hat{Y}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\\[2ex] \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\hat{Z}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\end{pmatrix} \tag{1-46a}$$

avec :

$$\begin{pmatrix}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\hat{X}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\\[2ex] \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\hat{Y}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\\[2ex] \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}\hat{Z}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}\,\dagger}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathcal{R}_{\mathrm{p}\,11}^{\mathbf{r}} & \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,21}^{\mathbf{r}} & \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,31}^{\mathbf{r}}\\[2ex] \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,12}^{\mathbf{r}} & \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,22}^{\mathbf{r}} & \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,32}^{\mathbf{r}}\\[2ex] \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,13}^{\mathbf{r}} & \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,23}^{\mathbf{r}} & \mathcal{R}_{\mathrm{p}\,33}^{\mathbf{r}}\end{pmatrix} \begin{pmatrix}\hat{X}'\\[2ex] \hat{Y}'\\[2ex] \hat{Z}'\end{pmatrix}. \tag{1-46b}$$

Si on considère la loi de transformation des formes analytiques, les relations (1-46a) et (1-46b) deviennent :

$$\begin{pmatrix} \hat{X} \\ \hat{Y} \\ \hat{Z} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{X} \\ \hat{Y} \\ \hat{Z} \end{pmatrix}. \tag{1-46c}$$

(β) *Transformation des opérateurs* $\hat{P}_x$, $\hat{P}_y$ *et* $\hat{P}_z$

Comme au paragraphe précédent, nous avons :

$$\begin{aligned} \langle x', y', z', \mid \hat{P}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \mid \Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \rangle &= \langle x, y, z, \mid \hat{P}_x \mid \Psi \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial x}(x,y,z) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}}{\partial x}(x',y',z') \end{aligned} \tag{1-47}$$

mais on sait que :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial x'}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial y'}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y'} + \frac{\partial z'}{\partial x}\frac{\partial}{\partial z'} \\ &= \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\,\frac{\partial}{\partial x'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\,\frac{\partial}{\partial y'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\,\frac{\partial}{\partial z'} \end{aligned}$$

soit :

$$\langle x', y', z', \mid \hat{P}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \mid \Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \rangle = \frac{\hbar}{i}\left(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\frac{\partial}{\partial x'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\frac{\partial}{\partial y'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\frac{\partial}{\partial z'}\right)\Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}(x',y',z').$$

Si $\hat{P}_{x'}$, $\hat{P}_{y'}$ et $\hat{P}_{z'}$ sont les opérateurs définis par les mêmes propriétés que $\hat{P}_x$, $\hat{P}_y$ et $\hat{P}_z$ mais pour un observateur dans le repère $(\mathcal{S}')$, on a

$$\hat{P}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} = \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\,\hat{P}_{x'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\,\hat{P}_{y'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\,\hat{P}_{z'}. \tag{1-48}$$

Avec les autres composantes, on en déduit :

$$\begin{pmatrix} \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{P}_z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \hat{P}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \\ \hat{P}_y^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \\ \hat{P}_z^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{P}_x\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{P}_y\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{P}_z\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \end{pmatrix} \tag{1-49a}$$

avec :

$$\begin{pmatrix} \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{P}_x\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{P}_y\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{P}_z\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{P}_{x'} \\ \hat{P}_{y'} \\ \hat{P}_{z'} \end{pmatrix}. \tag{1-49b}$$

La loi de transformation des formes analytiques s'écrit donc :

$$\begin{pmatrix} \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{P}_z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{P}_z \end{pmatrix}. \tag{1-49c}$$

(γ) *Transformation des opérateurs* $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ *et* $\hat{L}_z$

On peut utiliser les résultats précédents pour calculer les transformées des composantes de l'opérateur moment cinétique orbital. Par exemple, pour la composante suivant l'axe Ox :

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} &= \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{L}_x \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} = \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} [\hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y] \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ &= \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{Y}\hat{P}_z \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} - \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{Z}\hat{P}_y \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ &= \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{Y} \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{P}_z \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} - \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{Z} \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{P}_y \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}}. \end{aligned}$$

Chacun des produits peut être développé en utilisant les relations (1-46b) et (1-49b), ce qui se traduit par :

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} &= (\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\hat{X}' + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\hat{Y}' + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\hat{Z}')(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13}\hat{P}_{x'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23}\hat{P}_{y'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33}\hat{P}_{z'}) \\ &\quad -(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13}\hat{X}' + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23}\hat{Y}' + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33}\hat{Z}')(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\hat{P}_{x'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\hat{P}_{y'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\hat{P}_{z'}) \\ &= \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23}(\hat{X}'\hat{P}_{y'} - \hat{Y}'\hat{P}_{x'}) + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33}(\hat{X}'\hat{P}_{z'} - \hat{Z}'\hat{P}_{x'}) \\ &\quad + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13}(\hat{Y}'\hat{P}_{x'} - \hat{X}'\hat{P}_{y'}) + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33}(\hat{Y}'\hat{P}_{z'} - \hat{Z}'\hat{P}_{y'}) \\ &\quad + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13}(\hat{Z}'\hat{P}_{x'} - \hat{X}'\hat{P}_{z'}) + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23}(\hat{Z}'\hat{P}_{y'} - \hat{Y}'\hat{P}_{z'}) \\ &= \hat{L}_{x'}(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23}) + \hat{L}_{y'}(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33}) \\ &\quad + \hat{L}_{z'}(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13}). \end{aligned}$$

Mais :

$$\begin{aligned} &\text{(i)} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} &= \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} \\ &\text{(ii)} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} &= \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} \\ &\text{(iii)} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} &= \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} \end{aligned}$$

d'où :

$$\hat{L}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} = \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{L}_x \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} = \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\hat{L}_{x'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\hat{L}_{y'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\hat{L}_{z'}. \tag{1-50}$$

On a alors :

$$\begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \hat{L}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \\ \hat{L}_y^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \\ \hat{L}_z^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{L}_x \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{L}_y \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}} \hat{L}_z \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \end{pmatrix} \tag{1-51a}$$

avec :

$$\begin{pmatrix} \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{L}_x\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{L}_y\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \\ \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}\hat{L}_z\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{L}_{x'} \\ \hat{L}_{y'} \\ \hat{L}_{z'} \end{pmatrix}. \tag{1-51b}$$

La loi de correspondance s'établit donc par :

$$\begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}. \tag{1-51c}$$

(B) Définition

Les opérateurs $(\hat{X},\ \hat{Y},\ \hat{Z})$, $(\hat{P}_x,\ \hat{P}_y,\ \hat{P}_z)$ et $(\hat{P}_x,\ \hat{P}_y,\ \hat{P}_z)$ se transforment de la même manière : ce sont des opérateurs *vectoriels*. La loi de transformation qui leur est associée est particulièrement simple : soit $\hat{\mathbf{V}}$ un opérateur vectoriel quelconque. Il est défini par ses composantes $\hat{V}_x$, $\hat{V}_y$ et $\hat{V}_z$ dans le repère $(\mathcal{S})$ telles que :

$$\begin{aligned} \hat{V}_x &= \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{e}_x, \\ \hat{V}_y &= \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{e}_y, \\ \hat{V}_z &= \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{e}_z. \end{aligned} \tag{1-52}$$

Pour un observateur dans le repère $(\mathcal{S}')$, la forme analytique de chacune des composantes devient une combinaison linéaire des autres composantes :

$$\begin{pmatrix} \hat{V}_x \\ \hat{V}_y \\ \hat{V}_z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\;33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{V}_x \\ \hat{V}_y \\ \hat{V}_z \end{pmatrix}. \tag{1-53}$$

Soit maintenant un vecteur unitaire quelconque $\mathbf{n}$. On peut définir l'opérateur $\hat{V}_n$ par :

$$\hat{V}_n = \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n} \tag{1-54a}$$

on a donc :

$$\hat{V}_n = n_x\hat{V}_x + n_y\hat{V}_y + n_z\hat{V}_z \tag{1-54b}$$

où n_x, n_y et n_z sont les trois composantes du vecteur $\mathbf{n}$ dans le repère $(\mathcal{S})$. Alors la loi de transformation s'écrit :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n} = \hat{V}_n \rightarrow\ & n_x\,(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\,\hat{V}_x + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\,\hat{V}_y + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\,\hat{V}_z) \\ & + n_y\,(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\,\hat{V}_x + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\,\hat{V}_y + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\,\hat{V}_z) \\ & + n_z\,(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13}\,\hat{V}_x + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23}\,\hat{V}_y + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33}\,\hat{V}_z). \end{aligned}$$

Si on regroupe les différents termes suivant les composantes cartésiennes de l'opérateur on obtient :

$$\begin{aligned}\hat{V}_n \to\ & (n_x\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} + n_y\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} + n_z\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13})\,\hat{V}_x + (\,n_x\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} + n_y\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} + n_z\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23})\,\hat{V}_y \\ & +(\,n_x\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} + n_y\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32} + n_z\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33})\,\hat{V}_z \\ &= n'_{x'}\,\hat{V}_x + n'_{y'}\,\hat{V}_y + n'_{z'}\,\hat{V}_z \\ &= \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n}'\end{aligned}$$

où $\mathbf{n}'$ est le vecteur $\mathbf{n}$ vu par un observateur dans $(\mathcal{S}')$ (relation (1B-15a) appliquée au vecteur $\mathbf{n}$). En conclusion, la loi de transformation d'un opérateur vectoriel est donnée par

$$\hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n} \to \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n}' \quad . \tag{1-55}$$

(C) Opérateurs tensoriels irréductibles

Comme pour un vecteur ordinaire, on peut définir les composantes standard d'un opérateur vectoriel (complément B) :

$$\begin{aligned}\hat{V}_1 &= \frac{-1}{\sqrt{2}}\,(\,\hat{V}_x + i\hat{V}_y\,) \\ \hat{V}_0 &= \hat{V}_z \\ \hat{V}_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\hat{V}_x - i\hat{V}_y\,)\end{aligned} \tag{1-56}$$

et réciproquement

$$\begin{aligned}\hat{V}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\hat{V}_{-1} - \hat{V}_1\,) \\ \hat{V}_z &= \hat{V}_0 \\ \hat{V}_y &= \frac{i}{\sqrt{2}}\,(\,\hat{V}_1 + \hat{V}_{-1}\,).\end{aligned} \tag{1-57}$$

Dans le repère $(\mathcal{S}')$ on a des relations analogues entre les coordonnées cartésiennes et standard :

$$\begin{aligned}\hat{V}_1^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} = \frac{-1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_x^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} + i\,\hat{V}_y^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}}) = \frac{-1}{\sqrt{2}}\big[\,&(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\,\hat{V}'_{x'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\,\hat{V}'_{y'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\,\hat{V}'_{z'}) \\ &+ i\,(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\,\hat{V}'_{x'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\,\hat{V}'_{y'} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\,\hat{V}'_{z'})\,\big]\end{aligned}$$

c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}\hat{V}_1^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}}} &= \frac{-1}{\sqrt{2}}\Big(\,\Big[\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\hat{V}'_{-1} - \hat{V}'_1\,)\Big] + \Big[\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\,i\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\hat{V}'_1 + \hat{V}'_{-1}\,)\Big] + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\,\hat{V}'_0\,\Big) \\ &= \left[\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}}{2} + i\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}}{2}\right]\,\hat{V}'_1 - \left[\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} + i\,\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}}{\sqrt{2}}\right]\,\hat{V}'_0 \\ &\quad + \left[\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}}{2} - i\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}}{2}\right]\,\hat{V}'_{-1}.\end{aligned}$$

On retrouve la même loi de transformation que pour un vecteur habituel (1B-17) :

$$\hat{V}_1^{R_\mathrm{p}^\mathbf{r}} = \mathcal{D}^{(1)}_{1\,1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\hat{V}'_1 + \mathcal{D}^{(1)}_{0\,1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\hat{V}'_0 + \mathcal{D}^{(1)}_{-1\,1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\hat{V}'_{-1}$$

et en général on a pour un opérateur *vectoriel* :

$$\hat{V}_\nu^{R_\mathrm{p}^\mathbf{r}} = \sum_{\nu'=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{\nu'\,\nu}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\hat{V}'_{\nu'} \tag{1-59a}$$

On peut définir d'une manière plus générale par $\hat{\mathbf{T}}^k$ un *opérateur tensoriel irréductible d'ordre* k dont les composantes se transforment suivant les relations :

$$\hat{T}^k_m \;\to\; \hat{R}_\mathrm{p}^\mathbf{r}\,\hat{T}^k_m\,\hat{R}_\mathrm{p}^{\mathbf{r}\,\dagger} = \left[\hat{T}^k_m\right]^{R_\mathrm{p}^\mathbf{r}} = \sum_{m'=-k}^{k} \mathcal{D}^{(k)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\hat{T}'^{\,k}_{m'} \quad . \tag{1-60a}$$

Dans cette formule il faut remarquer que $\hat{T}$ et $\hat{T}'$ ont la même forme analytique mais sont vus par des observateurs dans deux repères différents.

En particulier, les harmoniques sphériques $\mathbf{Y}^l(\vartheta,\varphi)$ en tant qu'opérateurs sont irréductibles et d'ordre l :

$$\begin{aligned} Y_l^m(\vartheta,\varphi) \;\to\; \hat{R}_\mathrm{p}^\mathbf{r}\,Y_l^m(\vartheta,\varphi)\,\hat{R}_\mathrm{p}^{\mathbf{r}\,\dagger} &= \left[Y_l^m(\vartheta,\varphi)\right]^{R_\mathrm{p}^\mathbf{r}} \\ &= \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}^{(l)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,Y_l^{m'}(\vartheta'\varphi'). \end{aligned} \tag{1-61}$$

La loi de correspondance entre les formes analytiques s'écrit pour les cas précédents :

$$\hat{V}_\nu \;\to\; \sum_{\nu'=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{\nu'\,\nu}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\hat{V}_{\nu'} \tag{1-59b}$$

et

$$\hat{T}^k_m \;\to\; \sum_{m'=-k}^{k} \mathcal{D}^{(k)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\hat{T}^k_{m'} \quad . \tag{1-60b}$$

4. Transformation d'un champ de spineurs

On sait que les nucléons – protons et neutrons – sont des fermions et possèdent un spin intrinsèque $s = 1/2$. Les lois de transformation données pour un champ scalaire ne s'appliquent donc pas. Nous allons dans un premier temps envisager uniquement les lois de transformation des spineurs puis ensuite des champs de spineurs.

4.1. Loi de transformation dans $\mathcal{E}^s$

(A) Transformation des spineurs et opérateur de rotation

Soit une particule de spin s quelconque. Son état est caractérisé dans l'espace intrinsèque $\mathcal{E}^s$ par un ket $|\ s\ \ m\,\rangle$. À la rotation qui fait passer du repère $(\mathcal{S})$ à $(\mathcal{S}')$ correspond l'opérateur quantique $\hat{R}^s_{\mathrm{p}}$. Si la rotation est définie par l'angle de γ et l'axe $\mathbf{u}$, il s'écrit

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma\mathbf{u}\cdot\mathbf{S}} \quad . \tag{1-62}$$

Dans le cas particulier où $s = 1/2$ cet opérateur s'écrit simplement en fonction des matrices de Pauli (1C-1) :

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{i\,\frac{\gamma}{2}\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \quad . \tag{1-63}$$

En développant en série de Taylor et en utilisant la relation

$$(\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A})(\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}) = \ \mathbf{A}\cdot\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{A}\wedge\mathbf{B}) \tag{1-64a}$$

qui s'écrit dans le cas particulier :

$$(\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{u})(\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{u}) = 1. \tag{1-64b}$$

L'opérateur de rotation pour une particule de spin 1/2 a une forme particulièrement simple :

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}} = \cos\frac{\gamma}{2}\,I\ + i\,\sin\frac{\gamma}{2}\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{u} \tag{1-65}$$

où I est la matrice identité à 2 lignes et 2 colonnes.

On peut aussi exprimer cet opérateur de rotation en fonction de l'opérateur de spin $\mathbf{S} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$:

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}} = \cos\frac{\gamma}{2}\,I\ + 2\frac{i}{\hbar}\,\sin\frac{\gamma}{2}\ \mathbf{S}\cdot\mathbf{u} \quad . \tag{1-66}$$

Lorsque l'opérateur de rotation est défini par les angles d'Euler, on a :

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 S_z}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 S_y}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 S_z} \quad . \tag{1-67}$$

Si l'état du physique est décrit dans le repère $(\mathcal{S})$ par le ket $|\ s\ m\,\rangle$, dans le nouveau repère $(\mathcal{S}')$ le même état physique sera décrit par le ket $|\ [s\ m]^{R^s_{\mathrm{p}}}\ \rangle$ tel que :

$$\begin{aligned}|\ s\ m\,\rangle \to |\ [s\ m]^{R^s_{\mathrm{p}}}\ \rangle &= \hat{R}^s_{\mathrm{p}}\ |\ s\ m\,\rangle \\ &= \sum_{m'=-s}^{s} [\ \hat{R}^s_{\mathrm{p}}\ ]_{m'\,m}\ |\ s\ m'\,\rangle.\end{aligned} \tag{1-68a}$$

En particulier pour une rotation définie par les angles d'Euler, on a :

$$\begin{aligned}|\ s\ m\,\rangle \to |\ [s\ m]^{R^s_{\mathrm{p}}}\ \rangle &= \hat{R}^s_{\mathrm{p}}\ |\ s\ m\,\rangle \\ &= \sum_{m'=-s}^{s} \mathcal{D}^{(s)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\ |\ s\ m'\,\rangle.\end{aligned} \tag{1-68b}$$

Remarque. Bien que le but principal de ce paragraphe soit de traiter les transformations des champs de spineurs à deux composantes, c'est-à-dire des champs associés aux particules de spin $s = 1/2$, on peut noter que les relations (1-62), (1-67), (1-68a) et (1-68b) sont générales et restent valables pour un spin quelconque. Il en est de même pour la loi de transformation des observables qui sera donnée au paragraphe suivant (relations (1-75) et (1-76)).

Exemple : $s = 1/2$.

Soit $\mathbf{n}$ un vecteur unitaire déterminé dans le repère $(\mathcal{S})$ par ses angles polaire ϑ et azimutal φ. L'opérateur $\mathbf{S}\cdot\mathbf{n} = S_x n_x + S_y n_y + S_z n_z$ s'écrit sous forme matricielle :

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{n} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta \mathrm{e}^{-i\varphi} \\ \sin\vartheta \mathrm{e}^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix}. \tag{1-69}$$

La diagonalisation de cette matrice donne deux vecteurs propres notés $|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle_n$ et $|\ 1/2\ \ -1/2\,\rangle_n$ avec les valeurs propres respectives $\hbar/2$ et $-\hbar/2$. Ces vecteurs propres se développent sur la base des états propres de l'opérateur S_z :

$$|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle_n = \cos\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle + \sin\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\ 1/2\ \ -1/2\,\rangle, \tag{1-70a}$$

$$|\ 1/2\ \ -1/2\,\rangle_n = -\sin\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle + \cos\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\ 1/2\ \ -1/2\,\rangle. \tag{1-70b}$$

Soit $(\mathcal{S}')$ le repère obtenu par une rotation de l'angle φ autour de l'axe Oz suivie d'une rotation de l'angle ϑ autour du nouvel axe Oy. Il est clair que dans le nouveau repère, le vecteur unitaire $\mathbf{n}$ coïncidera avec l'axe Oz. Supposons que dans le repère $(\mathcal{S})$ la particule de spin $s = 1/2$ soit dans l'état quantique décrit par le ket $|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle_n$. Dans $(\mathcal{S}')$, ce même état sera représenté par le ket $|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle$. Nous allons retrouver ce résultat à partir du paragraphe précédent :

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}}|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle_n \ =\ \cos\frac{\vartheta}{2}\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,\hat{R}^s_{\mathrm{p}}\,|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle + \sin\frac{\vartheta}{2}\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,\hat{R}^s_{\mathrm{p}}\,|\ 1/2\ \ -1/2\,\rangle. \tag{1-71}$$

Mais d'après l'équation (1-68b) et la forme de la matrice de rotation donnée par (1C-8), on a ($\gamma_1 = \varphi, \gamma_2 = \vartheta$ et $\gamma_3 = 0$) :

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}}\,|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle \ =\ \cos\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle - \sin\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\ 1/2\ \ -1/2\,\rangle \tag{1-72}$$

et

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}}\,|\ 1/2\ \ -1/2\,\rangle \ =\ \sin\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle + \cos\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,|\ 1/2\ \ -1/2\,\rangle \tag{1-73}$$

d'où le résultat attendu :

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}}|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle_n \ =|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle. \tag{1-74}$$

(B) Transformation des observables

La loi de transformation des observables agissant dans l'espace des spins intrinsèques est la même que dans l'espace $\mathcal{E}^{\mathbf{r}}$:

$$\hat{O}^{R_{\mathrm{p}}^s} = \hat{R}_{\mathrm{p}}^s \, \hat{O} \, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{s\,\dagger} \tag{1-75}$$

tel que :

$$\langle\, [s\ \ m]^{R_{\mathrm{p}}^s} \mid \hat{O}^{R_{\mathrm{p}}^s} \mid [s\ \ m']^{R_{\mathrm{p}}^s} \,\rangle = \langle\, s\ \ m \mid \hat{O} \mid s\ \ m' \,\rangle. \tag{1-76}$$

Exemple. Le cas particulier défini dans le paragraphe précédent va nous permettre de mieux comprendre cette loi de transformation. Si un observateur dans le repère $(\mathcal{S})$ effectue une mesure de la grandeur physique représentée par l'observable $\mathbf{S}\cdot\mathbf{n}$, le résultat qu'il obtiendra sera donné par la valeur propre associée à l'état propre $\mid 1/2\ \ 1/2\,\rangle_n$:

$$O_n = {}_n\langle\, 1/2\ \ 1/2 \mid \mathbf{S}\cdot\mathbf{n} \mid 1/2\ \ 1/2\,\rangle_n = \frac{\hbar}{2}. \tag{1-77}$$

Puisque cette valeur est la valeur propre de l'opérateur transformé $(\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{n})^{R_{\mathrm{p}}^s}$ d'après (1-75) et (1-76) et que l'état propre transformé est $\mid\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle$, on en déduit que :

$$(\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{n})^{R_{\mathrm{p}}^s} = S_{z'} \tag{1-78}$$

où $S_{z'}$ est l'opérateur défini de la même manière que S_z mais pour un observateur dans $(\mathcal{S}')$. Nous allons retrouver ce résultat à partir de la définition d'une observable transformée :

$$(\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{n})^{R_{\mathrm{p}}^s} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vartheta S_y}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\varphi S_z}\,(\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{n})\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\varphi S_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vartheta S_y} \quad . \tag{1-79}$$

On peut exprimer ces différents opérateurs en fonction des matrices de Pauli :

$$\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vartheta S_y} = \cos\frac{\vartheta}{2}\,I + i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\,\sigma_y\ ; \qquad \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\varphi S_z} = \cos\frac{\varphi}{2}\,I + i\,\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_z \tag{1-80}$$

$$\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\varphi S_z} = \cos\frac{\varphi}{2}\,I - i\,\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_z\ ; \quad \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vartheta S_y} = \cos\frac{\vartheta}{2}\,I - i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\,\sigma_y \tag{1-81}$$

d'où :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^s = \cos\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\varphi}{2} - i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_x + i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\,\sigma_y + i\,\cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_z \tag{1-82a}$$

et :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}^{s\,\dagger} = \cos\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\varphi}{2} + i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_x - i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\,\sigma_y - i\,\cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_z. \tag{1-82b}$$

De même pour l'opérateur $\mathbf{S}\cdot\mathbf{n}$:

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{n} = \frac{\hbar}{2}\,(\sin\vartheta\cos\varphi\ \sigma_x + \sin\vartheta\sin\varphi\ \sigma_y + \cos\vartheta\ \sigma_z) \tag{1-83}$$

ou encore en fonction des angles $\vartheta/2$ et $\varphi/2$:

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{n} = \hbar\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\vartheta}{2}\,(1-2\sin^2\frac{\varphi}{2})\,\sigma_x\ +2\hbar\ \sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\,\sigma_y + \frac{\hbar}{2}\,(1-2\sin^2\frac{\vartheta}{2})\,\sigma_z. \quad (1\text{-}84)$$

En utilisant les relations :

$$\sigma_y\sigma_z\ =\ i\,\sigma_x\ ;\qquad \sigma_z\sigma_y\ =\ -i\,\sigma_x \quad (1\text{-}85)$$

on trouve :

$$(\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{n})^{R^s_{\mathrm{p}}}\ =\ \frac{\hbar}{2}\,(\,a{+}b\sigma_x{+}c\sigma_y{+}d\sigma_z\,)(\,b'\sigma_x{+}c'\sigma_y{+}d'\sigma_z\,)(\,a{-}b\sigma_x{-}c\sigma_y{-}d\sigma_z\,) \quad (1\text{-}86)$$

avec :

$$\begin{aligned}
&a = \cos\frac{\vartheta}{2}\,\cos\frac{\varphi}{2} \\
&b = -\,i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\,\sin\frac{\varphi}{2} \qquad && b'\ =\ \sin\frac{\vartheta}{2}\,\cos\frac{\vartheta}{2}\,\left(1-2\sin^2\frac{\varphi}{2}\right) \\
&c = \,i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\,\cos\frac{\varphi}{2} && c'\ =\ 2\sin\frac{\vartheta}{2}\,\cos\frac{\vartheta}{2}\,\sin\frac{\varphi}{2}\,\cos\frac{\varphi}{2} \\
&d = \,i\,\cos\frac{\vartheta}{2}\,\sin\frac{\varphi}{2} && d'\ =\frac{1}{2}\,\left(1-2\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right).
\end{aligned} \quad (1\text{-}87)$$

En effectuant le produit, on trouve finalement :

$$(\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{n})^{R^s_{\mathrm{p}}}\ =\ \frac{\hbar}{2}\sigma_z\ =\ S_z. \quad (1\text{-}88)$$

Remarque. Le vecteur $\mathbf{n}$ a pour composantes $n_x = \sin\vartheta\cos\varphi$, $n_y = \sin\vartheta\sin\varphi$, $n_z = \cos\vartheta$ dans $(\mathcal{S})$ et $n_x = n_y = 0$, $n_z = 1$ dans $(\mathcal{S}')$. Le produit scalaire $\mathbf{S}\cdot\mathbf{n}$ devient égal à S_z dans ce dernier repère. L'opérateur $\mathbf{S}$ est donc un opérateur vectoriel.

(C) Cas des spins demi-entiers

Considérons toujours le cas d'une particule de spin $s = 1/2$. D'après la relation (1-65), on a pour une rotation d'un angle 2π autour de l'axe $\mathbf{u}$:

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}}(2\pi)\ =\ -I.$$

En d'autres termes, bien qu'une rotation d'un angle de 2π ramène au point de départ, l'opérateur de rotation quantique correspondant n'est pas nécessairement égal à l'identité. Il en est ainsi en général pour les spins demi-entiers. Par contre, on a toujours $\hat{R}^s_{\mathrm{p}}(4\pi)\ =\ I$. Bien qu'il y ait correspondance biunivoque entre les rotations infinitésimales classiques et quantiques, il n'en est pas de même pour les rotations finies. Lorsque s est demi-entier, à chaque rotation classique $\mathcal{R}_{\mathrm{p}}$ correspond deux opérateurs $\hat{R}^{s}_{\mathrm{p}}$ et $-\hat{R}^{s}_{\mathrm{p}}$. De même, la relation (1-21) n'est plus valable et doit être remplacée par :

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}} = \pm \hat{R}^s_{\mathrm{p}_2} \hat{R}^s_{\mathrm{p}_1} . \tag{1-89}$$

Une discussion plus approfondie est donnée dans le complément C.

4.2. Transformation dans l'espace complet $\mathcal{E}^{\mathrm{r}} \otimes \mathcal{E}^{\mathrm{s}}$

(A) Définitions

L'état physique d'une particule de spin 1/2 dans l'espace $\mathcal{E}^{\mathbf{r}} \otimes \mathcal{E}^{s}$ sera décrit par un ket $|\, \Psi \,\rangle$ qui peut être développé sur la base $|\, \mathbf{r}\; m \,\rangle$. La relation de fermeture

$$\sum_{m=-1/2}^{1/2} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \;|\, \mathbf{r}\; m \,\rangle\langle\, \mathbf{r}\; m \,| = 1 \tag{1-90}$$

permet d'écrire :

$$|\, \Psi \,\rangle = \sum_{m'=-1/2}^{1/2} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}' \;|\, \mathbf{r}'\; m' \,\rangle\langle\, \mathbf{r}'\; m' \;|\; \Psi \,\rangle \qquad . \tag{1-91}$$

La relation d'orthogonalité

$$\langle\, \mathbf{r}'\; m' \;|\; \mathbf{r}\; m \,\rangle = \delta(\,\mathbf{r}' - \mathbf{r}\,)\; \delta_{m'\,m} \tag{1-92}$$

donne alors :

$$\langle\, \mathbf{r}\; m \;|\; \Psi \,\rangle = \Psi_m(\mathbf{r}) \tag{1-93}$$

ce qui donne le développement suivant du ket $|\, \Psi \,\rangle$:

$$|\, \Psi \,\rangle = \sum_{m=-1/2}^{1/2} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \;|\, \mathbf{r}\; m \,\rangle\, \Psi_m(\mathbf{r}) \qquad . \tag{1-94}$$

L'état physique est donc parfaitement déterminé par les fonctions $\Psi_{-1/2}$ et $\Psi_{1/2}$. On peut décrire l'ensemble de ces fonctions sous la forme d'un spineur $\left[\Psi\right]$ à 2 composantes :

$$\left[\, \Psi \,\right](\,\mathbf{r}\,) = \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \tag{1-95}$$

et d'après la relation d'orthogonalité, on a la représentation $\{\mathbf{r}\}$:

$$\langle\, \mathbf{r} \;|\, \Psi \,\rangle = \sum_{m=-1/2}^{1/2} \Psi_m(\mathbf{r}) \;|\; m \,\rangle \qquad . \tag{1-96}$$

Le bra associé $\langle \Psi \mid$ s'écrit en développant de la même manière :

$$\langle \Psi \mid = \sum_{m=-1/2}^{1/2} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \langle \Psi \mid \mathbf{r}\, m \rangle \langle \mathbf{r}\ m \mid = \sum_{m=-1/2}^{1/2} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \Psi_m^*(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r}\ m \mid \qquad . \tag{1-97}$$

Ce qui permet de définir le spineur adjoint :

$$\left[\, \Psi \,\right]^\dagger (\, \mathbf{r}\,) = \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}^*(\mathbf{r}) & \Psi_{-1/2}^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \qquad . \tag{1-98}$$

Le produit scalaire s'exprime en fonction de ces deux spineurs de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \langle \Phi \mid \Psi \rangle &= \sum_{m=-1/2}^{1/2} \sum_{m'=-1/2}^{1/2} \iint \mathrm{d}^3\mathbf{r}\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}'\ \Phi_{m'}^*(\mathbf{r}')\, \Psi_m(\mathbf{r})\, \langle \mathbf{r}'\ m' \mid \mathbf{r}\ m \rangle \\ &= \sum_{m=-1/2}^{1/2} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \Phi_m^*(\mathbf{r})\, \Psi_m(\mathbf{r}) \\ &= \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \quad \left[\, \Phi \,\right]^\dagger (\, \mathbf{r}\,) \left[\, \Psi \,\right] (\, \mathbf{r}\,) \qquad . \end{aligned} \tag{1-99}$$

Convention. Par la suite la sommation sur les états intrinsèques 1/2 et −1/2 ne sera plus écrite explicitement.

(B) Transformation des champs de spineurs par rotation

Si l'état physique est représenté par le ket $\mid \Psi \rangle$ dans le repère $(\mathcal{S})$, ce même état sera décrit dans le repère $(\mathcal{S}')$ par le ket $\mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \rangle$ défini par :

$$\mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \rangle = \hat{R}_\mathrm{p} \mid \Psi \rangle \tag{1-100}$$

avec :

$$\hat{R}_\mathrm{p} = \hat{R}_\mathrm{p}^{\mathbf{r}}\, \hat{R}_\mathrm{p}^{s}. \tag{1-101}$$

Les opérateurs $\hat{R}_\mathrm{p}^{\mathbf{r}}$ et $\hat{R}_\mathrm{p}^{s}$ agissent dans deux espaces différents et donc commutent.

Si on injecte la relation de fermeture dans l'égalité précédente, on trouve :

$$\begin{aligned} \mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \rangle &= \hat{R}_\mathrm{p} \sum_m \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \mid \mathbf{r}\ m \rangle \langle \mathbf{r}\ m \mid \Psi \rangle \\ &= \sum_m \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\, \hat{R}_\mathrm{p} \mid \mathbf{r}\ m \rangle \langle \mathbf{r}\ m \mid \Psi \rangle \\ &= \sum_m \sum_{m''} \iint \mathrm{d}^3\mathbf{r}\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}'' \mid \mathbf{r}''\ m'' \rangle \langle \mathbf{r}\ m \mid \Psi \rangle \langle \mathbf{r}''\ m'' \mid \hat{R}_\mathrm{p} \mid \mathbf{r}\ m \rangle \end{aligned}$$

mais :

$$\langle \mathbf{r}''\, m'' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}} \mid \mathbf{r}\, m \rangle = \langle \mathbf{r}'' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}} \mid \mathbf{r} \rangle \langle m'' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}^{s} \mid m \rangle$$
$$= \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}')\; [\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{s}\,]_{m''\, m} \tag{1-102}$$

avec

$$\mathbf{r}' = \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) \tag{1-9a}$$

soit :

$$\mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}} \rangle = \sum_{m} \sum_{m'} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}' [\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{s}\,]_{m'\, m}\, \Psi_m(\mathbf{r}) \mid \mathbf{r}'\, m' \rangle \quad . \tag{1-103a}$$

Mais si on définit comme pour un champ scalaire :

$$\Psi_m^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(\mathbf{r}') = \Psi_m(\mathbf{r}) \tag{1-104}$$

obtenu en remplaçant dans $\Psi_m(\mathbf{r})$ les anciennes coordonnées x, y, z en fonction des nouvelles x', y', z', le ket transformé se développe ainsi :

$$\mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}} \rangle = \hat{R}_{\mathrm{p}} \mid \Psi \rangle = \sum_{m} \sum_{m'} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}' [\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{s}\,]_{m'\, m}\, \Psi_m^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(\mathbf{r}') \mid \mathbf{r}'\, m' \rangle \quad . \tag{1-103b}$$

D'après la relation (1-94), on peut écrire pour un observateur dans le repère $(\mathcal{S}')$:

$$\mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}} \rangle = \sum_{m'} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}'\, \Psi_{m'}^{R_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}') \mid \mathbf{r}'\, m' \rangle \quad . \tag{1-105}$$

En identifiant (1-103a) et (1-103b) avec l'égalité précédente, on trouve :

$$\Psi_{m'}^{R_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}') = \sum_{m} [\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{s}\,]_{m'\, m}\, \Psi_m(\mathbf{r}) \tag{1-106a}$$

ou encore :

$$\Psi_{m'}^{R_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}') = \sum_{m} [\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{s}\,]_{m'\, m}\, \Psi_m^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(\mathbf{r}') \tag{1-106b}$$

L'égalité (1-106a) est l'équivalent de la relation

$$\Psi^{R_{\mathrm{p}}^{\mathbf{r}}}(\mathbf{r}') = \Psi(\mathbf{r}) \tag{1-18}$$

valable pour un champ scalaire.

Les relations (1-106a) et (1-106b) s'écrivent sous forme matricielle (on remarquera la sommation sur les indices de colonne) :

$$\begin{pmatrix} \Psi_{1/2}^{R_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1/2}^{R_{\mathrm{p}}}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \\ \hat{R}_{\mathrm{p}}^{s} \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \\ \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \tag{1-107a}$$

$$\begin{pmatrix} \Psi^{R_\mathrm{p}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi^{R_\mathrm{p}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{R}^s_\mathrm{p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^{R^\mathbf{r}_\mathrm{p}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi^{R^\mathbf{r}_\mathrm{p}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} . \tag{1-107b}$$

Signalons enfin la relation analogue à (1-96) :

$$\langle \mathbf{r}' \mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \rangle = \sum_{m'} \Psi^{R_\mathrm{p}}_{m'}(\mathbf{r}') \mid m' \rangle \quad . \tag{1-108}$$

Le ket transformé peut s'écrire aussi sous la forme d'un spineur à 2 composantes :

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{p}} \right] (\mathbf{r}') = \begin{pmatrix} \Psi^{R_\mathrm{p}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi^{R_\mathrm{p}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \quad . \tag{1-109}$$

Le bra conjugué associé au ket $\mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \rangle$ est :

$$\langle \Psi^{R_\mathrm{p}} \mid = \sum_{m'} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}' \; \Psi^{R_\mathrm{p}\,*}_{m'} \; \langle \mathbf{r}' \, m' \mid \tag{1-110}$$

et le spineur adjoint s'écrit :

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{p}} \right]^\dagger (\mathbf{r}') = \begin{pmatrix} \Psi^{R_\mathrm{p}\,*}_{1/2}(\mathbf{r}') & \Psi^{R_\mathrm{p}\,*}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \quad . \tag{1-111}$$

Les relations (1-106a) et (1-106b) s'écrivent sous forme matricielle et en terme de spineurs :

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{p}} \right] (\mathbf{r}') = \left(\hat{R}^s_\mathrm{p} \right) \left[\Psi \right] (\mathbf{r}) \tag{1-112}$$

ou

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{p}} \right] (\mathbf{r}') = \left(\hat{R}^s_\mathrm{p} \right) \left[\Psi^{R^\mathbf{r}_\mathrm{p}} \right] (\mathbf{r}') \quad . \tag{1-113}$$

Dans les égalités ci-dessus la matrice de rotation sera exprimée soit en fonction d'un vecteur unitaire et d'un angle de rotation, soit en fonction des angles d'Euler.

L'opérateur $\hat{R}_\mathrm{p}$ étant le produit de deux opérateurs unitaires est lui-même unitaire. On a donc conservation du produit scalaire :

$$\langle \Phi \mid \Psi \rangle = \langle \Phi \mid \hat{R}_\mathrm{p}^\dagger \, \hat{R}_\mathrm{p} \mid \Psi \rangle = \langle \Phi^{R_\mathrm{p}} \mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \rangle \quad . \tag{1-114}$$

On peut retrouver ce résultat en développant sur la base complète $\mid \mathbf{r}\, m \rangle$. Ce produit scalaire défini entre deux kets transformés s'exprime de la même manière que dans le repère $(\mathcal{S})$:

$$\langle \Phi^{R_\mathrm{p}} \mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \rangle = \sum_{m'} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}' \; \Phi^{R_\mathrm{p}\,*}_{m'}(\mathbf{r}') \, \Psi^{R_\mathrm{p}}_{m'}(\mathbf{r}') \quad . \tag{1-115}$$

On peut remplacer $\Psi_{m'}^{R_\mathrm{p}}(\mathbf{r}')$ par l'égalité (1-106a) et $\Phi_{m'}^{R_\mathrm{p}\,*}(\mathbf{r}')$ par la relation complexe conjuguée. L'unitarité de l'opérateur $\hat{R}_\mathrm{p}^s$ entraîne finalement :

$$\langle\, \Phi^{R_\mathrm{p}} \mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \,\rangle \,=\, \sum_m \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \Phi_m^*(\mathbf{r})\,\Psi_m(\mathbf{r}) \,=\, \langle\, \Phi \mid \Psi \,\rangle$$

ce qui est la relation cherchée.

Nous avons vu que pour un champ scalaire l'amplitude de probabilité de trouver une particule sans spin ne dépendait pas du repère mais seulement du système physique :

$$\Psi^{R_\mathrm{p}^\mathbf{r}}(\mathbf{r}') \,=\, \Psi(\mathbf{r}) \qquad .$$

Nous allons maintenant voir quelle est la relation équivalente pour un champ de spineurs. Rappelons d'abord les égalités obtenues dans l'espace $\mathcal{E}^\mathbf{r}$:

$$\begin{aligned} \hat{R}_\mathrm{p}^\mathbf{r} \mid \mathbf{r}\,\rangle &= \mid \mathbf{r}'\,\rangle \\ \langle\, \mathbf{r}' \mid &= \langle\, \mathbf{r} \mid \hat{R}_\mathrm{p}^{\mathbf{r}\,\dagger} \\ \langle\, \mathbf{r} \mid &= \langle\, \mathbf{r}' \mid \hat{R}_\mathrm{p}^\mathbf{r} \qquad . \end{aligned}$$

De même dans l'espace $\mathcal{E}^s$, nous aurons :

$$\begin{aligned} \hat{R}_\mathrm{p}^s \mid m\,\rangle &= \mid [\,m\,]^{R_\mathrm{p}^s}\,\rangle \\ \langle\, [\,m\,]^{R_\mathrm{p}^s} \mid &= \langle\, m \mid \hat{R}_\mathrm{p}^{s\,\dagger} \\ \langle\, m \mid &= \langle\, [\,m\,]^{R_\mathrm{p}^s} \mid \hat{R}_\mathrm{p}^s \qquad . \end{aligned}$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} \langle\, \mathbf{r}\,m \mid \Psi\,\rangle &= \langle\, \mathbf{r}'\,[\,m\,]^{R_\mathrm{p}^s} \mid \hat{R}_\mathrm{p}^\mathbf{r}\,\hat{R}_\mathrm{p}^s \mid \Psi\,\rangle \\ &= \langle\, \mathbf{r}'\,[\,m\,]^{R_\mathrm{p}^s} \mid \hat{R}_\mathrm{p} \mid \Psi\,\rangle \\ &= \langle\, \mathbf{r}'\,[\,m\,]^{R_\mathrm{p}^s} \mid \Psi^{R_\mathrm{p}}\,\rangle \qquad . \end{aligned} \tag{1-116}$$

Cette égalité s'interprète facilement : le terme de gauche représente pour un observateur dans le repère $(\mathcal{S})$ l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point M de coordonnées x, y, z avec son spin dans un état bien défini. Pour un observateur dans le repère $(\mathcal{S}')$, le membre de droite représente l'amplitude de trouver la particule au même point de coordonnées x', y', z' avec son spin dans le même état mais vu " transformé ". L'égalité entre ces deux membres traduit le fait que cette amplitude dépend du système physique mais pas du système d'axes.

Exemple 1. On considère un électron dont l'état dans le repère $(\mathcal{S})$ est décrit en représentation $\{\mathbf{r}\}$ par :

$$\langle\, \mathbf{r} \mid \Psi\,\rangle \,=\, (x+iy)\mathrm{e}^{-r/2a} \mid 1/2\ \ 1/2\,\rangle + (x+iy)\mathrm{e}^{-r/2a} \mid 1/2\ \ -1/2\,\rangle$$

où $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ et a est une constante quelconque. Dans cette expression, les deux fonctions caractérisant le spineur s'écrivent :

$$\Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) = \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) = (x+iy)\mathrm{e}^{-r/2a}. \tag{1-117}$$

D'après la formule (1-70a) cet état est état propre de l'opérateur S_x ($\vartheta = \pi/2$ et $\varphi = 0$) :

$$\langle\, \mathbf{r} \mid \Psi \,\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(x+iy) \mid 1/2 \;\; 1/2 \,\rangle_x \qquad .$$

Considérons maintenant le repère obtenu à partir de $(\mathcal{S})$ par une rotation de $\pi/2$ autour de l'axe Oy. Dans le nouveau repère $(\mathcal{S}')$ l'axe Oz' coïncidera avec Ox tandis que l'axe Ox' sera opposé à l'ancien axe Oz. L'état physique de cet électron s'écrit alors :

$$\langle\, \mathbf{r}' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}} \,\rangle = \sum_{m'} \Psi^{R_{\mathrm{p}}}_{m'}(\mathbf{r}') \mid m' \,\rangle \qquad .$$

En remplaçant les valeurs de γ_1 et γ_3 par 0 et γ_2 par $\pi/2$ dans l'opérateur de Wigner pour un spin 1/2, on a (1-107a) :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{R_{\mathrm{p}}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \Psi^{R_{\mathrm{p}}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (x+iy)\mathrm{e}^{-r/2a} \\ (x+iy)\mathrm{e}^{-r/2a} \end{pmatrix}. \tag{1-118}$$

Les *anciennes* coordonnées s'expriment en fonction des nouvelles par (1-9c) :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}. \tag{1-119}$$

On trouve alors :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{R_{\mathrm{p}}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \Psi^{R_{\mathrm{p}}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (z'+iy')\mathrm{e}^{-r/2a} \\ (z'+iy')\mathrm{e}^{-r/2a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}(z'+iy')\mathrm{e}^{-r/2a} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1-120}$$

d'où :

$$\langle\, \mathbf{r}' \mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}} \,\rangle = \sqrt{2}(z'+iy')\mathrm{e}^{-r/2a} \mid 1/2 \;\; 1/2 \,\rangle \qquad . \tag{1-121}$$

Ce résultat était attendu puisque le nouvel axe Oz' est confondu avec l'ancien axe Ox.

Exemple 2. Considérons une particule libre de spin 1/2 ayant son spin dirigé positivement sur l'axe Oz du repère $(\mathcal{S})$. On suppose de plus que cette particule se déplace dans la direction Ox. Pour un observateur dans ce système, l'état physique sera représenté par un ket $\mid \Psi \rangle = \mid \mathbf{k} \rangle \otimes \mid 1/2 \ 1/2 \rangle$, avec $\mid \mathbf{k} \rangle = \mid (k, 0, 0) \rangle$. En représentation $\{\mathbf{r}\}$, nous avons :

$$\langle \mathbf{r} \mid \Psi \rangle = \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \mid 1/2 \ 1/2 \rangle = \mathrm{e}^{ikx} \mid 1/2 \ 1/2 \rangle. \tag{1-122}$$

Dans le nouveau repère obtenu en faisant une rotation de $\pi/2$ autour de Oy, nous avons :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{R_\mathrm{p}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \Psi^{R_\mathrm{p}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ikx} \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{1-123}$$

En utilisant l'égalité (1-119), on a finalement :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{R_\mathrm{p}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \Psi^{R_\mathrm{p}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ikz'} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \mathrm{e}^{ikz'} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \mathrm{e}^{ikz'} \end{pmatrix} \tag{1-124}$$

soit :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' \mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \rangle &= \mathrm{e}^{ikz'} \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \mid 1/2 \ 1/2 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} \mid 1/2 \ -1/2 \rangle \right] \\ &= \mathrm{e}^{ikz'} \mid 1/2 \ -1/2 \rangle_{x'} \quad . \end{aligned} \tag{1-125}$$

(C) Opérateur moment angulaire total

Nous avons vu que par définition l'opérateur de rotation quantique est le produit de deux opérateurs agissant dans deux espaces différents. Nous allons montrer dans ce paragraphe que l'on peut définir le moment cinétique total et que la rotation quantique peut s'exprimer uniquement en fonction de cet opérateur. Pour établir ce résultat, nous allons considérer successivement trois rotations infinitésimales autour des trois axes du repère $(\mathcal{S})$.

Considérons d'abord une rotation autour de l'axe Oz d'un angle $\mathrm{d}\vartheta$. La matrice de rotation de Wigner pour une particule de spin 1/2 et pour une telle transformation s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{1/2}(P) &= \begin{pmatrix} 1 + i\,\mathrm{d}\vartheta/2 & 0 \\ 0 & 1 - i\,\mathrm{d}\vartheta/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta \ \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= I + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta\, S_z. \end{aligned} \tag{1-126}$$

La relation matricielle (1-106a) s'écrit alors :

$$\begin{pmatrix} \Psi^{R_\mathrm{p}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \Psi^{R_\mathrm{p}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \left(I + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta\, S_z \right) \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad . \tag{1-127}$$

On peut aussi exprimer les anciennes coordonnées en fonction des nouvelles :

$$x = x' - \mathrm{d}\vartheta\, y' \;; \qquad y = y' + \mathrm{d}\vartheta\, x' \;; \qquad z = z'. \tag{1-128}$$

En faisant un développement limité on a :

$$\begin{aligned}
\Psi_m(x,y,z) &= \Psi_m(x' - \mathrm{d}\vartheta\, y', y' + \mathrm{d}\vartheta\, x', z') \\
&= \Psi_m(x',y',z') - \mathrm{d}\vartheta\, y' \frac{\partial \Psi_m}{\partial x'}(x',y',z') + \mathrm{d}\vartheta\, x' \frac{\partial \Psi_m}{\partial y'}(x',y',z') \\
&= \Psi_m(x',y',z') + \mathrm{d}\vartheta \left(x' \frac{\partial \Psi_m}{\partial y'}(x',y',z') - y' \frac{\partial \Psi_m}{\partial x'}(x',y',z') \right) \\
&= \Psi_m(x',y',z') + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta \;\; L_{z'}\, \Psi_m(x',y',z')
\end{aligned} \tag{1-129}$$

d'où la relation :

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(x,y,z) \\ \\ \Psi_{-1/2}(x,y,z) \end{pmatrix} &= \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta \begin{pmatrix} L_{z'} & 0 \\ 0 & L_{z'} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(x',y',z') \\ \\ \Psi_{-1/2}(x',y',z') \end{pmatrix} \\
&= \left[\quad I + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta\, L_{z'}\, I \quad \right] \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(x',y',z') \\ \\ \Psi_{-1/2}(x',y',z') \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{1-130}$$

La relation (1-106a) devient :

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \Psi^{R_\mathrm{p}}_{1/2}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi^{R_\mathrm{p}}_{-1/2}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} &= \left(I + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta\, S_z \right) \left(I + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta\, L_{z'}\, I \right) \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(x',y',z') \\ \\ \Psi_{-1/2}(x',y',z') \end{pmatrix} \\
&= \left(I + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta\, (\, L_{z'}\, I + S_{z'}) \right) \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(x',y',z') \\ \\ \Psi_{-1/2}(x',y',z') \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{1-131}$$

Si on définit l'opérateur $J_{z'}$ par :

$$J_{z'} \;=\; L_{z'}\, I \;+\; S_{z'} \tag{1-132}$$

on a :

$$[\, \Psi^{R_\mathrm{p}} \,]\, (\, \mathbf{r}' \,) \;=\; \left(I + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta\, J_{z'} \right) \; [\, \Psi \,]\, (\, \mathbf{r}' \,) \qquad . \tag{1-133}$$

Dans une rotation finie d'angle ϑ, on aura :

$$[\, \Psi^{R_\mathrm{p}} \,]\, (\, \mathbf{r} \,) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vartheta J_z} \; [\, \Psi \,]\, (\, \mathbf{r} \,) \tag{1-134}$$

ou encore :

$$| \Psi^{R_p} \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\vartheta J_z} \ | \Psi \rangle. \tag{1-135}$$

Considérons maintenant une rotation autour de l'axe Oy d'un angle $d\vartheta$. Dans cette seconde transformation, nous aurons :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{1/2}(P) &= \begin{pmatrix} 1 & d\vartheta/2 \\ -d\vartheta/2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{i}{\hbar} d\vartheta \ \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ &= I + \frac{i}{\hbar} d\vartheta \, S_y. \end{aligned} \tag{1-136}$$

Les anciennes coordonnées s'expriment en fonction des nouvelles par :

$$x = x' + d\vartheta \, z' \ ; \qquad y = y' \ ; \qquad z = z' - d\vartheta \, x' \tag{1-137}$$

ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} \Psi_m(x,y,z) &= \Psi_m(x' + d\vartheta \, z', y', z' - d\vartheta \, x') \\ &= \Psi_m(x', y', z') + d\vartheta \, z' \frac{\partial \Psi_m}{\partial x'}(x', y', z') - d\vartheta \, x' \frac{\partial \Psi_m}{\partial z'}(x', y', z') \\ &= \Psi_m(x', y', z') + d\vartheta \ \left(z' \frac{\partial \Psi_m}{\partial x'}(x', y', z') - x' \frac{\partial \Psi_m}{\partial z'}(x', y', z') \right) \\ &= \Psi_m(x', y', z') + \frac{i}{\hbar} d\vartheta \ \ L_{y'} \Psi_m(x', y', z'). \end{aligned} \tag{1-138}$$

Par un calcul analogue au cas précédent, nous avons :

$$[\Psi^{R_p}](\mathbf{r}') = \left(I + \frac{i}{\hbar} d\vartheta \, J_{y'} \right) \ [\Psi](\mathbf{r}') \tag{1-139}$$

avec :

$$J_{y'} = L_{y'} I + S_{y'} \qquad . \tag{1-140}$$

Dans la rotation finie, on aura le résultat :

$$[\Psi^{R_p}](\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\vartheta J_y} [\Psi](\mathbf{r}) \tag{1-141}$$

ou d'une manière équivalente :

$$| \Psi^{R_p} \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\vartheta J_y} \ | \Psi \rangle \qquad . \tag{1-142}$$

Il est clair qu'une rotation infinitésimale autour de l'axe Ox conduit aux deux relations suivantes :

$$[\Psi^{R_p}](\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\vartheta J_x} [\Psi](\mathbf{r}) \tag{1-143}$$

et

$$| \Psi^{R_p} \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\vartheta J_x} \ | \Psi \rangle \tag{1-144}$$

avec :

$$J_x = L_x I + S_x \qquad . \tag{1-145}$$

D'une manière générale, l'opérateur de rotation quantique pourra s'exprimer en fonction du moment cinétique total :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{1-146}$$

soit en fonction des angles d'Euler :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 J_z}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 J_z} \tag{1-147}$$

soit en fonction d'un vecteur unitaire et d'un axe :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma\mathbf{u}\cdot\mathbf{J}} \quad . \tag{1-148}$$

Tout ket transformé s'écrit en fonction des opérateurs ci-dessus :

$$\mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}} \rangle = \hat{R}_{\mathrm{p}} \mid \Psi \rangle\cdot \tag{1-149}$$

Le transformé d'un opérateur quelconque agissant dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{E} = \mathcal{E}^{\mathbf{r}} \otimes \mathcal{E}^{s}$ sera défini d'une manière naturelle par :

$$\hat{O}^{R_{\mathrm{p}}} = \hat{R}_{\mathrm{p}}\hat{O}\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\dagger}. \tag{1-150}$$

5. Transformation d'un champ de vecteurs

5.1. Base cartésienne

Soit dans le repère $(\mathcal{S})$ un vecteur $\mathbf{V}$ défini en tout point de l'espace M de coordonnées x, y, z par ses composantes cartésiennes supposées réelles $V_x(x,y,z), V_y(x,y,z)$ et $V_z(x,y,z)$. Dans le repère $(\mathcal{S}')$, ce même vecteur sera défini au même point de coordonnées x', y', z' par ses composantes $V_{x'}^{R_{\mathrm{p}}}(x',y',z')$, $V_{y'}^{R_{\mathrm{p}}}(x',y',z')$, et $V_{z'}^{R_{\mathrm{p}}}(x',y',z')$. On se propose de donner les nouvelles formes analytiques $V_{i'}^{R_{\mathrm{p}}}(x',y',z')$, en fonction de $V_j(x,y,z)$.

On sait exprimer les nouvelles composantes dans le repère $(\mathcal{S})$ en fonction des anciennes dans $(\mathcal{S}')$(*cf.* Éq. (1B-15a)) :

$$\begin{pmatrix} V_{x'}^{R_{\mathrm{p}}}(x',y',z') \\ V_{y'}^{R_{\mathrm{p}}}(x',y',z') \\ V_{z'}^{R_{\mathrm{p}}}(x',y',z') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x(x,y,z) \\ V_y(x,y,z) \\ V_z(x,y,z) \end{pmatrix} \tag{1-151}$$

avec :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}. \tag{1-9c}$$

L'équation (1-151) est l'équivalent des relations (1-18) et (1-106a) valables respectivement pour un champ scalaire et un champ de spineurs. Comme dans le paragraphe précédent, nous allons envisager des rotations infinitésimales.

Considérons pour commencer une rotation d'un angle $\mathrm{d}\vartheta$ autour de l'axe Oz. L'équation (1-151) s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
V_{x'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') &= V_x(x'-\mathrm{d}\vartheta\, y', y'+\mathrm{d}\vartheta\, x', z') + \mathrm{d}\vartheta\, V_y(x'-\mathrm{d}\vartheta\, y', y'+\mathrm{d}\vartheta\, x', z')\\
V_{y'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') &= -\mathrm{d}\vartheta\, V_x(x'-\mathrm{d}\vartheta\, y', y'+\mathrm{d}\vartheta\, x', z') + V_y(x'-\mathrm{d}\vartheta\, y', y'+\mathrm{d}\vartheta\, x', z')\\
V_{z'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') &= V_z(x'-\mathrm{d}\vartheta\, y', y'+\mathrm{d}\vartheta\, x', z'). \qquad (1\text{-}152)
\end{aligned}$$

Au premier ordre nous avons :

$$\begin{aligned}
V_i(x'+\Delta x', y'+\Delta y', z'+\Delta z') = V_i(x',y',z') &+ \Delta x' \frac{\partial V_i}{\partial x'}(x',y',z')\\
&+ \Delta y' \frac{\partial V_i}{\partial y'}(x',y',z') + \Delta z' \frac{\partial V_i}{\partial z'}(x',y',z') \qquad (1\text{-}153)
\end{aligned}$$

avec dans notre cas particulier $\Delta z' = 0$. Les trois composantes se transforment alors suivant :

$$\begin{aligned}
V_{x'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') = V_x(x',y',z') + \mathrm{d}\vartheta \left(x' \frac{\partial V_x}{\partial y'}(x',y',z') - y' \frac{\partial V_x}{\partial x'}(x',y',z') \right)&\\
+ \mathrm{d}\vartheta\, V_y(x',y',z')&
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_{y'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') = V_y(x',y',z') + \mathrm{d}\vartheta \left(x' \frac{\partial V_x}{\partial y'}(x',y',z') - y' \frac{\partial V_x}{\partial x'}(x',y',z') \right)&\\
- \mathrm{d}\vartheta\, V_x(x',y',z')&
\end{aligned}$$

$$V_{z'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') = V_z(x',y',z') + \mathrm{d}\vartheta \left(x' \frac{\partial V_x}{\partial y'}(x',y',z') - y' \frac{\partial V_x}{\partial x'}(x',y',z') \right).$$

Ces relations peuvent encore s'écrire sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} V_{x'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') \\ V_{y'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') \\ V_{z'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') \end{pmatrix} = \left(I + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta (L_{z'} + S_{z'}) \right) \begin{pmatrix} V_x(x',y',z') \\ V_y(x',y',z') \\ V_z(x',y',z') \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}154)$$

l'opérateur $S_{z'}$ étant défini dans cette base par la matrice :

$$S_{z'} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (1\text{-}155)$$

Dans une rotation infinitésimale autour de l'axe Oy nous obtenons un résultat similaire :

$$\begin{pmatrix} V_{x'}^{R_p}(x',y',z') \\ V_{y'}^{R_p}(x',y',z') \\ V_{z'}^{R_p}(x',y',z') \end{pmatrix} = \left(I + \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\vartheta(\,L_{y'} + S_{y'}\,) \right) \begin{pmatrix} V_x(x',y',z') \\ V_y(x',y',z') \\ V_z(x',y',z') \end{pmatrix} \tag{1-156}$$

avec :

$$S_{y'} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{1-157}$$

Enfin pour une rotation infinitésimale autour de l'axe Ox, on obtient :

$$\begin{pmatrix} V_{x'}^{R_p}(x',y',z') \\ V_{y'}^{R_p}(x',y',z') \\ V_{z'}^{R_p}(x',y',z') \end{pmatrix} = \left(I + \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\vartheta(\,L_{x'} + S_{x'}\,) \right) \begin{pmatrix} V_x(x',y',z') \\ V_y(x',y',z') \\ V_z(x',y',z') \end{pmatrix} \tag{1-158}$$

avec :

$$S_{x'} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \tag{1-159}$$

Ces trois matrices obéissent aux règles habituelles de commutation des moments angulaires :

$$\begin{aligned} [S_{x'}, S_{y'}] &= i\hbar\, S_{z'} \\ [S_{y'}, S_{z'}] &= i\hbar\, S_{x'} \\ [S_{z'}, S_{x'}] &= i\hbar\, S_{y'} \end{aligned} \tag{1-160}$$

et de plus

$$S_{x'}^2 + S_{y'}^2 + S_{z'}^2 = 2\hbar^2 \tag{1-161}$$

ce qui correspond à un moment angulaire intrinsèque $s = 1$.

Un tel champ $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ est susceptible de décrire une particule de spin 1. L'état physique peut être représenté par un ket $|\,\Psi\,\rangle$ que l'on écrit :

$$|\,\Psi\,\rangle = \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\; [\Psi_x(\mathbf{r})\;|\;x\,\rangle + \Psi_y(\mathbf{r})\;|\;y\,\rangle + \Psi_z(\mathbf{r})\;|\;z\,\rangle] \tag{1-162}$$

avec :

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = V_i(\mathbf{r}) \qquad i = x,\, y,\, z \tag{1-163}$$

et où les kets $|\;x\,\rangle$, $|\;y\,\rangle$, $|\;z\,\rangle$ caractérisent l'état interne du champ. En représentation $\{\mathbf{r}\}$, nous avons :

$$\langle\,\mathbf{r}\;|\;\Psi\,\rangle = \Psi_x(\mathbf{r})\;|\;x\,\rangle + \Psi_y(\mathbf{r})\;|\;y\,\rangle + \Psi_z(\mathbf{r})\;|\;z\,\rangle \qquad . \tag{1-164}$$

Le produit scalaire d'un bra $\langle\,\Phi\;|$ et d'un ket $|\;\Psi\,\rangle$ s'écrit en fonction des composantes cartésiennes de la manière suivante :

$$\langle\,\Phi\;|\;\Psi\,\rangle = \sum_i \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\; \Phi_i^*(\mathbf{r})\,\Psi_i(\mathbf{r}) \qquad . \tag{1-165}$$

Les opérateurs S_x, S_y, S_z agissant sur les kets $|\ x\,\rangle, |\ y\,\rangle, |\ z\,\rangle$ donnent les relations suivantes (d'après (1-155), (1-157) et (1-159)) :

$$\begin{array}{lll} S_x \mid x\,\rangle = 0\,; & S_x \mid y\,\rangle = i\hbar \mid z\,\rangle\,; & S_x \mid z\,\rangle = -i\hbar \mid y\,\rangle\,; \\ S_y \mid x\,\rangle = -i\hbar \mid z\,\rangle\,; & S_y \mid y\,\rangle = 0\,; & S_y \mid z\,\rangle = i\hbar \mid x\,\rangle\,; \\ S_z \mid x\,\rangle = i\hbar \mid y\,\rangle\,; & S_z \mid y\,\rangle = -i\hbar \mid x\,\rangle\,; & S_z \mid z\,\rangle = 0. \end{array} \tag{1-166}$$

5.2. Base standard

Comme nous le voyons la base cartésienne ($\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$) n'est pas très bien adaptée à une description simple surtout en ce qui concerne la partie intrinsèque puisque l'opérateur S_z n'est pas diagonal. Nous savons (voir le complément B) que la base sphérique permet aussi une décomposition de tout vecteur. En particulier, on a (1B-10) :

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \sum_{\nu=-1}^{1} V_\nu^*(x,y,z)\,\mathbf{e}_\nu \\ &= \sum_{\nu'=-1}^{1} V_{\nu'}^{R_\mathrm{P}^*}(x',y',z')\,\mathbf{e}'_{\nu'} \end{aligned} \tag{1-167}$$

et d'après (1B-19) :

$$V_{\nu'}^{R_\mathrm{P}^*}(x',y',z') \;=\; \sum_{\nu=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{\nu'\nu}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\;V_\nu^*(x,y,z). \tag{1-168}$$

Comme dans le cas de la base cartésienne, nous allons considérer successivement trois rotations infinitésimales autour des axes cartésiens. Nous utiliserons par la suite les formules au premier ordre :

$$\begin{aligned} V_\nu^*(x,y,z) &= V_\nu^*(x'+\Delta x', y'+\Delta y', z'+\Delta z') \\ &= V_\nu^*(x',y',z') \\ &\quad + \Delta x'\frac{\partial V_\nu^*}{\partial x'}(x',y',z') \;+\; \Delta y'\frac{\partial V_\nu^*}{\partial y'}(x',y',z') \;+\; \Delta z'\frac{\partial V_\nu^*}{\partial z'}(x',y',z'). \end{aligned} \tag{1-169}$$

Dans une rotation de $\mathrm{d}\gamma_1$ autour de l'axe Oz, la matrice de Wigner pour un spin égal à 1 a pour éléments

$$\mathcal{D}^{(1)} \;\approx\; \begin{pmatrix} 1+i\mathrm{d}\gamma_1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1-i\mathrm{d}\gamma_1 \end{pmatrix} \tag{1-170}$$

et :

$$\Delta x' \;=\; -\mathrm{d}\gamma_1 y'\,; \quad \Delta y' \;=\; \mathrm{d}\gamma_1 x'\,; \quad \Delta z' \;=\; 0. \tag{1-171}$$

On a donc :

$$V_1^{R_p^*}(x',y',z') \;=\; (1+i\mathrm{d}\gamma_1)\,V_1^*(x,y,z) \;=\; \left[1+\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_1\,(\,L_{z'}+\hbar\,)\right]\,V_1^*(x',y',z')$$
$$V_0^{R_p^*}(x',y',z') \;=\; V_0^*(x,y,z) \;=\; \left[\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_1\,L_{z'}\right]\,V_0^*(x',y',z')$$
$$V_{-1}^{R_p^*}(x',y',z') \;=\; (1-i\mathrm{d}\gamma_1)\,V_{-1}^*(x,y,z) \;=\; \left[1+\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_1\,(\,L_{z'}-\hbar\,)\right]\,V_{-1}^*(x',y',z')$$

ou encore :

$$\begin{pmatrix} V_1^{R_p^*}(x',y',z') \\ \\ V_0^{R_p^*}(x',y',z') \\ \\ V_{-1}^{R_p^*}(x',y',z') \end{pmatrix} \;=\; \left(I \;+\; \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_1(\,L_{z'} \;+\; S_{z'}\,)\right)\begin{pmatrix} V_1^*(x',y',z') \\ \\ V_0^*(x',y',z') \\ \\ V_{-1}^*(x',y',z') \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}172)$$

avec :

$$S_{z'} \;=\; \hbar\,\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (1\text{-}173)$$

Dans une rotation de $\mathrm{d}\gamma_2$ autour de l'axe Oy, la matrice de Wigner pour un spin égal à 1 a pour éléments

$$\mathcal{D}^{(1)} \;\approx\; \begin{pmatrix} 1 & \frac{\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}} & 0 \\ \\ \frac{-\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}} \\ \\ 0 & \frac{-\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}174)$$

et :

$$\Delta x' \;=\; \mathrm{d}\gamma_2 z'\,; \quad \Delta y' \;=\; 0\,; \quad \Delta z' \;=\; -\mathrm{d}\gamma_2 x' \qquad (1\text{-}175)$$

ce qui entraîne :

$$\begin{aligned} V_1^{R_p^*}(x',y',z') &= V_1^*(x,y,z) \;+\; \frac{\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}}\,V_0^*(x,y,z) \\ &= \left(1+\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2\,L_{y'}\right)V_1^*(x',y',z') \;+\; \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma_2\,\left(\frac{-i\hbar}{\sqrt{2}}\right)V_0^*(x',y',z') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V_0^{R_p^*}(x',y',z') &= \frac{-\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}}\,V_1^*(x,y,z) \;+\; V_0^*(x,y,z) \;+\; \frac{\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}}\,V_{-1}^*(x,y,z) \\ &= \left[1+\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2\,L_{y'}\right]\,V_0^*(x',y',z') \\ &\quad + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma_2\,\left(\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\right)V_1^*(x',y',z') \;+\; \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma_2\,\left(\frac{-i\hbar}{\sqrt{2}}\right)V_{-1}^*(x',y',z') \end{aligned}$$

$$V_{-1}^{R_{\mathrm{p}}^*}(x',y',z') = \frac{-\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}}\, V_0^*(x,y,z) \;+\; V_{-1}^*(x,y,z)$$
$$= \left[1+\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2\, L_{y'}\right]\, V_{-1}^*(x',y',z') \;+\; \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma_2\, \left(\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\right) V_0^*(x',y',z').$$

Soit :

$$\begin{pmatrix} V_1^{R_{\mathrm{p}}^*}(x',y',z') \\ \\ V_0^{R_{\mathrm{p}}^*}(x',y',z') \\ \\ V_{-1}^{R_{\mathrm{p}}^*}(x',y',z') \end{pmatrix} \;=\; \left(I \;+\; \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2(\,L_{y'} \;+\; S_{y'}\,) \right) \begin{pmatrix} V_1^*(x',y',z') \\ \\ V_0^*(x',y',z') \\ \\ V_{-1}^*(x',y',z') \end{pmatrix} \tag{1-176}$$

avec :

$$S_{y'} \;=\; \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \tag{1-177}$$

Dans une rotation de $\mathrm{d}\gamma_2$ autour de l'axe Ox, la matrice de Wigner pour un spin égal à 1 a pour éléments (voir le complément C)

$$\mathcal{D}^{(1)} \;\approx\; \begin{pmatrix} 1 & \frac{i\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}} & 0 \\ \\ \frac{i\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{i\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}} \\ \\ 0 & \frac{i\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix} \tag{1-178}$$

et :

$$\varDelta x' \;=\; 0\,; \quad \varDelta y' \;=\; -\mathrm{d}\gamma_2 z'\,; \quad \varDelta z' \;=\; \mathrm{d}\gamma_2 y'. \tag{1-179}$$

On a donc :

$$V_1^{R_{\mathrm{p}}^*}(x',y',z') = V_1^*(x,y,z) \;+\; i\frac{\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}}\, V_0^*(x,y,z)$$
$$= \left(1+\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2\, L_{x'}\right) V_1^*(x',y',z') \;+\; \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma_2\, \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\right) V_0^*(x',y',z')$$

$$V_0^{R_{\mathrm{p}}^*}(x',y',z') = \frac{i\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}}\, V_1^*(x,y,z) \;+\; V_0^*(x,y,z) \;+\; \frac{i\mathrm{d}\gamma_2}{\sqrt{2}}\, V_{-1}^*(x,y,z)$$
$$= \left[1+\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2\, L_{x'}\right]\, V_0^*(x',y',z') \;+\; \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma_2\, \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\right) V_1^*(x',y',z')$$
$$+\; \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma_2\, \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\right) V_{-1}^*(x',y',z')$$

$$V_{-1}^{R_p^*}(x',y',z') = \frac{\mathrm{id}\gamma_2}{\sqrt{2}}\, V_0^*(x,y,z) \,+\, V_{-1}^*(x,y,z)$$
$$= \left[1 + \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2\, L_{x'}\right] V_{-1}^*(x',y',z') \,+\, \frac{i}{\mathrm{d}\gamma_2}\,\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\right) V_0^*(x',y',z').$$

Soit :

$$\begin{pmatrix} V_1^{R_p^*}(x',y',z') \\ V_0^{R_p^*}(x',y',z') \\ V_{-1}^{R_p^*}(x',y',z') \end{pmatrix} \;=\; \left(I \,+\, \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2(\, L_{x'} \,+\, S_{x'}\,)\right) \begin{pmatrix} V_1^*(x',y',z') \\ V_0^*(x',y',z') \\ V_{-1}^*(x',y',z') \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}180)$$

avec :

$$S_{x'} \;=\; \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (1\text{-}181)$$

Dans la base où l'opérateur S_z est diagonal, on peut exprimer l'état d'une particule de spin égal à 1 d'une manière analogue à celui d'une particule de spin 1/2 :

$$|\; \Psi \,\rangle \;=\; \sum_{m=-1}^{1} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \;|\; \mathbf{r}\; m \,\rangle\, \Psi_m(\mathbf{r}) \qquad . \qquad (1\text{-}182)$$

Dans cette expression, les composantes Ψ_m du champ sont égales aux *complexes conjuguées* des composantes standard :

$$\Psi_m(\mathbf{r}) \;=\; V_m^*(\mathbf{r}) \qquad m = -1, 0, 1. \qquad (1\text{-}183)$$

On pourra définir le produit scalaire d'un bra $\langle\, \Phi \;|$ et d'un ket $|\; \Psi \,\rangle$ comme pour une particule de spin 1/2 en fonction des composantes du champ :

$$\langle\, \Phi \;|\, \Psi \,\rangle \;=\; \sum_m \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\; \Phi_m^*(\mathbf{r})\, \Psi_m(\mathbf{r}) \qquad . \qquad (1\text{-}184)$$

En représentation $\{\mathbf{r}\}$, on a :

$$\langle\, \mathbf{r} \;|\, \Psi \,\rangle = \sum_m \Psi_m(\mathbf{r}) \;|\; 1\; m \,\rangle$$
$$= \Psi_1(\mathbf{r}) \;|\; 1 \;\; 1 \,\rangle \,+\, \Psi_0(\mathbf{r}) \;|\; 1 \;\; 0 \,\rangle \,+\, \Psi_{-1}(\mathbf{r}) \;|\; 1 \;\; -1 \,\rangle \qquad . \qquad (1\text{-}185)$$

Remarque. On peut retrouver le résultat précédent d'une autre manière. Il suffit de diagonaliser la matrice de l'opérateur S_z donnée dans la base $|\; x \,\rangle$, $|\; y \,\rangle$, $|\; z \,\rangle$ (Éq. (1-155)). On trouve trois valeurs propres distinctes -1, 0 et 1 avec les vecteurs propres respectifs :

$$|\; -1 \,\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|\; x \,\rangle - i \;|\; y \,\rangle\,]$$
$$|\; 0 \,\rangle = |\; z \,\rangle$$
$$|\; 1 \,\rangle \;=\; \frac{-1}{\sqrt{2}}[\,|\; x \,\rangle + i \;|\; y \,\rangle\,]$$

ce qui donne en inversant ces relations (1B-8) :

$$\begin{aligned}
\mid x\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid -1\,\rangle - \mid 1\,\rangle\,) \\
\mid y\,\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\mid 1\,\rangle + \mid -1\,\rangle\,) \\
\mid z\,\rangle &= \mid 0\,\rangle.
\end{aligned}$$

En remplaçant alors dans le développement (1-162), on retrouve le résultat (1-185).

La loi de transformation des composantes que nous avons étudiée auparavant s'exprime aussi comme pour une particule de spin $1/2$: dans le repère $(\mathcal{S}')$, nous aurons une relation analogue à (1-185) :

$$\langle \mathbf{r}' \mid \Psi^{R_\mathrm{p}} \,\rangle \;=\; \sum_{m'=-1}^{1} \Psi_{m'}^{R_\mathrm{p}}(\mathbf{r}') \;\mid 1\; m'\,\rangle \tag{1-186}$$

avec ((1-168), (1-183)) :

$$\Psi_{m'}^{R_\mathrm{p}}(x',y',z') \;=\; \sum_{m=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\Psi_m(x,y,z) \qquad . \tag{1-187}$$

Cette relation s'écrit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \Psi_1^{R_\mathrm{p}}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_0^{R_\mathrm{p}}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1}^{R_\mathrm{p}}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{R}_\mathrm{p}^{s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \\ \Psi_0(\mathbf{r}) \\ \\ \Psi_{-1}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \tag{1-188}$$

avec $s = 1$. On peut aussi l'écrire sous la forme d'un spineur à 3 composantes :

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{p}}\right](\mathbf{r}') \;=\; \left(\hat{R}_\mathrm{p}^{s}\right)\,\left[\Psi\right](\mathbf{r}) \qquad . \tag{1-189}$$

Considérons maintenant une des rotations antérieures, par exemple celle conduisant à la relation (1-180); avec (1-183), on a :

$$\begin{pmatrix} \Psi_1^{R_\mathrm{p}}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_0^{R_\mathrm{p}}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1}^{R_\mathrm{p}}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} I \;+\; \dfrac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma_2(\,L_{x'}\;I \;+\; S_{x'}\,) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_0(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \tag{1-190}$$

ou encore :

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{p}}\right](\mathbf{r}') = \left(I \;+\; \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma_2\,J_{x'}\right)\;\left[\Psi\right](\mathbf{r}') \tag{1-191}$$

en posant :

$$J_{x'} \;=\; L_{x'}I \;+\; S_{x'} \qquad .$$

Dans une rotation finie, ce résultat devient :

$$\left[\Psi^{R_{\mathrm{p}}}\right](\mathbf{r}') = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_{x'}} \left[\Psi\right](\mathbf{r}') \qquad . \tag{1-192}$$

D'une manière générale, l'opérateur de rotation quantique pourra s'exprimer en fonction du moment cinétique total :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \qquad . \tag{1-193}$$

Par exemple, en fonction des angles d'Euler :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 J_z} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 J_z} \qquad . \tag{1-194}$$

Les deux opérateurs **L** et **S** agissent dans des espaces différents et commutent. L'opérateur moment angulaire orbital **L** traduit le changement de forme analytique lorsque dans chaque composante du champ on remplace les anciennes coordonnées en fonction des nouvelles ; cet opérateur est diagonal. Par contre **S**, spin intrinsèque du champ, mélange les différentes composantes. Il est clair que l'opérateur de rotation peut aussi s'écrire :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}} = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 S_z} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 S_y} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 S_z}\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_z} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 L_y} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_z} \qquad . \tag{1-195}$$

Tout ket transformé s'écrit en fonction des opérateurs ci-dessus :

$$\mid \Psi^{R_{\mathrm{p}}} \rangle = \hat{R}_{\mathrm{p}} \mid \Psi \rangle \qquad . \tag{1-196}$$

Le transformé d'un opérateur quelconque agissant dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{E} = \mathcal{E}^{\mathbf{r}} \otimes \mathcal{E}^{s}$ sera défini par :

$$\hat{O}^{R_{\mathrm{p}}} = \hat{R}_{\mathrm{p}} \hat{O} \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\dagger}. \tag{1-197}$$

Compléments au chapitre 1

A. Moment angulaire orbital

Les opérateurs $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$ peuvent être considérés comme les composantes de l'opérateur position $\mathbf{R}$. De même, $\hat{P}_x$, $\hat{P}_y$ et $\hat{P}_z$ sont les composantes de l'impulsion $\mathbf{P}$. Si on définit le commuteur de deux opérateurs A et B par :

$$[A, B] = AB - BA \tag{1A-1}$$

alors on a les relations de commutation :

$$[R_k, R_l] = 0 \tag{1A-2}$$

avec :

$$R_1 = \hat{X}; \qquad R_2 = \hat{Y}; \qquad R_3 = \hat{Z}. \tag{1A-3}$$

De même avec une notation similaire :

$$[P_k, P_l] = 0. \tag{1A-4a}$$

Par contre les commutateurs entre les composantes de $\mathbf{R}$ et $\mathbf{P}$ donnent :

$$[R_k, P_l] = i\hbar\,\delta_{kl}. \tag{1A-4b}$$

Le moment cinétique peut alors être défini comme en mécanique classique par :

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}.$$

Ses composantes sont données par les relations suivantes :

$$L_x \equiv \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_y \equiv \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$L_z \equiv \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{1A-5}$$

Elles vérifient les relations de commutation :

$$
\begin{aligned}
[\,L_x\,,L_y\,] &= L_x\,L_y - L_y\,L_x = i\,\hbar\,L_z \\
[\,L_y\,,L_z\,] &= L_y\,L_z - L_z\,L_y = i\,\hbar\,L_x \\
[\,L_z\,,L_x\,] &= L_z\,L_x - L_x\,L_z = i\,\hbar\,L_y.
\end{aligned}
\tag{1A-6}
$$

Le développement au deuxième ordre de l'opérateur de rotation en fonction des angles d'Euler nécessite le calcul des produits $L_i\,L_j$ où i et j représentent y ou z. En utilisant les relations (1A-5) on obtient :

$$
\begin{aligned}
L_yL_z &= -\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial y} + zx\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - zy\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2\frac{\partial^2}{\partial z\partial y} + xy\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}\right) \\
L_zL_y &= -\hbar^2\left(xz\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} - x^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} - yz\frac{\partial^2}{\partial x^2} + y\frac{\partial}{\partial z} + yx\frac{\partial^2}{\partial x\partial z}\right) \\
{L_y}^2 &= -\hbar^2\left(z^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2xz\frac{\partial^2}{\partial x\partial z} - z\frac{\partial}{\partial z} - x\frac{\partial}{\partial x}\right) \\
{L_z}^2 &= -\hbar^2\left(x^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2xy\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} - x\frac{\partial}{\partial x} - y\frac{\partial}{\partial y}\right)\cdot
\end{aligned}
\tag{1A-7}
$$

Les opérateurs L_x, L_y et L_z peuvent aussi s'exprimer en fonction des angles polaire ϑ et azimutal φ :

$$
\begin{aligned}
L_x &= i\hbar\left(\sin\varphi\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\,\cos\varphi\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
L_y &= i\hbar\left(-\cos\varphi\,\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\,\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
L_z &= -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\cdot
\end{aligned}
\tag{1A-8}
$$

L'opérateur $\mathbf{L}^2$ s'écrit alors :

$$
\mathbf{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)
\tag{1A-9}
$$

et les opérateurs L_- et L_+ deviennent :

$$
\begin{aligned}
L_- = L_x - iL_y &= \hbar\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
L_+ = L_x + iL_y &= \hbar\,\mathrm{e}^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot
\end{aligned}
\tag{1A-10}
$$

B. Composantes standard d'un vecteur

B.1. Définitions

Dans la base orthonormée habituelle, tout vecteur s'écrit :

$$\mathbf{V} = V_x \mathbf{e}_x + V_y \mathbf{e}_y + V_z \mathbf{e}_z \tag{1B-1}$$

les vecteurs de base étant orthonormés :

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{i\,j} \quad i, j = x, y, x \tag{1B-2}$$

et les composantes V_x, V_y, V_z sont données par :

$$V_x = \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{V}\,, \qquad V_y = \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{V}\,, \qquad V_z = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{V} \qquad . \tag{1B-3}$$

Le produit scalaire de deux vecteurs quelconques $\mathbf{V}$ et $\mathbf{W}$ devient :

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{W} = V_x\, W_x + V_y\, W_y + V_z\, W_z. \tag{1B-4}$$

Il existe une autre base particulièrement intéressante. Elle est définie par les vecteurs sphériques $\mathbf{e}_\nu$, les indices ν prenant les valeurs -1, 0, ou 1 tels que :

$$\mathbf{e}_1 = \frac{-1}{\sqrt{2}}\,(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)\,, \qquad \mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_z\,, \qquad \mathbf{e}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y) \tag{1B-5a}$$

et inversement :

$$\mathbf{e}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\mathbf{e}_{-1} - \mathbf{e}_1)\,, \qquad \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_0\,, \qquad \mathbf{e}_y = \frac{i}{\sqrt{2}}\,(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_{-1}). \tag{1B-5b}$$

La définition de ces vecteurs entraîne les propriétés suivantes :

$$\mathbf{e}_\nu^* = (-1)^\nu \mathbf{e}_{-\nu} \tag{1B-6}$$

et

$$\mathbf{e}_\nu^* \cdot \mathbf{e}_\mu = (-1)^\nu\ \mathbf{e}_{-\nu} \cdot \mathbf{e}_\mu = \delta_{\nu\,\mu} \tag{1B-7a}$$
$$\mathbf{e}_\nu \cdot \mathbf{e}_\mu = (-1)^\nu\ \delta_{\nu\,-\mu} \tag{1B-7b}$$

Composantes standard. On définit les composantes standard V_ν d'un vecteur par :

$$V_1 = \frac{-1}{\sqrt{2}}\,(\,V_x + iV_y\,)\,; \qquad V_0 = V_z\,; \qquad V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,V_x - iV_y\,) \tag{1B-8a}$$

et réciproquement :

$$V_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,V_{-1} - V_1\,)\,; \qquad V_z = V_0\,; \qquad V_y = \frac{i}{\sqrt{2}}\,(\,V_1 + V_{-1}\,). \tag{1B-8b}$$

Les composantes standard vérifient aussi les relations :

$$V_\nu^* = (-1)^\nu V_{-\nu} \qquad . \tag{1B-9}$$

Le vecteur $\mathbf{V}$ s'écrit alors :

$$\mathbf{V} = \sum_{\nu=-1}^{1} V_\nu \mathbf{e}_\nu^* = \sum_{\nu=-1}^{1} (-1)^\nu V_\nu \mathbf{e}_{-\nu} = \sum_{\nu=-1}^{1} V_\nu^* \mathbf{e}_\nu \qquad . \tag{1B-10}$$

Il faut remarquer que le développement d'un vecteur quelconque fait intervenir les composantes standard avec les complexes conjugués des vecteurs sphériques et réciproquement. Les valeurs V_ν peuvent être obtenues par :

$$V_\nu = \mathbf{e}_\nu \cdot \mathbf{V} \qquad . \tag{1B-11}$$

Le produit scalaire de deux vecteurs $\mathbf{V}$ et $\mathbf{W}$ devient :

$$\mathbf{V}\cdot\mathbf{W} = \sum_{\nu=-1}^{1} (-1)^\nu V_\nu W_{-\nu} = \sum_{\nu=-1}^{1} (-1)^\nu V_{-\nu} W_\nu \qquad . \tag{1B-12}$$

B.2. Transformation par rotation

Dans le repère $(\mathcal{S}')$ le même vecteur $\mathbf{V}$ s'écrit

$$\mathbf{V}' \equiv \mathbf{V} = V'_{x'}\mathbf{e'}_{x'} + V'_{y'}\mathbf{e'}_{y'} + V'_{z'}\mathbf{e'}_{z'} \tag{1B-13}$$

avec :

$$V'_{x'} = \mathbf{e'}_{x'}\cdot\mathbf{V}\,, \qquad V'_{y'} = \mathbf{e'}_{y'}\cdot\mathbf{V}\,, \qquad V'_{z'} = \mathbf{e'}_{z'}\cdot\mathbf{V} \qquad . \tag{1B-14}$$

Les lois de transformation des vecteurs unitaires sont données par les relations (1-8) que nous rappelons ici :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e'}_{x'} \\ \mathbf{e'}_{y'} \\ \mathbf{e'}_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \tag{1-8}$$

Les lois de transformation des coordonnées cartésiennes s'expriment par des relations analogues à (1-9a) et (1-9c) :

$$\begin{pmatrix} V'_{x'} \\ V'_{y'} \\ V'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \tag{1B-15a}$$

et

$$\begin{pmatrix} V_x \\ \\ V_y \\ \\ V_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} \\ \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32} \\ \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V'_{x'} \\ \\ V'_{y'} \\ \\ V'_{z'} \end{pmatrix} . \qquad \text{(1B-15b)}$$

Nous allons voir maintenant comment se transforment les composantes standard. Prenons le cas de V_1 :

$$V_1 \;=\; \frac{-1}{\sqrt{2}}\,(\,V_x + iV_y\,).$$

D'après la relation (1B-15b) :

$$\begin{aligned} V_1 = \frac{-1}{\sqrt{2}}\,\big[\;&(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\,V'_{x'} \;+\; \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\,V'_{y'} + \;\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\,V'_{z'}) \\ &+\; i\,(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\,V'_{x'} \;+\; \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\,V'_{y'} + \;\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}\,V'_{z'})\,\big]. \end{aligned}$$

Dans le repère $(\mathcal{S}')$ on a des relations entre les coordonnées cartésiennes et standard analogues à celles données par les égalités (1B-8a, 1B-8b). C'est-à-dire :

$$\begin{aligned} V_1 =& \frac{-1}{\sqrt{2}}\big(\;\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}\;\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,V'_{-1} - V'_1\,) + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}\;\frac{i}{\sqrt{2}}\,(\,V'_1 + V'_{-1}\,) + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\,V'_0 \\ &+ i[\;\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}\;\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,V'_{-1} - V'_1\,) + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}\;\frac{i}{\sqrt{2}}\,(\,V'_1 + \hat{V}'_{-1}\,) + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31}\,V'_0\;]\;\big) \\ =& \left[\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}}{2} + i\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}}{2}\right]\;V'_1 \\ &- \left[\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,31} + \;i\,\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,32}}{\sqrt{2}}\right]\;V'_0 \\ &+ \left[\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}}{2} - i\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}}{2}\right]\;V'_{-1} \end{aligned} \qquad \text{(1B-16)}$$

mais :

$$\begin{array}{rl} \text{(i)} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} \;+\; \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} = (\,1 + \cos\gamma_2\,)\;\cos(\gamma_3 + \gamma_1\,) \\ \text{(ii)} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} \;-\; \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} = (\,1 + \cos\gamma_2\,)\;\sin(\gamma_3 + \gamma_1\,) \\ \text{(iii)} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} \;-\; \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} = (\,1 - \cos\gamma_2\,)\;\cos(\gamma_3 - \gamma_1\,) \\ \text{(iv)} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} \;+\; \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} = (\,1 - \cos\gamma_2\,)\;\sin(\gamma_3 - \gamma_1\,) \end{array}$$

d'où (voir le complément C) :

$$V_1 \;=\; \mathcal{D}^{(1)}_{1\,1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,V'_1 \;+\; \mathcal{D}^{(1)}_{0\,1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,V'_0 + \mathcal{D}^{(1)}_{-1\,1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,V'_{-1} \qquad \text{(1B-17)}$$

et en général la loi de transformation est donnée par :

$$V_\nu \;=\; \sum_{\nu'=-1}^{1}\;\mathcal{D}^{(1)}_{\nu'\,\nu}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,V'_{\nu'} \qquad . \qquad \text{(1B-18a)}$$

Cette relation est l'analogue pour les composantes standard de l'équation (1B-15b) : on obtient les *anciennes* composantes en fonction des nouvelles.

On peut inverser la relation (1B-18a) pour avoir les nouvelles coordonnées en fonction des anciennes :

$$V'_{\nu'} = \sum_{\nu=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)^*}_{\nu'\,\nu}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\, V_\nu \qquad . \tag{1B-18b}$$

Remarque importante. En comparant d'une part les relations (1-8), (1B-15a), (1B-15b) qui expriment que les lois de transformation des vecteurs unitaires sont les mêmes que celles des composantes cartésiennes et d'autre part les relations (1B-5) et (1B-8) qui montrent que la correspondance entre grandeurs cartésiennes et standard est la même pour les composantes que pour les vecteurs de base, la relation (1B-17) nous permet d'écrire :

$$\mathbf{e}_\nu = \sum_{\nu'=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{\nu'\,\nu}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\, \mathbf{e}'_{\nu'} \tag{1B-19}$$

et inversement :

$$\mathbf{e}'_{\nu'} = \sum_{\nu=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)^*}_{\nu'\,\nu}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\, \mathbf{e}_\nu \qquad . \tag{1B-20}$$

B.3. Produit vectoriel de deux vecteurs

Par définition, les vecteurs de base $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ vérifient les relations suivantes :

$$\begin{aligned} &\mathbf{e}_x \wedge \mathbf{e}_y = \mathbf{e}_z\,; \qquad \mathbf{e}_x \wedge \mathbf{e}_z = -\,\mathbf{e}_y\,; \qquad \mathbf{e}_y \wedge \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_x\,;\\ &\qquad\qquad \mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j = -\,\mathbf{e}_j \wedge \mathbf{e}_i\,; \qquad \mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_i = 0. \end{aligned} \tag{1B-21}$$

En utilisant ces relations et la définition des vecteurs de base sphériques, on obtient :

$$\begin{aligned} &\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_0 = i\,\mathbf{e}_1\,; \qquad \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_{-1} = i\,\mathbf{e}_0\,; \qquad \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_{-1} = i\,\mathbf{e}_{-1}\\ &\qquad\qquad \mathbf{e}_\nu \wedge \mathbf{e}_\mu = -\,\mathbf{e}_\mu \wedge \mathbf{e}_\nu\,; \qquad \mathbf{e}_\nu \wedge \mathbf{e}_\nu = 0. \end{aligned} \tag{1B-22}$$

Si $\mathbf{U}$ et $\mathbf{V}$ sont deux vecteurs quelconques :

$$\mathbf{U} = U_x\mathbf{e}_x + U_y\mathbf{e}_y + U_z\mathbf{e}_z$$

et :

$$\mathbf{V} = V_x\mathbf{e}_x + V_y\mathbf{e}_y + V_z\mathbf{e}_z$$

leur produit vectoriel s'écrit en fonction des composantes cartésiennes :

$$\begin{aligned} \mathbf{W} &= \mathbf{U} \wedge \mathbf{V}\\ &= W_x\,\mathbf{e}_x + W_y\,\mathbf{e}_y + W_z\,\mathbf{e}_z \end{aligned} \tag{1B-23}$$

avec :

$$W_x = U_yV_z - U_zV_y \ ; \quad W_y = U_zV_x - U_xV_z \ ; \quad W_z = U_xV_y - U_yV_x \tag{1B-24}$$

ou en fonction des composantes standard :

$$\mathbf{W} = W_1\,\mathbf{e}_1^* + W_0\,\mathbf{e}_0^* + W_{-1}\,\mathbf{e}_{-1}^* \tag{1B-25}$$

avec :

$$\begin{aligned} W_1 &= \frac{-1}{\sqrt{2}}\,(\,W_x + iW_y\,) = -i\,(U_1V_0 - U_0V_1) \\ W_0 &= W_z = i\,(U_{-1}V_1 - U_1V_{-1}) \\ W_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,W_x - iW_y\,) = -i\,(U_0V_{-1} - U_{-1}V_0). \end{aligned} \tag{1B-26}$$

B.4. Spin intrinsèque et vecteurs de base

Considérons une rotation infinitésimale d'un angle dγ autour de l'axe Ox. D'après les relations (1-8) et (1-13), on a :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \mathrm{d}\gamma \\ 0 & -\mathrm{d}\gamma & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \tag{1B-27}$$

La matrice de rotation s'écrit :

$$1 + \mathrm{d}\gamma \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = 1 + \frac{i\mathrm{d}\gamma}{\hbar} S_x \tag{1B-28a}$$

où l'opérateur S_x est donné sous forme matricielle par la relation :

$$S_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{1-159}$$

ce qui donne :

$$\mathbf{e}'_{x'} = \mathbf{e}_x \ ; \qquad \mathbf{e}'_{y'} = \mathbf{e}_y + \mathrm{d}\gamma\,\mathbf{e}_z \ ; \qquad \mathbf{e}'_{z'} = \mathbf{e}_z - \mathrm{d}\gamma\,\mathbf{e}_y \tag{1B-28b}$$

ou encore :

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{e}_z \\ -\mathbf{e}_y \end{pmatrix} = \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\gamma \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots \\ \dots & S_{i\,j} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \tag{1B-29}$$

Cette relation montre que S_x, agissant sur un des vecteurs quelconques $\mathbf{e}_i$, donne une combinaison linéaire de ces mêmes vecteurs. La lecture des vecteurs *colonnes* de la matrice représentant S_x conduit aux égalités :

$$S_x\,\mathbf{e}_x = 0\,; \qquad S_x\,\mathbf{e}_y = i\hbar\mathbf{e}_z\,; \qquad S_x\,\mathbf{e}_z = -i\hbar\mathbf{e}_y. \tag{1B-30}$$

De même, l'opérateur S_y est donné sous forme matricielle par :

$$S_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1-157}$$

ce qui permet d'écrire :

$$S_y\,\mathbf{e}_x = -i\hbar\mathbf{e}_z\,; \qquad S_y\,\mathbf{e}_y = 0\,; \qquad S_y\,\mathbf{e}_z = i\hbar\mathbf{e}_x\,; \tag{1B-31}$$

enfin, l'opérateur S_z :

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1-155}$$

conduit aux relations :

$$S_z\,\mathbf{e}_x = i\hbar\mathbf{e}_y\,; \qquad S_z\,\mathbf{e}_y = -i\hbar\mathbf{e}_x\,; \qquad S_z\,\mathbf{e}_z = 0. \tag{1B-32}$$

Les relations (1B-30–1B-32) peuvent s'écrire d'une manière condensée :

$$S_x = i\,\hbar\,\mathbf{e}_x \wedge\,; \qquad S_y = i\,\hbar\,\mathbf{e}_y \wedge\,; \qquad S_z = i\,\hbar\,\mathbf{e}_z \wedge \quad . \tag{1B-33}$$

On peut définir S_+ et S_- respectivement par :

$$S_+ = S_x + iS_y\,; \qquad S_0 = S_z\,; \qquad S_- = S_x - iS_y. \tag{1B-34}$$

En utilisant (1B-5b), on trouve :

$$S_+ = -i\,\hbar\,\mathbf{e}_1 \wedge\,; \qquad S_0 = i\,\hbar\,\mathbf{e}_0 \wedge\,; \qquad S_- = i\,\hbar\,\mathbf{e}_{-1} \wedge \quad . \tag{1B-35}$$

Ces opérateurs vérifient alors les relations suivantes :

$$S_+\,\mathbf{e}_1 = 0\,; \qquad S_+\,\mathbf{e}_0 = \hbar\sqrt{2}\,\mathbf{e}_1\,; \qquad S_+\,\mathbf{e}_{-1} = \hbar\sqrt{2}\,\mathbf{e}_0 \tag{1B-36}$$

$$S_-\,\mathbf{e}_1 = \hbar\sqrt{2}\,\mathbf{e}_0\,; \qquad S_-\,\mathbf{e}_0 = \hbar\sqrt{2}\,\mathbf{e}_{-1}\,; \qquad S_-\,\mathbf{e}_{-1} = 0 \tag{1B-37}$$

$$S_0\,\mathbf{e}_1 = \hbar\,\mathbf{e}_1\,; \qquad S_0\,\mathbf{e}_0 = 0\,; \qquad S_0\,\mathbf{e}_{-1} = -\hbar\,\mathbf{e}_{-1} \tag{1B-38}$$

que l'on peut écrire d'une manière condensée :

$$\begin{aligned} S_+\,\mathbf{e}_\nu &= \hbar\sqrt{2-\nu(\nu+1)}\,\mathbf{e}_{\nu+1} \\ S_0\,\mathbf{e}_\nu &= \hbar\,\nu\,\mathbf{e}_\nu \\ S_-\,\mathbf{e}_\nu &= \hbar\sqrt{2-\nu(\nu-1)}\,\mathbf{e}_{\nu-1} \quad . \end{aligned} \tag{1B-39}$$

C. Matrices de Wigner

C.1. Particule de spin 1/2

Matrices de Pauli

Les matrices de Pauli σ_x, σ_y et σ_z sont données explicitement par :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \;;\quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \;;\quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1C-1}$$

Elles vérifient les propriétés suivantes :

$$\sigma_x{}^2 = \sigma_y{}^2 = \sigma_z{}^2 \tag{1C-2}$$

$$\begin{aligned} \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \\ \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y. \end{aligned} \tag{1C-3}$$

Soient **A** et **B** deux vecteurs quelconques qui commutent avec le spin. On peut alors écrire :

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}) &= (\sigma_x A_x + \sigma_y A_y + \sigma_z A_z)(\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z) \\ &= A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z + \sigma_x\sigma_y(A_x B_y - A_y B_x) \\ &\quad + \sigma_x\sigma_z(A_x B_z - A_z B_x) + \sigma_y\sigma_z(A_y B_z - A_z B_y) \\ &= \mathbf{A}\cdot\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{A}\wedge\mathbf{B}) \qquad . \end{aligned} \tag{1C-4}$$

Matrice de Wigner

L'opérateur de rotation pour une particule de spin 1/2 est donné en fonction des matrices de Pauli par :

$$\hat{R}^s_{\mathrm{p}} = \cos\frac{\gamma}{2}\, I + i\,\sin\frac{\gamma}{2}\;\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{u} \qquad . \tag{1-65}$$

En utilisant la forme explicite des matrices de Pauli, on obtient :

– pour une rotation autour de l'axe Ox :

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(P\,;\gamma/Ox) = \begin{pmatrix} \cos(\gamma/2) & i\sin(\gamma/2) \\ i\sin(\gamma/2) & \cos(\gamma/2) \end{pmatrix}; \tag{1C-5}$$

– pour une rotation autour de l'axe Oy :

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(P\,;\gamma/Oy) = \begin{pmatrix} \cos(\gamma/2) & \sin(\gamma/2) \\ -\sin(\gamma/2) & \cos(\gamma/2) \end{pmatrix}; \tag{1C-6}$$

– pour une rotation autour de l'axe Oz :

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(P\,;\gamma/Oz\,) \;=\; \begin{pmatrix} e^{i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma/2} \end{pmatrix}. \tag{1C-7}$$

Enfin, dans une rotation quelconque donnée en fonction des angles d'Euler :

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(P\,;\gamma_3\,,\gamma_2\,,\gamma_1\,) \;=\; \begin{pmatrix} e^{i\gamma_3/2}\,\cos(\gamma_2/2)\,e^{i\gamma_1/2} & e^{i\gamma_3/2}\,\sin(\gamma_2/2)\,e^{-i\gamma_1/2} \\ -e^{-i\gamma_3/2}\,\sin(\gamma_2/2)\,e^{i\gamma_1/2} & e^{-i\gamma_3/2}\,\cos(\gamma_2/2)\,e^{-i\gamma_1/2} \end{pmatrix}. \tag{1C-8}$$

C.2. Particule de spin 1

La forme explicite de la matrice de Wigner pour un spin égal à 1 peut être donnée par la loi de transformation des harmoniques sphériques avec $l = 1$ puisque :

$$Y_1^m(\vartheta,\varphi) \;=\; \sum_{m'=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\; Y_1^{m'}(\vartheta',\varphi') \qquad . \tag{1-32a}$$

D'autre part, tout vecteur $\mathbf{V}$ peut être caractérisé par son module v et ses angles polaire ϑ et azimutal φ. Si les composantes cartésiennes sont données par

$$V_x \;=\; v\,\sin\vartheta\,\cos\varphi\;;\quad V_y \;=\; v\,\sin\vartheta\,\sin\varphi\;;\quad V_z \;=\; v\,\cos\vartheta \tag{1C-9a}$$

les composantes standard définies par (1B-8a) peuvent s'exprimer en fonction des harmoniques sphériques $Y_1^m(\vartheta_v,\varphi_v)$. En définissant par convention $(\vartheta_v,\varphi_v) \equiv (\hat{\mathbf{v}})$, on aura

$$V_m \;=\; v\,\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\;Y_1^m(\hat{\mathbf{v}}) \qquad . \tag{1C-9b}$$

On en déduit que la matrice de Wigner pour une particule de spin égal à 1 a été explicitement donnée dans l'étude de la transformation des composantes standard d'un vecteur. Par exemple, d'après (1B-16), on a

$$\mathcal{D}^{(1)}_{1\,1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \;=\; \frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11}+\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22}}{2} + i\,\frac{\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12}-\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21}}{2} \tag{1C-10}$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,11} \,+\, \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,22} &= (\,1+\cos\gamma_2\,)\,\cos(\gamma_3+\gamma_1\,) \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,12} \,-\, \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\,21} &= (\,1+\cos\gamma_2\,)\,\sin(\gamma_3+\gamma_1\,) \end{aligned} \tag{1C-11}$$

soit :

$$\mathcal{D}^{(1)}_{1\,1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \;=\; e^{i\gamma_3}\,\frac{1+\cos\gamma_2}{2}\,e^{i\gamma_1} \qquad .$$

La matrice complète est donnée par :

$$\mathcal{D}^{(1)}(P\,;\gamma_3\,,\gamma_2\,,\gamma_1\,)=\begin{pmatrix} e^{i\gamma_3}\dfrac{1+\cos\gamma_2}{2}\,e^{i\gamma_1} & e^{i\gamma_3}\dfrac{\sin\gamma_2}{\sqrt{2}} & e^{i\gamma_3}\dfrac{1-\cos\gamma_2}{2}\,e^{-i\gamma_1} \\ -\dfrac{\sin\gamma_2}{\sqrt{2}}\,e^{i\gamma_1} & \cos\gamma_2 & \dfrac{\sin\gamma_2}{\sqrt{2}}\,e^{-i\gamma_1} \\ e^{-i\gamma_3}\dfrac{1-\cos\gamma_2}{2}\,e^{i\gamma_1} & -e^{-i\gamma_3}\dfrac{\sin\gamma_2}{\sqrt{2}} & e^{-i\gamma_3}\dfrac{1+\cos\gamma_2}{2}\,e^{-i\gamma_1} \end{pmatrix}. \tag{1C-12}$$

C.3. Particule de spin quelconque

Les matrices de Wigner dont les éléments sont donnés par :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\;=\;\langle j\,m'\mid e^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 J_z}e^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y}e^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 J_z}\;\mid j\,m\,\rangle \tag{1C-13}$$

ont été calculés par Weyl à partir des représentations irréductibles du groupe $SU(2)$. Nous suivrons ici sa méthode mais auparavant, il faut introduire la définition d'un groupe de transformations et de ses représentations.

Le groupe SU(2) et ses représentations irréductibles

Groupe de Transformations. Soit $\mathcal{G}$ un groupe de transformations quelconques c'est-à-dire tel que :

– si g_1 et g_2 sont deux éléments de $\mathcal{G}$, le produit g_1g_2 appartient à $\mathcal{G}$;

– la loi de composition soit associative ;

– l'élément neutre e appartient à $\mathcal{G}$;

– pour tout élément g de $\mathcal{G}$, il existe un inverse g^{-1} dans $\mathcal{G}$ tel que $gg^{-1} = g^{-1}g\ = e$.

Si à tout élément g du groupe $\mathcal{G}$ on fait correspondre l'opérateur $\hat{O}_g$ agissant dans l'espace $\mathcal{L}$, tel que :

– $\hat{O}_{g_2g_1}\ =\ \hat{O}_{g_2}\hat{O}_{g_1}$;

– $\hat{O}_{g^{-1}}\ =\ \hat{O}_g^{-1}$;

– $\hat{O}_e\ =\ \hat{I}$;

on dit que le groupe d'opérateurs $\hat{O}_g$ est une représentation du groupe $\mathcal{G}$ dans $\mathcal{L}$. La forme matricielle $\mathcal{D}(\hat{O}_g)$ des opérateurs constitue la forme matricielle de la représentation. S'il existe une matrice $\mathcal{C}$ inversible, l'ensemble défini par $\mathcal{C}\mathcal{D}(\hat{O}_g)\mathcal{C}^{-1}$

forme aussi une représentation de $\mathcal{G}$. Elle est dite équivalente à la représentation $\mathcal{D}(\hat{O}_g)$. Si l'espace $\mathcal{L}$ ne contient aucun sous-espace invariant autre que lui-même, la représentation est dite irréductible. En d'autres termes, si $f_1, f_2, ..., f_n$ constituent n vecteurs de base de la représentation irréductible, on aura :

$$\hat{O}_g f_j = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{D}_{i\,j}(\hat{O}_g)\, f_i. \tag{1C-14}$$

Groupe $SU(2)$. Considérons le groupe $SU(2)$ formé par l'ensemble des matrices de dimension 2 unitaires et unimodulaires M telles que $MM^\dagger = 1$ et $\det M = 1$. Par définition, toute matrice s'écrit alors

$$M = \begin{pmatrix} a^* & -b^* \\ b & a \end{pmatrix} \tag{1C-15a}$$

$$\mid a \mid^2 + \mid b \mid^2 = 1. \tag{1C-15b}$$

En plus de la représentation de dimension 2 constituée par les matrices M elles-mêmes, on peut construire les autres représentations de $SU(2)$ en prenant les produits symétriques de cette représentation par elle-même. En effet, si v et u sont deux nombres quelconques, ils se transforment suivant

$$\begin{aligned} v' &= a^*\, v - b^*\, u \\ u' &= b\, v + a\, u \end{aligned} \tag{1C-15c}$$

et inversement :

$$\begin{aligned} v &= a\, v' + b^*\, u' \\ u &= -b\, v' + a^*\, u' \end{aligned} \tag{1C-15d}$$

ce qui donne pour les vecteurs de base de la représentation de dimension 3 :

$$\begin{aligned} {v'}^2 &= a^{*2}\, v^2 - 2a^*b^*\, vu + b^{*2}\, u^2 \\ v'u' &= a^*b\, v^2 + (aa^* - bb^*)\, vu - ab^*u^2 \\ {u'}^2 &= b^2\, v^2 + 2ab\, vu + a^2u^2. \end{aligned} \tag{1C-16}$$

Si on définit :

$$x = \frac{v^2 - u^2}{2}\,; \qquad y = \frac{i(u^2 + v^2)}{2}\,; \qquad z = -uv \tag{1C-17a}$$

et inversement

$$v^2 = x - iy\,; \qquad u^2 = -(x + iy) \tag{1C-17b}$$

avec des relations similaires pour les grandeurs transformées, les égalités (1C-16) conduisent à :

$$\begin{aligned} x' &= \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^{*2} - b^2)\, x + \frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2})\, y + (ab + a^*b^*)\, z \\ y' &= \frac{i}{2}(a^{*2} - a^2 - b^{*2} + b^2)\, x + \frac{1}{2}(b^{*2} + a^2 + a^{*2} + b^2)\, y + i(a^*b^* - ab)\, z \\ z' &= -(ab^* + a^*b)\, x + i(a^*b - ab^*)\, y + (aa^* - bb^*)\, z. \end{aligned} \tag{1C-18}$$

La matrice de la transformation donnant x', y' et z' en fonction de x, y et z s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 - b^{*2} - b^2 + a^{*2}) & \frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} - b^{*2} + b^2) & ab + a^*b^* \\ \frac{i}{2}(a^{*2} - a^2 - b^{*2} + b^2) & \frac{1}{2}(b^{*2} + a^2 + a^{*2} + b^2) & i(a^*b^* - ab) \\ -(ab^* + a^*b) & i(a^*b - ab^*) & aa^* - bb^* \end{pmatrix}. \tag{1C-19}$$

Nous avons donc réussi à associer à chaque matrice de $SU(2)$ une transformation des variables x, y et z. On peut remarquer que les coefficients de la matrice (1C-19) qui donne la loi de transformation sont tous réels. D'autre part, on peut vérifier que le déterminant de cette matrice est égal à 1 et que l'on a $x^2 + y^2 + z^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2$. Si on a choisi u et v tels que x, y et z soient réels, la relation (1C-18) représente la transformation par rotation des coordonnées d'un point.

Nous allons maintenant montrer que toutes les rotations sont associées de cette façon à des transformations unitaires. Il suffit de montrer que c'est le cas pour des rotations autour des axes Oz et Oy respectivement.

Dans une rotation autour de l'axe Oz, il suffit d'identifier les matrices (1C-19) avec :

$$\begin{pmatrix} \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ -\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1C-20}$$

Les deux conditions $| a |^2 + | b |^2 = 1$ et $aa^* - bb^* = 1$ imposent $b = 0$ et $| a | = 1$ et la matrice (1C-19) devient :

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2}) & \frac{i}{2}(a^2 - a^{*2}) & 0 \\ \frac{i}{2}(a^{*2} - a^2) & \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1C-21}$$

En posant alors $a = \mathrm{e}^{i\vartheta}$, l'identification terme à terme de (1C-20) et (1C-21) donne $a = (-1)^n \mathrm{e}^{-i\gamma/2}$ où n est un entier quelconque. On a par exemple la correspondance :

$$\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i\gamma/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\gamma/2} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ -\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1C-22}$$

La matrice de rotation autour de l'axe Oy est donnée par :

$$\begin{pmatrix} \cos\gamma & 0 & -\sin\gamma \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\gamma & 0 & \cos\gamma \end{pmatrix} \tag{1C-23}$$

que l'on doit identifier avec (1C-19).

Les deux conditions $\mid a\mid^2+\mid b\mid^2=1$ et $aa^*-bb^*=\cos\gamma$ imposent $\mid a\mid^2=\cos^2\gamma/2$ et $\mid b\mid^2=\sin^2\gamma/2$. On peut alors poser $a=\mid\cos\gamma/2\mid\,\mathrm{e}^{i\vartheta}$. On a de plus les conditions :

$$\begin{aligned} ab+a^*b^* &= -\sin\gamma\ ; \qquad & ab-a^*b^* &= 0\ ;\\ ab^*+a^*b &= -\sin\gamma\ ; \qquad & a^*b-ab^* &= 0. \end{aligned}$$

La somme des deux premières relations impose que :

$$b=\frac{-\sin\gamma}{2\mid\cos\gamma/2\mid}\,\mathrm{e}^{-i\vartheta}=\frac{-\sin\gamma/2\cos\gamma/2}{\mid\cos\gamma/2\mid}\,\mathrm{e}^{-i\vartheta}.$$

La relation $ab^*+a^*b=-\sin\gamma$ entraîne que $\vartheta=n\pi$ où n est un entier quelconque. On a donc

$$a=\mid\cos\gamma/2\mid\ (-1)^n\ ;\qquad b=\frac{-\sin\gamma/2\ \cos\gamma/2}{\mid\cos\gamma/2\mid}(-1)^n.\tag{1C-24}$$

Si nous définissons le domaine de l'angle de rotation autour de l'axe Oy tel que $\cos\gamma/2$ soit positif ou nul ($0\le\gamma\le\pi$ ou $-\pi/2\le\gamma\le\pi/2$ ou $-\pi\le\gamma\le 0$), pour n pair on trouve $a=\cos\gamma/2$ et $b=-\sin\gamma/2$. Si le domaine de définition de γ est tel que $\cos\gamma/2$ est négatif ou nul, en prenant n impair, on aura les mêmes formes analytiques pour a et b que dans le cas précédent. Dans tous les cas la correspondance peut s'écrire :

$$\begin{pmatrix}\cos\gamma/2 & \sin\gamma/2\\ -\sin\gamma/2 & \cos\gamma/2\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}\cos\gamma & 0 & -\sin\gamma\\ 0 & 1 & 0\\ \sin\gamma & 0 & \cos\gamma\end{pmatrix}.\tag{1C-25}$$

Dans le cas général, les valeurs de a et b sont obtenues en faisant le produit des trois matrices correspondantes aux rotations autour des trois axes d'Euler :

$$a=\mathrm{e}^{-i\gamma_3/2}\cos(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{-i\gamma_1/2}\ ;\qquad b=-\mathrm{e}^{-i\gamma_3/2}\sin(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{i\gamma_1/2}.\tag{1C-26a}$$

La correspondance entre $SU(2)$ et $SO(3)$ s'écrit explicitement :

$$\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{i\gamma_3/2}\cos(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{i\gamma_1/2} & \mathrm{e}^{i\gamma_3/2}\sin(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{-i\gamma_1/2}\\ -\mathrm{e}^{-i\gamma_3/2}\sin(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{i\gamma_1/2} & \mathrm{e}^{-i\gamma_3/2}\cos(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{-i\gamma_1/2}\end{pmatrix}\to$$

$$\begin{pmatrix}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13}\\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 23}\\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33}\end{pmatrix}.\tag{1C-26b}$$

Représentations irréductibles de $SU(2)$. Les $n+1$ monômes $v^n,\ v^{n-1}u,\ \dots\ u^n$ appartiennent à la représentation de dimension $n+1$. Si on définit $n=2j$ et

$$f_\mu(v,u)=\frac{v^{j-\mu}\ u^{j+\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!\,(j-\mu)!}}\tag{1C-27}$$

où μ varie de $-j$ à j, on peut obtenir une représentation unitaire avec la notation habituelle utilisée dans les rotations. Par définition, on a :

$$\hat{O}_M\, f_\mu(v', u') \;=\; f_\mu(v, u) \tag{1C-28a}$$

ou d'une manière équivalente (1C-15d) :

$$\begin{aligned} \hat{O}_M\, f_\mu(v, u) &= f_\mu(av + b^* u, -bv + a^* u) \\ &= \frac{(av + b^* u)^{j-\mu}\, (-bv + a^* u)^{j+\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!\,(j-\mu)!}}\,. \end{aligned} \tag{1C-28b}$$

En utilisant le développement

$$(x+y)^n \;=\; \sum_t \frac{n!}{t!(n-t)!}\, x^{n-t}\, y^t$$

on trouve :

$$\begin{aligned} \hat{O}_M\, f_\mu(v, u) = \sum_{x\,x'} (-1)^x \frac{\sqrt{(j+\mu)!\,(j-\mu)!}}{x!\,x'!\,(j+\mu-x)!\,(j-\mu-x')!} \\ \times\, a^{x'}\, a^{*\,j+\mu-x}\, b^x\, b^{*\,j-\mu-x'}\, v^{x+x'}\, u^{2j-x-x'}. \end{aligned} \tag{1C-29}$$

Si on pose $\mu' \,=\, j - x - x'$ et en remarquant que le produit $u^{2j-x-x'}\, v^{x+x'}$ est égal à $\sqrt{(j+\mu')!\,(j-\mu')!}\, f_{\mu'}(v, u)$, on obtient :

$$\begin{aligned} \hat{O}_M\, f_\mu(v, u) = \sum_{x\,\mu'} (-1)^x \frac{\sqrt{(j+\mu)!\,(j-\mu)!(j+\mu')!\,(j-\mu')!}}{x!\,(j+\mu-x)!\,(j-x-\mu')!\,(x+\mu'-\mu)} \\ \times\, a^{j-x-\mu'}\, a^{*\,j+\mu-x}\, b^x\, b^{*\,x+\mu'-\mu}\, f_{\mu'}(v, u). \end{aligned} \tag{1C-30}$$

On a donc :

$$\hat{O}_M\, f_\mu(v, u) \;=\; \sum_{\mu'} \mathcal{U}^{(j)}_{\mu'\,\mu}(M)\; f_{\mu'}(v, u) \tag{1C-31}$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{(j)}_{\mu'\,\mu}(M) = \sum_{x} (-1)^x \frac{\sqrt{(j+\mu)!\,(j-\mu)!(j+\mu')!\,(j-\mu')!}}{x!\,(j+\mu-x)!\,(j-x-\mu')!\,(x+\mu'-\mu)} \\ \times\, a^{j-x-\mu'}\, a^{*\,j+\mu-x}\, b^x\, b^{*\,x+\mu'-\mu}. \end{aligned} \tag{1C-32a}$$

La sommation sur x dans cette expression est telle que les inégalités suivantes doivent être vérifiées :

$$\sup\,(0, \mu - \mu') \;\le\; x \;\le\; \inf\,(j-\mu', j+\mu). \tag{1C-32b}$$

Cette transformation est unitaire. Remarquons d'abord que si la matrice M donnée par (1C-15a) est unitaire, il en est de même pour son inverse qui s'écrit :

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} a & b^* \\ -b & a^* \end{pmatrix}.$$

Si on considère v'' et u'' transformés de v et u par cette matrice inverse, on a :

$$\begin{aligned} v'' &= a\,v + b^*\,u \\ u'' &= -b\,v + a^*\,u \end{aligned}$$

avec conservation de la norme :

$$\begin{aligned} |\,v''\,|^2 + |\,u''\,|^2 &= v''\,v''^{\,*} + u''\,u''^{\,*} \\ &= (\,|\,v\,|^2 + |\,u\,|^2\,)\,(\,|\,a\,|^2 + |\,b\,|^2\,) \\ &= |\,v\,|^2 + |\,u\,|^2\,. \end{aligned}$$

Calculons maintenant $\sum_\mu \,|\,f_\mu\,|^2$:

$$\begin{aligned} \sum_\mu \,|\,f_\mu\,|^2 &= \sum_\mu \frac{v^{j-\mu}\; u^{j+\mu}\; v^{j-\mu^*}\; u^{j+\mu^*}}{(j+\mu)!\,(j-\mu)!} \\ &= \sum_\mu \frac{|\,v\,|^{\,2(j-\mu)}\;\;|\,u\,|^{\,2(j+\mu)}}{(j+\mu)!\,(j-\mu)!} \;=\; \frac{1}{(2j)!}\,[\,|\,v\,|^2 + |\,u\,|^2\,]^{2j} \\ &= \frac{1}{(2j)!}\,[\,|\,a\,v + b^*\,u\,|^2 + |\,-b\,v + a^*\,u\,|^2\,]^{2j} \\ &= \sum_\mu \frac{|\,a\,v + b^*\,u\,|^{2(j-\mu)}\;\;|\,-b\,v + a^*\,u\,|^{2(j+\mu)}}{(j+\mu)!\,(j-\mu)!} \\ &= \sum_\mu \,|\,\hat{O}_M\,f_\mu\,|^2 \end{aligned}$$

la dernière égalité découlant de la définition (1C-28b). On admettra que cette représentation est aussi irréductible, la démonstration dépassant le cadre de ce cours.

Lorsque $b = 0$ dans la matrice $M, \mathcal{U}^{(j)}_{\mu'\,\mu}(M)$ n'est différent de zéro que si $x = 0$ et $\mu' = \mu$. En particulier, si M est la matrice identité I_2, $a = 1$ et $\mathcal{U}^{(j)}_{\mu'\,\mu}(M) = \delta_{\mu'\,\mu}$, soit $\mathcal{U}^{\,(j)}(M) = I_{2j+1}$. Si $M = -I_2$, $a = -1$ et on trouve $\mathcal{U}^{(j)}_{\mu'\,\mu}(M) = \delta_{\mu'\,\mu}\,(-1)^{2j}$, c'est-à-dire $\mathcal{U}^{\,(j)}(M) = I_{2j+1}$ si j est entier et $\mathcal{U}^{\,(j)}(M) = -I_{2j+1}$ si j est demi-entier. Les représentations de $SU(2)$ pour lesquelles $\mathcal{U}^{\,(j)}(-I_2) = I_{2j+1}$ sont appelées représentations paires et celles pour lesquelles $\mathcal{U}^{\,(j)}(-I_2) = -I_{2j+1}$ sont dites impaires. L'homomorphisme entre le groupe $SU(2)$ et le groupe des opérateurs représenté par les matrices $\mathcal{U}^{\,(j)}$ permet de montrer que, quelle que soit la matrice M de $SU(2)$, les représentations paires vérifient $\mathcal{U}^{\,(j)}(-M) = \mathcal{U}^{\,(j)}(M)$ et les représentations impaires $\mathcal{U}^{\,(j)}(-M) = -\mathcal{U}^{\,(j)}(M)$.

On peut écrire la matrice $\mathcal{U}^{(j)}$ en fonction des angles d'Euler à l'aide des substitutions (1C-26a) :

$$\mathcal{U}^{(j)}_{\mu'\,\mu}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) = \sum_x (-1)^x\,(-1)^{\mu'-\mu}\,\frac{\sqrt{(j+\mu)!\,(j-\mu)!(j+\mu')!\,(j-\mu')!}}{x!\,(j+\mu-x)!\,(j-x-\mu')!\,(x+\mu'-\mu)}$$
$$\times\, \mathrm{e}^{i\mu'\gamma_3}\ \cos^{2j+\mu-\mu'-2x}(\gamma_2/2)\ \sin^{2x+\mu'-\mu}(\gamma_2/2)\ \mathrm{e}^{i\mu\gamma_1}. \quad \text{(1C-33)}$$

La matrice $\mathcal{C}$ dont les éléments sont donnés par $\mathcal{C}_{\mu\nu} = \delta_{\mu\,\nu}\ i^{2\mu}$ et $[\mathcal{C}^{-1}]_{\mu\nu} = \delta_{\mu\,\nu}\ i^{-2\mu}$ permet de construire la représentation irréductible

$$\Gamma^{(j)}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\ =\ \mathcal{C}\ \mathcal{U}^{(j)}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\ \mathcal{C}^{-1} \quad \text{(1C-34)}$$

dont les éléments s'écrivent :

$$\Gamma^{(j)}_{\mu'\mu}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\ =\ (-1)^{\mu'-\mu}\ \mathcal{U}^{(j)}_{\mu'\,\mu} \quad \text{(1C-35)}$$

ou explicitement :

$$\Gamma^{(j)}_{\mu'\,\mu}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) = \sum_x (-1)^x\,\frac{\sqrt{(j+\mu)!\,(j-\mu)!(j+\mu')!\,(j-\mu')!}}{x!\,(j+\mu-x)!\,(j-x-\mu')!\,(x+\mu'-\mu)}$$
$$\times\, \mathrm{e}^{i\mu'\gamma_3}\ \cos^{2j+\mu-\mu'-2x}(\gamma_2/2)\ \sin^{2x+\mu'-\mu}(\gamma_2/2)\ \mathrm{e}^{i\mu\gamma_1}. \quad \text{(1C-36)}$$

Il est clair que la relation (1C-34) entraîne que si

$$\mathcal{U}^{(j)}(-M)\ =\ \varepsilon\,\mathcal{U}^{(j)}(M) \quad \text{(1C-37a)}$$

on aura :

$$\Gamma^{(j)}(-M)\ =\ \varepsilon\,\Gamma^{(j)}(M). \quad \text{(1C-37b)}$$

Représentations irréductibles de SO(3)

Si on calcule explicitement les éléments de la matrice $\Gamma^{(j)}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)$ pour $j = 1/2$ et $j = 1$, on retrouve respectivement les matrices (1C-8) et (1C-12). Quelle que soit la valeur de j on a :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\ =\ \langle j\,m' \mid \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 J_z}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 J_z}\ \mid\ j\,m\,\rangle \quad \text{(1C-38)}$$

avec :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\ =\ \mathrm{e}^{im'\gamma_3}\ d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2)\ \mathrm{e}^{im\gamma_1} \quad \text{(1C-39a)}$$

et

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2) = \sum_x (-1)^x\,\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j-m'-x)!(j+m-x)!\,x!\,(x+m'-m)!}$$
$$\times\cos^{2j+m-m'-2x}(\gamma_2/2)\ \sin^{2x+m'-m}(\gamma_2/2). \quad \text{(1C-40a)}$$

les valeurs de x possibles devant vérifier :

$$\sup(0, m-m') \leq x \leq \inf(j-m', j+m). \tag{1C-40b}$$

Si on pose $\gamma_1 = \gamma_3 = 0$ dans (1C-38) et (1C-39a) on voit que l'élément de la matrice de rotation réduite $d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2)$ est aussi donné par :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2) = \langle j\,m' \mid e^{\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y} \mid j\,m\rangle. \tag{1C-39b}$$

Pour écrire les relations ci-dessus, nous avons effectué la démarche suivante : à chaque rotation $\mathcal{R}_\mathrm{p}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)$ de $SO(3)$, nous avons associé un opérateur quantique $\hat{R}_\mathrm{p}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)$ dont les éléments de matrice sont donnés par les représentations irréductibles de dimension $2j+1$ de $SU(2)$.

Nous allons voir maintenant que cette démarche est incomplète lorsque le spin de la particule est demi-entier. Supposons que l'on effectue la substitution $\gamma_2 \to \gamma_2 + 2\pi\,n_2$ dans (1C-40a) :

$$\begin{aligned}\cos^{2j+m-m'-2x}(\gamma_2/2+\pi n_2) &= (-1)^{(2j+m-m'-2x)\,n_2}\cos^{2j+m-m'-2x}(\gamma_2/2)\\ \sin^{2x+m'-m}(\gamma_2/2+\pi n_2) &= (-1)^{(2x+m'-m)\,n_2}\sin^{2x+m'-m}(\gamma_2/2)\end{aligned}$$

soit :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2+2\pi n_2) = (-1)^{2jn_2}\, d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2). \tag{1C-41}$$

Si on effectue la substitution $\gamma_1 \to \gamma_1 + 2\pi n_1$, on a :

$$e^{i\,m(\gamma_1+2\pi n_1)} = e^{i\,m\gamma_1}\, e^{i\,2\pi m n_1}.$$

Si m est entier, le second terme du produit ci-dessus est égal à 1. Si m est demi-entier, on peut toujours poser $m = k/2$, où k est un entier qui varie suivant m de $-j$ à j avec un saut de 2 unités :

$$e^{i\,2\pi m n_1} = e^{i\,\pi k n_1} = (-1)^{2j\,n_1}. \tag{1C-42}$$

Cette relation est d'ailleurs vérifiée lorsque m (donc j) est aussi entier de sorte que l'on a toujours :

$$e^{i\,m(\gamma_1+2\pi n_1)} = (-1)^{2j\,n_1}\, e^{i\,m\gamma_1}, \tag{1C-43a}$$

$$e^{i\,m'(\gamma_3+2\pi n_3)} = (-1)^{2j\,n_3}\, e^{i\,m'\gamma_3}. \tag{1C-43b}$$

Ainsi toutes les rotations ayant les angles d'Euler définies par :

$$\begin{aligned}\gamma_1' &= \gamma_1 + 2\pi n_1\\ \gamma_2' &= \gamma_2 + 2\pi n_2\\ \gamma_3' &= \gamma_3 + 2\pi n_3\end{aligned} \tag{1C-44}$$

et qui correspondent à la même rotation *physique* ne donneront pas le même opérateur quantique (ils diffèrent par une phase) :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3',\gamma_2',\gamma_1') = (-1)^{2j(n_1+n_2+n_3)}\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1). \tag{1C-45}$$

Ce résultat signifie que lorsque le spin est demi-entier, à chaque rotation correspondent 2 opérateurs quantiques de signes opposés et il est impossible de choisir le signe par convention. En effet, on peut facilement montrer (si on effectue deux rotations successives de π autour de l'axe Oz ou de 2π) que pour de tels spins, on a seulement la relation

$$\hat{R}_{\mathrm{p}_2\mathrm{p}_1} \;=\; \pm\,\hat{R}_{\mathrm{p}_2}\hat{R}_{\mathrm{p}_1}. \tag{1C-46}$$

On peut expliquer ce résultat à partir des représentations irréductibles de $SU(2)$. On peut tout d'abord remarquer que la correspondance entre $SU(2)$ et $SO(3)$ n'est pas biunivoque car si on change a en $-a$ et b en $-b$, la relation (1C-18) reste inchangée. Lorsque j est entier, les représentations $\mathcal{U}^{(j)}(M)$ et $\mathcal{U}^{(j)}(-M)$ sont identiques ce qui entraîne un isomorphisme entre les représentations de dimension $2j+1$ de $SU(2)$ et de $SO(3)$. Par contre lorsque le spin est demi-entier, les représentations $\mathcal{U}^{(j)}(M)$ et $\mathcal{U}^{(j)}(-M)$ sont différentes mais correspondent à la même rotation physique. On parle alors d'une représentation à deux valeurs de $SO(3)$ bien qu'en toute rigueur une représentation de $SU(2)$ ne soit pas dans ce cas une représentation de $SO(3)$ à cause du signe " $-$ " possible dans (1C-46).

C.4. Propriétés des matrices réduites et valeurs particulières

Propriétés de $d^{(j)}_{m\ m}(P;\gamma_2)$

De la relation de définition (1C-40a) de $d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2)$, on a :

$$d^{(j)}_{-m'\,-m}(P;\gamma_2) \;=\; d^{(j)}_{m\,m'}(P;\gamma_2). \tag{1C-47a}$$

Si on fait le changement de variable $x' = x + m' - m$ dans (1C-40a), on obtient :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2) = \sum_{x'} (-1)^{x'+m-m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j-m-x')!(j+m'-x')!\,x'!\,(x'+m-m')!} \times \cos^{2j+m'-m-2x'}(\gamma_2/2)\ \sin^{2x'+m-m'}(\gamma_2/2) \tag{1C-48}$$

d'où la relation :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2) \;=\; (-1)^{m-m'}\,d^{(j)}_{m\,m'}(P;\gamma_2) \;=\; (-1)^{m'-m}\,d^{(j)}_{m\,m'}(P;\gamma_2). \tag{1C-47b}$$

Si on fait les substitutions $m' \to -m'$ et $m \to -m$ dans (1C-48), on a :

$$d^{(j)}_{-m'\,-m}(P;\gamma_2) \;=\; (-1)^{m-m'}\,d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2) \;=\; (-1)^{m'-m}\,d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2). \tag{1C-47c}$$

Si on remplace γ_2 par $-\gamma_2$ dans (1C-48), le terme en sinus est multiplié par la phase $(-1)^{2x'+m-m'}$ ce qui donne une phase totale $(-1)^{2x'+m-m'+x'+m-m'} = (-1)^{x'}$, d'où :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;-\gamma_2) \;=\; d^{(j)}_{m\,m'}(P;\gamma_2). \tag{1C-47d}$$

Si on remplace γ_2 par $\pi-\gamma_2$ dans (1C-40a), le sinus est transformé en cosinus et réciproquement. En faisant le changement de variable $x' = j-m'-x$, on obtient :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\pi-\gamma_2) \;=\; (-1)^{j-m'} d^{(j)}_{m'\,-m}(P;\gamma_2). \tag{1C-47e}$$

Si on remplace γ_2 par $\pi+\gamma_2$ dans (1C-40a), le sinus est transformé en cosinus et le cosinus est transformé en sinus avec une phase $(-1)^{2j+m-m'-2x}$. En faisant le changement de variable $x' = j-m'-x$, on obtient :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\pi+\gamma_2) \;=\; (-1)^{j+m} d^{(j)}_{m'\,-m}(P;\gamma_2). \tag{1C-47f}$$

Valeurs particulières de $d^{(j)}_{m\;m}(P;\gamma_2)$

(α) $j = 1/2$
Lorsque le moment angulaire a la valeur $j = 1/2$, la forme explicite est donnée par :

$$\begin{aligned} d^{(1/2)}_{1/2\,1/2}(P;\gamma_2) = d^{(1/2)}_{-1/2\,-1/2}(P;\gamma_2) \;&=\; \cos(\gamma_2/2)\\ d^{(1/2)}_{1/2\,-1/2}(P;\gamma_2) = -d^{(1/2)}_{-1/2\,1/2}(P;\gamma_2) \;&=\; \sin(\gamma_2/2). \end{aligned} \tag{1C-48}$$

(β) $j = 1$
Dans le cas où le moment angulaire j est égal à 1, on a :

$$\begin{aligned} &d^{(1)}_{1\,1}(P;\gamma_2) = d^{(1)}_{-1\,-1}(P;\gamma_2) \;=\; \frac{1}{2}(1+\cos\gamma_2)\\ &d^{(1)}_{1\,0}(P;\gamma_2) = d^{(1)}_{0\,-1}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(1)}_{0\,1}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(1)}_{-1\,0}(P;\gamma_2) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\gamma_2\\ &d^{(1)}_{1\,-1}(P;\gamma_2) = d^{(1)}_{-1\,1}(P;\gamma_2) \;=\; \frac{1}{2}(1-\cos\gamma_2)\\ &d^{(1)}_{0\,0}(P;\gamma_2) = \cos\gamma_2. \end{aligned} \tag{1C-49}$$

(γ) $j = 3/2$

$$
\begin{aligned}
d^{(3/2)}_{3/2\,3/2}(P;\gamma_2) &= d^{(3/2)}_{-3/2\,-3/2}(P;\gamma_2) \;=\; \cos^3(\gamma_2/2) \\
d^{(3/2)}_{3/2\,1/2}(P;\gamma_2) &= d^{(3/2)}_{-1/2\,-3/2}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(3/2)}_{1/2\,3/2}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(3/2)}_{-3/2\,-1/2}(P;\gamma_2) \\
&= \sqrt{3}\cos^2(\gamma_2/2)\,\sin(\gamma_2/2) \\
d^{(3/2)}_{3/2\,-1/2}(P;\gamma_2) &= d^{(3/2)}_{1/2\,-3/2}(P;\gamma_2) \;=\; d^{(3/2)}_{-1/2\,3/2}(P;\gamma_2) \;=\; d^{(3/2)}_{-3/2\,1/2}(P;\gamma_2) \\
&= \sqrt{3}\,\cos(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2) \\
d^{(3/2)}_{3/2\,-3/2}(P;\gamma_2) &= -d^{(3/2)}_{-3/2\,3/2}(P;\gamma_2) \;=\; \sin^3(\gamma_2/2) \\
d^{(3/2)}_{1/2\,1/2}(P;\gamma_2) &= d^{(3/2)}_{-1/2\,-1/2}(P;\gamma_2) \\
&= \cos^3(\gamma_2/2) \;-\; 2\cos(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2) \\
&= \cos(\gamma_2/2)\,(\,3\cos^2(\gamma_2/2) - 2\,) \\
d^{(3/2)}_{1/2\,-1/2}(P;\gamma_2) &= -d^{(3/2)}_{-1/2\,1/2}(P;\gamma_2) \\
&= 2\cos^2(\gamma_2/2)\,\sin(\gamma_2/2) \;-\; \sin^3(\gamma_2/2) \\
&= \sin(\gamma_2/2)\,(\,2 - 3\sin^2(\gamma_2/2)\,). \qquad \text{(1C-50)}
\end{aligned}
$$

(δ) $j = 2$

$$
\begin{aligned}
d^{(2)}_{2\,2}(P;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-2\,-2}(P;\gamma_2) \;=\; \cos^4(\gamma_2/2) \\
d^{(2)}_{2\,1}(P;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-1\,-2}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(2)}_{1\,2}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(2)}_{-2\,-1}(P;\gamma_2) \\
&= 2\cos^3(\gamma_2/2)\,\sin(\gamma_2/2) \;=\; \frac{1}{2}(1+\cos\gamma_2)\,\sin\gamma_2 \\
d^{(2)}_{2\,0}(P;\gamma_2) &= d^{(2)}_{0\,-2}(P;\gamma_2) \;=\; d^{(2)}_{0\,2}(P;\gamma_2) \;=\; d^{(2)}_{-2\,0}(P;\gamma_2) \\
&= \sqrt{6}\cos^2(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2) \;=\; \sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\gamma_2 \\
d^{(2)}_{2\,-1}(P;\gamma_2) &= d^{(2)}_{1\,-2}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(2)}_{-1\,2}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(2)}_{-2\,1}(P;\gamma_2) \\
&= 2\,\cos(\gamma_2/2)\sin^3(\gamma_2/2) \;=\; \frac{1}{2}(1-\cos\gamma_2)\,\sin\gamma_2 \\
d^{(2)}_{2\,-2}(P;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-2\,2}(P;\gamma_2) \;=\; \sin^4(\gamma_2/2) \\
d^{(2)}_{1\,1}(P;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-1\,-1}(P;\gamma_2) \\
&= \cos^4(\gamma_2/2) - 3\cos^2(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2) = \frac{1}{2}(1+\cos\gamma_2)\,(2\cos\gamma_2 - 1)
\end{aligned}
$$

$$\begin{aligned}
d^{(2)}_{1\,0}(P;\gamma_2) &= d^{(2)}_{0\,-1}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(2)}_{0\,1}(P;\gamma_2) \;=\; -d^{(2)}_{-1\,0}(P;\gamma_2)\\
&= \sqrt{6}\,(\cos^3(\gamma_2/2)\,\sin(\gamma_2/2) \;-\cos(\gamma_2/2)\sin^3(\gamma_2/2))\\
&= \sqrt{\frac{3}{2}}\;\sin\gamma_2\;\cos\gamma_2\\
d^{(2)}_{1\,-1}(P;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-1\,1}(P;\gamma_2) \;=\; 3\cos^2(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2) \;-\; \sin^4(\gamma_2/2)\\
&= \frac{1}{2}(1-\cos\gamma_2)\,(2\cos\gamma_2+1)\\
d^{(2)}_{0\,0}(P;\gamma_2) &= \cos^4(\gamma_2/2) \;+\; \sin^4(\gamma_2/2) \;-\; 4\cos^2(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2)\\
&= \frac{1}{2}\,(3\cos^2\gamma_2-1). \qquad (1C\text{-}51)
\end{aligned}$$

C.5. Propriétés des matrices de Wigner et conventions

Propriétés des matrices de Wigner

L'opérateur de rotation étant unitaire, on a :

$$\langle\, j\,m \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} \;|\; j\,m'\,\rangle \;=\; \langle\, j\,m \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;-1} \;|\; j\,m'\,\rangle \;=\; \langle\, j\,m' \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}} \;|\; j\,m\,\rangle^* \qquad (1C\text{-}52a)$$

c'est-à-dire :

$$\mathcal{D}^{(j)\;*}_{m'\,m} \;=\; [\mathcal{D}^{(j)\;-1}]_{m\,m'}. \qquad (1C\text{-}52b)$$

La même propriété d'unitarité entraîne deux relations entre les éléments de matrice :

$$\begin{aligned}
\langle j\,m \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger}\,\hat{R}_{\mathrm{p}} \;|\; j\,m'\rangle = \delta_{m\,m'} &= \textstyle\sum_{m''}\langle j\,m \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} \;|\; j\,m''\rangle\langle j\,m'' \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}} \;|\; j\,m'\rangle\\
&= \textstyle\sum_{m''}\langle\, j\,m'' \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}} \;|\; j\,m\,\rangle^*\langle j\,m'' \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}} \;|\; j\,m'\rangle.
\end{aligned}$$

Cette relation s'écrit encore :

$$\sum_{m''} \mathcal{D}^{(j)\;*}_{m''\,m}\,(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\mathcal{D}^{(j)}_{m''\,m'}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \;=\; \delta_{m\,m'}. \qquad (1C\text{-}53)$$

La seconde relation s'écrit :

$$\begin{aligned}
\langle\, j\,m \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}}\,\hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} \;|\; j\,m'\,\rangle &= \delta_{m\,m'}\\
&= \textstyle\sum_{m''}\,\langle\, j\,m \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}} \;|\; j\,m''\,\rangle\langle\, j\,m'' \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} \;|\; j\,m'\,\rangle\\
&= \textstyle\sum_{m''}\,\langle\, j\,m \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}} \;|\; j\,m''\,\rangle\langle\, j\,m' \;|\; \hat{R}_{\mathrm{p}} \;|\; j\,m''\,\rangle^*
\end{aligned}$$

ce qui est équivalent à :

$$\sum_{m''} \mathcal{D}^{(j)}_{m\,m''}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\mathcal{D}^{(j)\;*}_{m'\,m''}\,(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \;=\; \delta_{m\,m'} \qquad (1C\text{-}54)$$

en prenant le complexe conjugué de cette égalité, on peut écrire :

$$\sum_{m''} \mathcal{D}^{(j)\;*}_{m\,m''}\,(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m''}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \;=\; \delta_{m\,m'}. \qquad (1C\text{-}55)$$

Ces matrices de Wigner possèdent de plus des relations de symétrie (1C-47c) :

$$\mathcal{D}^{(j)*}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) = (-1)^{m'-m}\,\mathcal{D}^{(j)}_{-m'\,-m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)$$
$$= (-1)^{m-m'}\,\mathcal{D}^{(j)}_{-m'\,-m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \qquad \text{(1C-56)}$$

et sont normalisées suivant :

$$\int_0^{\pi} \sin\gamma_2\, d\gamma_2 \int_0^{2\pi} d\gamma_1 \int_0^{2\pi} d\gamma_3\; \mathcal{D}^{(j)*}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)\;\mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1'\,m_1}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) =$$
$$\frac{8\pi^2}{2j+1}\delta_{j\,j_1}\,\delta_{m\,m_1}\,\delta_{m_1'\,m'}. \qquad \text{(1C-57)}$$

Conventions

Nous avons vu qu'à une rotation de $SO(3)$ correspond deux opérateurs lorsque le spin est demi-entier. Nous allons maintenant définir les opérateurs quantiques tels que :

– le domaine de définition des angles d'Euler est donné par :

$$0 \le \gamma_1 \le 2\pi\ ; \qquad 0 \le \gamma_2 \le \pi\ ; \qquad 0 \le \gamma_3 \le 2\pi\ ; \qquad \text{(1C-58)}$$

– le signe de l'opérateur sera tel que pour une particule de spin 1/2, on devra retrouver la valeur donnée par (1C-5) ou (1C-6) ou (1C-7).

Soit donc un opérateur $\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)$ défini par ses angles d'Euler quelconques. On se propose de déterminer d'une part les angles $\gamma_3{}',\gamma_2{}',\gamma_1{}'$ respectant les conventions données ci-dessus et d'autre part la phase reliant les opérateurs $\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)$ et $\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3{}',\gamma_2{}',\gamma_1{}')$. Les égalités (1C-47b) et (1C-47d) entraînent :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\gamma_2) \;=\; (-1)^{m-m'}\,d^{(j)}_{m'\,m}(P;-\gamma_2)$$

mais $(-1)^{m-m'} = \mathrm{e}^{i\,\pi\,(m-m')} = \mathrm{e}^{-i\,\pi\,m'}\ \mathrm{e}^{i\,\pi\,m}$. On peut donc dire qu'une rotation de γ_2 autour de l'axe Oy est équivalente à :

– une rotation de π autour de Oz ;

– une rotation de $-\gamma_2$ autour du nouvel axe Oy ;

– une rotation de $-\pi$ autour de l'axe Oz final.

On en déduit que les rotations $\mathcal{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1)$ et $\mathcal{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3{}',\gamma_2{}',\gamma_1{}')$ sont équivalentes avec :

$$\begin{cases} \gamma_1' = \gamma_1 + 2\pi n_1 \\ \gamma_2' = \gamma_2 + 2\pi n_2 \\ \gamma_3' = \gamma_3 + 2\pi n_3 \end{cases} \qquad \text{(1C-59a)}$$

ou :

$$\begin{cases} \gamma_1' = \gamma_1 + \pi + 2\pi n_1 \\ \gamma_2' = -\gamma_2 + 2\pi n_2 \\ \gamma_3' = \gamma_3 - \pi + 2\pi n_3 \end{cases}. \tag{1C-59b}$$

La relation qui existe entre les opérateurs quantiques correspondants est alors donnée simplement par :

$$\hat{R}_p(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1) \;=\; (-1)^{2j\,(n_1+n_2+n_3)}\, \hat{R}_p(\gamma_3{}', \gamma_2{}', \gamma_1{}') \tag{1C-60a}$$

ou :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,; \gamma_3', \gamma_2', \gamma_1') \;=\; (-1)^{\,2j(n_1+n_2+n_3)}\, \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,; \gamma_3, \gamma_2, \gamma_1). \tag{1C-60b}$$

Exemples et cas particuliers

(a) Rotation de γ_2 autour de Oy avec $\pi < \gamma_2 \leq 2\pi$

Si on pose $\gamma_2 = \pi + x$, on aura (avec $n_1 = 0, n_2 = n_3 = 1$ dans (1C-59b)) :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(0, \gamma_2, 0) \;=\; \hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi, \pi - x, \pi)$$

soit :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(0, \gamma_2, 0) \;=\; \hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi, 2\pi - \gamma_2, \pi). \tag{1C-61}$$

(b) Rotation de γ_2 autour de Oy avec $-\pi < \gamma_2 < 0$

Avec $n_1 = n_2 = 0$ et $n_3 = 1$ dans (1C-59b), on a :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(0, \gamma_2, 0) \;=\; (-1)^{2j}\, \hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi, -\gamma_2, \pi). \tag{1C-62}$$

(c) Rotation inverse d'une rotation quelconque

Il est clair que l'opérateur $\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)$ aura pour opérateur inverse $[\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)]^{\dagger} = \hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3{}'' = -\gamma_1, \gamma_2{}'' = -\gamma_2, \gamma_1{}'' = -\gamma_3)$. D'où :

$$\begin{aligned} &[\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)]^{-1} = (-1)^{2j\,(n_1+n_2+n_3)} \\ &\times \hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3{}'' = -\gamma_1 - \pi + 2\pi n_3, \gamma_2{}'' = \gamma_2 + 2\pi n_2, \gamma_1{}'' = -\gamma_3 + \pi + 2\pi n_1). \end{aligned} \tag{1C-63}$$

Si les angles d'Euler $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ sont définis avec les conventions (1C-58), on a :

$$\begin{aligned} &[\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)]^{-1} = (-1)^{2j\,(n_1+n_3)} \\ &\qquad \times \hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma_3{}'' = -\gamma_1 - \pi + 2\pi n_3, \gamma_2{}'' = \gamma_2, \gamma_1{}'' = -\gamma_3 + \pi + 2\pi n_1). \end{aligned} \tag{1C-64}$$

(d) Rotation d'un angle γ autour de l'axe Ox

On doit d'abord identifier terme-à-terme les deux matrices (1C-5) et (1C-8) ce qui donne :

$$\cos(\gamma_3+\gamma_1)/2\ \cos(\gamma_2/2) \;=\; \cos(\gamma/2) \quad \text{avec} \quad \sin(\gamma_3+\gamma_1)/2 \;=\; 0$$

et :

$$\sin(\gamma_3-\gamma_1)/2\ \sin(\gamma_2/2) \;=\; \sin(\gamma/2) \quad \text{avec} \quad \cos(\gamma_3-\gamma_1)/2 \;=\; 0$$

ce qui donne :

$$\gamma_1 \;=\; -\frac{\pi}{2}+n_1\pi\;; \qquad \gamma_3 \;=\; \frac{\pi}{2}+n_3\pi. \tag{1C-65}$$

L'identification des termes impose que la somme n_1+n_3 doit être paire. En prenant $n_3=0$ et $n_1=2$, on trouve :

$$\gamma_1=\frac{3\pi}{2}\;; \qquad \gamma_3=\frac{\pi}{2}\;; \qquad \gamma_2=\gamma+2\pi \tag{1C-66}$$

soit :

$$\begin{aligned}\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma/0x) &= \hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/2,\gamma+2\pi,3\pi/2)\\ &= (-1)^{2j}\,\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/2,\gamma,3\pi/2).\end{aligned}$$

Cette égalité est valable si γ est compris entre 0 et π. Si ce n'est pas le cas, on sera amené à modifier cette relation en utilisant (1C-59a, 1C-59b) de manière à rendre γ_1, γ_2 et γ_3 compatibles avec les intervalles définis par (1C-58) et on introduira la phase supplémentaire donnée par (1C-60). Nous allons traiter comme exemple le cas où $-\pi<\gamma<0$. En utilisant (1C-59b) avec $\gamma_1=3\pi/2$ et $\gamma_3=\pi/2$, on trouve $n_1=-1$, $n_2=0$ et $n_3=1$, ce qui donne finalement :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma/0x) \;=\; (-1)^{2j}\,\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/2,\gamma,3\pi/2) \quad \text{si} \quad 0\le\gamma\le\pi \tag{1C-67a}$$

et :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma/0x) \;=\; (-1)^{2j}\,\hat{R}_{\mathrm{p}}(3\pi/2,-\gamma,\pi/2) \quad \text{si} \quad -\pi<\gamma<0. \tag{1C-67b}$$

(e) Rotation d'un angle π autour de chacun des axes

(α) Rotation autour de l'axe Oz

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/0z) \;=\; \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\pi\,J_z} \tag{1C-68}$$

soit :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;0,0,\pi) \;=\; \mathrm{e}^{i\pi\,m}\,\delta_{m'\,m} \tag{1C-69}$$

et :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/0z)\,\mid j\,m\,\rangle \;=\; \mathrm{e}^{i\pi\,m}\,\mid j\,m\,\rangle. \tag{1C-70}$$

(β) Rotation autour de l'axe Oy

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/0y) \;=\; \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\pi\,J_y} \tag{1C-71}$$

soit :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;0,\pi,0) \;=\; d^{(j)}_{m'\,m}(P;\pi). \tag{1C-72}$$

Cet élément de matrice ne sera non nul que si $2j+m-m'-2x$ est nul. En remplaçant la valeur de $x = j+(m-m')/2$ ainsi obtenue dans les inégalités (1C-40b), on trouve $m' = -m$ et $x = j+m$. Finalement, l'expression (1C-40a) donne :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;\pi) \;=\; (-1)^{j+m}\,\delta_{m'\,-m} \;=\; \mathrm{e}^{i\,\pi\,(j+m)}\,\delta_{m'\,-m}. \tag{1C-73}$$

On a donc :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;0,\pi,0) \;=\; (-1)^{j+m}\,\delta_{m'\,-m} \;=\; \mathrm{e}^{i\,\pi\,(j+m)}\,\delta_{m'\,-m} \tag{1C-74}$$

et :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/0y)\;|\;j\,m\,\rangle \;=\; (-1)^{j+m}\;\;|\;j\;-m\,\rangle \;=\; \mathrm{e}^{i\,\pi\,(j+m)}\;\;|\;j\;-m\,\rangle. \tag{1C-75}$$

(γ) *Rotation autour de l'axe Ox*

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/0x) \;=\; \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\pi\,J_x}. \tag{1C-76a}$$

D'après (1C-67a), on a :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma/0x) \;=\; (-1)^{2j}\;\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/2,\pi,3\pi/2) \tag{1C-76b}$$

d'où :

$$\begin{aligned}\left[\,\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/0x)\,\right]_{m'\,m} &= (-1)^{2j}\;\mathrm{e}^{i\frac{\pi}{2}m'}\;(-1)^{j+m}\;\delta_{m'\,-m}\;\mathrm{e}^{i\frac{3\pi}{2}m}\\ &= (-1)^{2j}\;(-1)^{j+m}\;\mathrm{e}^{i\pi\,m}\delta_{m'\,-m}\end{aligned}$$

mais :

$$\begin{array}{rl}\text{(i)} & (-1)^{j+m} \;=\; (-1)^{-j-m}\\ \text{(ii)} & (-1)^{-j-m} \;=\; \mathrm{e}^{-i\pi\,(j+m)} \;=\; \mathrm{e}^{-i\pi\,j}\;\mathrm{e}^{-i\pi\,m}\\ \text{(iii)} & (-1)^{2j} \;=\; \mathrm{e}^{2i\pi\,j}\end{array}$$

ce qui entraîne :

$$\left[\,\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/0x)\,\right]_{m'\,m} \;=\; \mathrm{e}^{i\pi\,j}\;\delta_{m'\,-m} \tag{1C-77}$$

et :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}(\pi/0x)\;|\;j\,m\,\rangle \;=\; \mathrm{e}^{i\pi\,j}\;\;|\;j\;-m\,\rangle. \tag{1C-78}$$

D. Correspondance entre les transformations géométriques

Nous avons vu que toute rotation dans l'espace habituel pouvait être définie par les angles d'Euler ou par un vecteur unitaire et un angle de rotation. L'opérateur (ou les opérateurs) de rotation associé est généralement donné en fonction des angles d'Euler. Dans ce complément, nous donnerons les lois de correspondance entre les deux transformations géométriques et plus particulièrement nous exprimerons les angles d'Euler en fonction des composantes du vecteur unitaire **u** (d'angles polaires θ et ϕ) et de l'angle de rotation γ.

La loi de transformation des coordonnées d'un point quelconque est la même pour les deux transformations. En d'autres termes, cela signifie que les éléments de matrice $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ ij}$ donnés par les relations (1-11) et (1-13) doivent avoir la même valeur numérique.

Si on calcule la somme des éléments diagonaux, on trouve :

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 11}+\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 22}+\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} &= \cos\gamma_2\ [1+\cos(\gamma_1+\gamma_3)]+\cos(\gamma_1+\gamma_3)\\ &= 2\cos^2\gamma_2/2\ [1+\cos(\gamma_1+\gamma_3)]-1\\ &= 1+2\cos\gamma = 4\cos^2\gamma/2-1\end{aligned} \tag{1D-1}$$

ce qui entraîne :

$$\cos^2\frac{\gamma_2}{2}\ \cos^2\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right) = \cos^2\frac{\gamma}{2}\cdot \tag{1D-2}$$

La seconde relation peut être déterminée uniquement à partir de $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 33} &= \cos\gamma_2 = 1-2\sin^2\frac{\gamma_2}{2}\\ &= \cos^2\vartheta\,(1-\cos\gamma)+\cos\gamma\\ &= 1-2\sin^2\vartheta\,\sin^2\frac{\gamma}{2}\end{aligned} \tag{1D-3}$$

soit :

$$\cos\gamma_2 = \cos^2\vartheta\ \ (1-\cos\gamma)+\cos\gamma \tag{1D-4a}$$

ou encore :

$$\sin^2\frac{\gamma_2}{2} = \sin^2\vartheta\ \sin^2\frac{\gamma}{2}\cdot \tag{1D-4b}$$

Une autre relation simple est obtenue en faisant la somme $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12}+\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12}+\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} &= 2u_xu_y(1-\cos\gamma) = \sin^2\vartheta\ \ \sin2\varphi\ (1-\cos\gamma)\\ &= 2\sin^2\vartheta\ \ \sin2\varphi\,\sin^2\frac{\gamma}{2}\\ &= \cos\gamma_2(\cos\gamma_3\sin\gamma_1-\sin\gamma_3\cos\gamma_1)+\sin\gamma_3\cos\gamma_1-\cos\gamma_3\sin\gamma_1\\ &= 2\sin(\gamma_3-\gamma_1)\sin^2\frac{\gamma_2}{2}\cdot\end{aligned}$$

En utilisant (1D-4b), on trouve :

$$\sin2\varphi = \sin(\gamma_3-\gamma_1) \tag{1D-5}$$

ce qui donne deux solutions possibles :

$$\varphi = \frac{\gamma_3-\gamma_1}{2} \tag{1D-6a}$$

ou :

$$\varphi = \frac{\gamma_1 - \gamma_3}{2} + \frac{\pi}{2}\cdot \tag{1D-6b}$$

Si on fait la différence $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12}$, on obtient :

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 21} - \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 12} &= 2u_z \sin\gamma \ = \ 2\cos\vartheta\ \sin\gamma \\ &= -(1+\cos\gamma_2)\ \sin(\gamma_1+\gamma_3)\end{aligned} \tag{1D-7}$$

ce qui conduit aux deux relations :

$$(1+\cos\gamma_2)\ \sin(\gamma_1+\gamma_3) = -2\cos\vartheta\ \sin\gamma \tag{1D-8a}$$

$$(1+\cos\gamma_2)\ \sin\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right)\ \cos\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right) = -\cos\vartheta\ \sin\gamma. \tag{1D-8b}$$

Des calculs similaires peuvent être faits à partir de $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 31}$ et $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{p}\ 13}$. En faisant la somme, nous avons :

$$\sin\gamma_2\ \sin\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right)\ \sin\left(\frac{\gamma_3-\gamma_1}{2}\right) \ = \ 2\sin\vartheta\ \cos\vartheta\ \sin^2\frac{\gamma}{2} \tag{1D-9a}$$

ou :

$$\sin\frac{\gamma_2}{2}\ \cos\frac{\gamma_2}{2}\sin\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right)\ \sin\left(\frac{\gamma_3-\gamma_1}{2}\right) \ = \ \sin\vartheta\ \cos\vartheta\ \sin^2\frac{\gamma}{2}\cdot \tag{1D-9b}$$

La différence donne :

$$\sin\gamma_2\ \cos\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right)\ \cos\left(\frac{\gamma_3-\gamma_1}{2}\right) \ = \ \sin\vartheta\ \sin\varphi\ \sin\gamma \tag{1D-10a}$$

ce qui est équivalent à :

$$\sin\frac{\gamma_2}{2}\ \cos\frac{\gamma_2}{2}\ \ \cos\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right)\ \cos\left(\frac{\gamma_3-\gamma_1}{2}\right) \ = \ \sin\vartheta\ \sin\varphi\ \sin\frac{\gamma}{2}\ \cos\frac{\gamma}{2}\cdot \tag{1D-10b}$$

Si on élève cette dernière égalité au carré et utilisant (1D-2) et (1D-4b), on trouve :

$$\cos^2\left(\frac{\gamma_3-\gamma_1}{2}\right) \ = \ \sin^2\varphi.$$

Seule la relation (1D-6b) est donc vérifiée. On a donc :

$$\varphi \ = \ \frac{\gamma_1-\gamma_3}{2} + \frac{\pi}{2}\ ; \qquad \frac{\gamma_1-\gamma_3}{2} \ = \ \varphi - \frac{\pi}{2} \tag{1D-11}$$

avec :

$$\cos\varphi \ = \ \sin\left(\frac{\gamma_3-\gamma_1}{2}\right)\ ; \qquad \sin\varphi \ = \ \cos\left(\frac{\gamma_3-\gamma_1}{2}\right)\cdot \tag{1D-12}$$

En remplaçant l'égalité (1D-12) dans (1D-9) et (1D-10), on obtient alors :

$$\sin\gamma_2 \sin\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right) \cos\varphi = 2\sin\vartheta\cos\vartheta\sin^2\frac{\gamma}{2} \tag{1D-13a}$$

ou :

$$\sin\frac{\gamma_2}{2}\cos\frac{\gamma_2}{2}\sin\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right) \cos\varphi = \sin\vartheta\cos\vartheta\sin^2\frac{\gamma}{2} \tag{1D-13b}$$

et :

$$\sin\gamma_2 \cos\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right) = \sin\vartheta\sin\gamma \tag{1D-14a}$$

ce qui est équivalent à :

$$\sin\frac{\gamma_2}{2}\cos\frac{\gamma_2}{2}\cos\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right) = \sin\vartheta\sin\frac{\gamma}{2}\cos\frac{\gamma}{2}\cdot \tag{1D-14b}$$

Les relations (1D-2) et (1D-4b) peuvent aussi s'écrire :

$$\left|\cos\frac{\gamma_2}{2}\right| \left|\cos\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right)\right| = \left|\cos\frac{\gamma}{2}\right| \tag{1D-15a}$$

$$\left|\sin\frac{\gamma_2}{2}\right| = \sin\vartheta \left|\sin\frac{\gamma}{2}\right|\cdot \tag{1D-15b}$$

Si on définit maintenant :

$$\varepsilon(x) = \frac{\sin x/2}{|\sin x/2|}\cdot \tag{1D-16}$$

La relation (1D-14b) s'écrit :

$$\varepsilon(\gamma_2)\cos\frac{\gamma_2}{2}\cos\left(\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\right) = \varepsilon(\gamma)\cos\frac{\gamma}{2}\cdot \tag{1D-17}$$

On peut calculer les angles d'Euler à l'aide des relations ci-dessus. On peut toujours choisir le signe de γ_2 quelconque d'après (1C-57b). Nous le prendrons par convention tel que le produit $\gamma_2\gamma$ soit positif ou nul.

Si on pose :

$$x_2 = \cos^2\vartheta\ (1-\cos\gamma)+\cos\gamma$$

l'angle γ_2 sera alors donné par :

$$\gamma_2 = \epsilon \arccos x_2. \tag{1D-18}$$

Les relations précédentes (1D-17) et (1D-8b) donneront les valeurs de $\cos(\gamma_1+\gamma_3)/2$ et de $\sin(\gamma_1+\gamma_3)/2$. On pourra en déduire la valeur de $(\gamma_1+\gamma_3)/2$. γ_1 et γ_3 seront alors donnés à l'aide de (1D-11). Pour $\cos\varphi$ différent de zéro, les relations (1D-13) doivent être vérifiées et ainsi confirmer ou infirmer le choix de γ_2.

Rotations actives

Dans le chapitre précédent nous avons vu comment se transforment des grandeurs physiques lorsqu'on passe par rotation d'un système de référence à un autre. Il existe un autre type de transformation que l'on appelle *active* dans laquelle on fait subir la rotation au *système physique* tout en restant dans le même système de référence. Leur étude et la comparaison avec les rotations passives fait l'objet de ce second chapitre.

1. Transformations géométriques

1.1. Transformation définie par les angles d'Euler

Soit un repère $(\mathcal{S})$ défini par trois vecteurs unitaires $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ orthogonaux. Dans une rotation active, on fait subir au *système physique* une rotation telle que le point M de coordonnées (x, y, z) dans le repère $(\mathcal{S})$ sera transformé en un *nouveau* point M' de coordonnées (x', y', z') dans le même repère $(\mathcal{S})$. Si on attache un repère $(\mathcal{S}')$ au système physique, $(\mathcal{S})$ et $(\mathcal{S}')$ étant initialement confondus, la transformation sera définie par :

– une rotation de γ_1 autour de Oz faisant passer du trièdre $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ au trièdre $(\mathbf{e}_{x_1}, \mathbf{e}_{y_1}, \mathbf{e}_{z_1})$;

– une rotation de γ_2 autour du nouvel axe $Oy = Oy_1$ faisant passer le trièdre $(\mathbf{e}_{x_1}, \mathbf{e}_{y_1}, \mathbf{e}_{z_1})$ au trièdre $(\mathbf{e}_{x_2}, \mathbf{e}_{y_2}, \mathbf{e}_{z_2})$;

– une rotation de γ_3 autour du nouvel axe $Oz = Oz_2$ faisant passer du trièdre $(\mathbf{e}_{x_2}, \mathbf{e}_{y_2}, \mathbf{e}_{z_2})$ au trièdre $(\mathbf{e}'_{x'}, \mathbf{e}'_{y'}, \mathbf{e}'_{z'})$.

Il est clair que la loi de transformation faisant passer les vecteurs unitaires $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ aux vecteurs unitaires $(\mathbf{e}'_{x'}, \mathbf{e}'_{y'}, \mathbf{e}'_{z'})$ est la même que dans une rotation passive :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_3 & \sin\gamma_3 & 0 \\ -\sin\gamma_3 & \cos\gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma_2 & 0 & -\sin\gamma_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\gamma_2 & 0 & \cos\gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma_1 & \sin\gamma_1 & 0 \\ -\sin\gamma_1 & \cos\gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \qquad (1\text{-}7)$$

Cette égalité s'écrit encore :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}\,(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \tag{2-1}$$

Par contre, la loi de transformation des coordonnées est différente de celle du cas passif. En effet, nous avons :

$$\mathbf{r} \;=\; x\,\mathbf{e}_x \,+\, y\,\mathbf{e}_y \,+\, z\,\mathbf{e}_z \tag{2-2}$$

x, y et z étant les coordonnées du point M dans le repère $(\mathcal{S})$. Dans ce dernier, le *nouveau point* M' aura les coordonnées x', y' et z' telles que :

$$\mathbf{r}' \;=\; x'\,\mathbf{e}_x \,+\, y'\,\mathbf{e}_y \,+\, z'\,\mathbf{e}_z. \tag{2-3a}$$

Ses coordonnées suivant les axes unitaires $(\mathbf{e}'_{x'},\, \mathbf{e}'_{y'},\, \mathbf{e}'_{z'})$ du repère $(\mathcal{S}')$ sont évidemment les mêmes que celles de M suivant $(\mathbf{e}_x,\, \mathbf{e}_y,\, \mathbf{e}_z)$:

$$\mathbf{r}' \;=\; x\,\mathbf{e}'_{x'} \,+\, y\,\mathbf{e}'_{y'} \,+\, z\,\mathbf{e}'_{z'}. \tag{2-3b}$$

L'égalité entre les relations (2-3a) et (2-3b) peut aussi s'écrire :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x' & y' & z' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}\,(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \end{aligned}$$

soit :

$$\begin{pmatrix} x' & y' & z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}\,(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \\ \\ \end{pmatrix}.$$

En prenant la transposée de cette relation, on obtient :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{\mathcal{R}^{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}}(\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

La matrice $\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1)$ étant orthogonale et réelle, on a :

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1) &= \mathcal{R}_{\mathrm{p}}^{\mathbf{e}}(-\gamma_1, -\gamma_2, -\gamma_3)\\ &\equiv \mathcal{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)\end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{2-4a}$$

ou sous la forme du produit de 3 matrices :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\gamma_1 & -\sin\gamma_1 & 0 \\ \sin\gamma_1 & \cos\gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma_2 & 0 & \sin\gamma_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\gamma_2 & 0 & \cos\gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\gamma_3 & -\sin\gamma_3 & 0 \\ \sin\gamma_3 & \cos\gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \tag{2-4b}$$

Les éléments de la matrice de rotation peuvent être calculés explicitement. On trouve :

$$\begin{pmatrix} \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ ij} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \cos\gamma_1\cos\gamma_2\cos\gamma_3 - \sin\gamma_1\sin\gamma_3 & -\cos\gamma_1\cos\gamma_2\sin\gamma_3 - \sin\gamma_1\cos\gamma_3 & \cos\gamma_1\sin\gamma_2 \\ \sin\gamma_1\cos\gamma_2\cos\gamma_3 + \cos\gamma_1\sin\gamma_3 & -\sin\gamma_1\cos\gamma_2\sin\gamma_3 + \cos\gamma_1\cos\gamma_3 & \sin\gamma_1\sin\gamma_2 \\ -\sin\gamma_2\cos\gamma_3 & \sin\gamma_2\sin\gamma_3 & \cos\gamma_2 \end{pmatrix} \tag{2-5}$$

ou encore :

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} &= \cos\gamma_1\cos\gamma_2\cos\gamma_3 - \sin\gamma_1\sin\gamma_3\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} &= \sin\gamma_1\cos\gamma_2\cos\gamma_3 + \cos\gamma_1\sin\gamma_3\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} &= -\sin\gamma_2\cos\gamma_3\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} &= -\cos\gamma_1\cos\gamma_2\sin\gamma_3 - \sin\gamma_1\cos\gamma_3\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} &= -\sin\gamma_1\cos\gamma_2\sin\gamma_3 + \cos\gamma_1\cos\gamma_3\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} &= \sin\gamma_2\sin\gamma_3\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} &= \cos\gamma_1\sin\gamma_2\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} &= \sin\gamma_1\sin\gamma_2\\
\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} &= \cos\gamma_2.
\end{aligned} \tag{2-6}$$

La relation (2-4a) s'inverse pour donner :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}. \tag{2-4c}$$

On remarquera que pour passer des transformations géométriques passives aux transformations actives, il suffit d'effectuer les substitutions suivantes :

$$\begin{aligned} \gamma_1 &\rightarrow -\gamma_3 \\ \gamma_2 &\rightarrow -\gamma_2 \\ \gamma_3 &\rightarrow -\gamma_1. \end{aligned} \tag{2-7}$$

D'après la définition de $\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}$, l'égalité (2-1) s'écrit aussi :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix}. \tag{2-8a}$$

Cette égalité s'inverse pour donner :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}'_{x'} \\ \mathbf{e}'_{y'} \\ \mathbf{e}'_{z'} \end{pmatrix}. \tag{2-8b}$$

1.2. Transformation définie par un vecteur unitaire et un angle

Si on exprime les cosinus directeurs du vecteur $\mathbf{u}$ en fonction des angles ϑ et φ, on a :

$$\begin{aligned} u_x &= \sin\vartheta\cos\varphi \\ u_y &= \sin\vartheta\sin\varphi \\ u_z &= \cos\vartheta. \end{aligned}$$

La transformation géométrique se fait simplement à partir du cas passif à l'aide de la loi de substitution :

$$\gamma \rightarrow -\gamma. \tag{2-9}$$

On pose :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} &= u_x^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} &= u_x u_y(1-\cos\gamma)+u_z\sin\gamma \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} &= u_x u_z(1-\cos\gamma)-u_y\sin\gamma \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} &= u_x u_y(1-\cos\gamma)-u_z\sin\gamma \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} &= u_y^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} &= u_y u_z(1-\cos\gamma)+u_x\sin\gamma \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} &= u_x u_z(1-\cos\gamma)+u_y\sin\gamma \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} &= u_y u_z(1-\cos\gamma)-u_x\sin\gamma \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} &= u_z^2(1-\cos\gamma)+\cos\gamma. \end{aligned} \tag{2-10}$$

Les coordonnées du point M' sont données en fonction de celles du point M par la relation (2-4a) et inversement celles de M en fonction de M' par la relation (2-4c).

Signalons enfin que les relations (2-8a) et (2-8b) qui permettent d'exprimer la transformation du système physique en fonction des vecteurs unitaires restent valables dans ce cas.

2. Transformation d'un champ scalaire

2.1. Définition

Soit $|\,\Psi\,\rangle$ le ket décrivant l'état du système avant la rotation. L'amplitude de probabilité de trouver une particule sans spin au point M de coordonnées (x, y, z) est égale à $\Psi(x,y,z) = \langle\, x,y,z \mid \Psi\,\rangle$. Après la rotation du système physique, le nouvel état sera décrit par le ket $|\,\Psi^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}\,\rangle$. Dans le repère $(\mathcal{S})$ le point M sera transformé en M' de coordonnées (x', y', z') et $\langle\, x',y',z' \mid \Psi^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}\,\rangle = \Psi^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z')$ représente l'amplitude de probabilité de trouver la particule en M' après la rotation. Considérons maintenant un observateur attaché au repère $(\mathcal{S}')$, les deux repères $(\mathcal{S})$ et $(\mathcal{S}')$ étant initialement confondus. Pour cet observateur, rien n'aura changé après la rotation : le point M' aura dans le repère final $(\mathcal{S}')$ les mêmes coordonnées $x' = x$, $y' = y$, $z' = z$, (*cf.* Éq. (2-3b)) et l'état physique sera toujours le même avec une amplitude égale à $\Psi(x,y,z)$. Cette grandeur étant indépendante du repère, on aura par définition :

$$\Psi^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}(x',y',z') = \Psi(x,y,z). \tag{2-11}$$

Cette égalité est l'analogue de la relation (1-18) trouvée pour une rotation passive. Comme dans ce dernier cas, il existe un opérateur quantique $\hat{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}$ associé tel que :

$$\hat{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}} \mid \Psi\,\rangle = \mid \Psi^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}\,\rangle. \tag{2-12}$$

Rappelons que pour trouver la forme explicite de l'opérateur de rotation, nous avons envisagé des rotations infinitésimales à partir de l'égalité (1-18). Il est inutile de reprendre ces calculs (jusqu'au second ordre) en partant de la relation (2-11) puisque le résultat final peut être trouvé en utilisant les lois de substitution (2-7) ou (2-9). On a alors :

$$\hat{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_z}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 L_y}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_z} \tag{2-13}$$

ou :

$$\hat{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\mathbf{u}\cdot\mathbf{L}} \quad . \tag{2-14}$$

On voit en comparant l'ordre des matrices et des opérateurs respectivement dans les relations (2-4b) et (2-13) que l'homomorphisme entre les rotations géométriques et quantiques est conservé dans le cas actif.

Exemple. On considère une particule libre se déplaçant dans la direction Oy. Dans la représentation d'impulsion, l'état physique s'écrit :

$$| \, \Psi \, \rangle \; = | \; (0, k, 0) \, \rangle$$

et en représentation $\{\mathbf{r}\}$:

$$\Psi(x, y, z) = \mathrm{e}^{iky}. \tag{2-15}$$

Si on effectue une rotation du système physique de $\pi/2$ autour de l'axe Ox, cette particule se déplacera suivant la direction Oz. En effet les éléments de la matrice de la transformation géométrique pourront être calculés à partir de la relation (2-10) avec $u_x = 1$, $u_y = u_z = 0$ et $\gamma = \pi/2$. D'après (2-4a) et (2-4c), on a :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{2-16a}$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}. \tag{2-16b}$$

La relation (2-16b) donne alors $ky = kz'$ d'où :

$$\Psi(x, y, z) \; = \; \Psi^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}(x', y', z') \; = \; \mathrm{e}^{ikz'}$$

ce qui donne :

$$| \; \Psi^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}} \, \rangle = | \; (0, 0, k) \, \rangle. \tag{2-17}$$

2.2. Moment angulaire orbital et matrices de rotation

D'après la forme analytique de l'opérateur de rotation, un état propre des opérateurs $\mathbf{L}^2$ et L_z sera transformé en une combinaison linéaire d'états propres de $\hat{L}_z$:

$$\hat{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}} \; | \; l \, m \, \rangle \; = \; \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{M}^{(l)}_{m' \, m}(A) \; \; | \; l \, m' \, \rangle \tag{2-18}$$

avec :

$$\langle \, l \, m' \; | \; \hat{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}} \; | \; l \, m \, \rangle = \mathcal{M}^{(l)}_{m' \, m}(A) \qquad . \tag{2-19}$$

Dans le cas où la rotation est définie par les angles d'Euler, on introduit des matrices dont les éléments sont définis par :

$$\mathcal{D}^{(l)}_{m' \, m}(\mathrm{A}\, ; \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \; = \; \langle l \, m' \mid \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_z} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 L_y} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_z} \; | \; l \, m \rangle. \tag{2-20}$$

La forme explicite de ces éléments pour un spin entier ou demi-entier est donnée dans le complément B.

On peut utiliser la définition d'un champ scalaire pour établir la loi de transformation des harmoniques sphériques dans une rotation active.

Si ϑ, φ et ϑ', φ' sont les angles dans le repère $(\mathcal{S})$ définissant respectivement le point M et son transformé M', nous avons :

$$\begin{aligned}
\langle \vartheta', \varphi' \mid \hat{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}} \mid l\,m \rangle &= \langle \vartheta', \varphi' \mid [l\,m]^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}} \rangle = [Y_l^m]^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}(\vartheta', \varphi') \\
&= \langle \vartheta, \varphi \mid l\,m \rangle = Y_l^m(\vartheta, \varphi) \\
&= \langle \vartheta', \varphi' \mid \textstyle\sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}_{m'\,m}^{(l)}(\mathrm{A}\,; \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \mid l\,m' \rangle \\
&= \textstyle\sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}_{m'\,m}^{(l)}(\mathrm{A}\,; \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \langle \vartheta', \varphi' \mid l\,m' \rangle \\
&= \textstyle\sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}_{m'\,m}^{(l)}(\mathrm{A}\,; \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) Y_l^{m'}(\vartheta', \varphi').
\end{aligned}$$

D'où le résultat :

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) \;=\; \sum_{m'=-l}^{l} \mathcal{D}_{m'\,m}^{(l)}(\mathrm{A}\,; \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)\; Y_l^{m'}\,(\vartheta', \varphi'). \tag{2-21a}$$

Cette relation s'inverse pour donner :

$$Y_l^{m'}(\vartheta', \varphi') \;=\; \sum_{m=-l}^{l} \mathcal{D}_{m'\,m}^{(l)\,*}\,(\mathrm{A}\,; \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)\; Y_l^{m}\,(\vartheta, \varphi). \tag{2-21b}$$

Ces relations établissent la correspondance qui existe entre deux points *distincts* transformés l'un de l'autre par une rotation active.

Relations entre les harmoniques sphériques et les matrices de rotation

La première relation peut être déduite de (1-35a)

$$\begin{aligned}
Y_l^m(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, \mathcal{D}_{0\,m}^{(l)}(\mathrm{P}\,; \gamma_3, \gamma_2 = \vartheta, \gamma_1 = \varphi) \\
&= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, \langle l\,0 \mid \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_z} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vartheta L_y} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\varphi L_z} \mid l\,m \rangle \\
&= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, \langle l\,m \mid \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\varphi L_z} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vartheta L_y} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_z} \mid l\,0 \rangle^* \\
&= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, \mathcal{D}_{m\,0}^{(l)\,*}(\mathrm{A}\,; \gamma_1 = \varphi, \gamma_2 = \vartheta, \gamma_3).
\end{aligned} \tag{2-22a}$$

De même, en utilisant (1-37a), on obtient :

$$\begin{aligned}
Y_l^{m'}(\vartheta, \varphi) &= (-1)^{m'} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{D}_{m'\,0}^{(l)}(\mathrm{P}\,; \gamma_3 = \varphi, \gamma_2 = \vartheta, \gamma_1) \\
&= (-1)^{m'} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, \langle l\,m' \mid \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\varphi L_z} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vartheta L_y} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_z} \mid l\,0 \rangle \\
&= (-1)^{m'} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, \langle l\,0 \mid \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_z} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vartheta L_y} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\varphi L_z} \mid l\,m' \rangle^* \\
&= (-1)^{m'} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{D}_{0\,m'}^{(l)\,*}(\mathrm{A}\,; \gamma_1, \gamma_2 = \vartheta, \gamma_3 \,=\, \varphi).
\end{aligned} \tag{2-23a}$$

Ces deux dernières relations peuvent s'écrire en fonction des matrices de rotations réduites :

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, d^{(l)}_{m\,0}(A;\vartheta)\;\mathrm{e}^{im\varphi} \tag{2-22b}$$

$$Y_l^{m'}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,(-1)^{m'}\, d^{(l)}_{0\,m'}(A;\vartheta)\;\mathrm{e}^{im'\varphi}. \tag{2-23b}$$

3. Transformation des observables dans $\mathcal{E}^{\mathrm{r}}$

3.1. Définition

Le raisonnement que nous avons fait pour les rotations passives pour trouver la loi de transformation des observables peut être refait ici. Nous donnerons uniquement le résultat final : l'opérateur transformé de l'opérateur $\hat{O}$, que nous noterons $\hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}}$ est défini par la relation :

$$\hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}} \;=\; \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}\hat{O}\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{a}} \tag{2-24a}$$

tel que

$$\begin{aligned}\langle \Psi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}} \mid \hat{O}^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}} \mid \Phi^{R^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}} \rangle &= \langle \Psi \mid \hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{a}}\; \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}\hat{O}\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{a}}\; \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}} \mid \Phi \rangle \\ &= \langle \Psi \mid \hat{O} \mid \Phi \rangle. \end{aligned} \tag{2-24b}$$

Exemple. On peut sur l'exemple de la particule libre du paragraphe précédent illustrer la loi de transformation des observables. Avant la rotation, la particule est dans un état propre de l'opérateur $\hat{P}_y$ puisque :

$$\hat{P}_y \;=\; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$$

d'où :

$$\hat{P}_y\,\mathrm{e}^{iky} \;=\; \frac{\hbar}{i}\,ik\,\mathrm{e}^{iky} \;=\; \hbar k\, e^{iky}$$

mais :

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial x'}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial y'}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y'} + \frac{\partial z'}{\partial y}\frac{\partial}{\partial z'}$$

ce qui donne dans notre cas particulier (2-16a) :

$$\frac{\partial}{\partial y} \;=\; \frac{\partial}{\partial z'}.$$

La loi de transformation s'écrit donc :

$$\hat{P}_y \;=\; \hat{P}_{z'}$$

ou encore :

$$\hat{P}_y \to \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}\hat{P}_y\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{a}} \;=\; \hat{P}_z \tag{2-25}$$

ce qui est le résultat attendu d'après (2-17).

3.2. Opérateurs vectoriels et tensoriels

L'opérateur $\hat{P}_y$ du paragraphe précédent est une observable vectorielle au sens de la transformation active. Nous allons maintenant donner les lois de transformation de telles observables. Là encore il suffit de procéder par analogie avec le cas passif. Nous avons vu que la loi de transformation des composantes d'un vecteur ou d'un opérateur vectoriel s'exprimait exactement de la même façon. Pour s'en convaincre, il suffit par exemple de comparer (1-46b) et (1B-15b) pour les composantes cartésiennes et (1-59a) et (1B-18a) pour les composantes standard. La loi de transformation s'écrit en conséquence :

$$\begin{pmatrix} \hat{V}_x \\ \hat{V}_y \\ \hat{V}_z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{V}_x \\ \hat{V}_y \\ \hat{V}_z \end{pmatrix} \tag{2-26}$$

et :

$$\hat{V}_\mu \longrightarrow \sum_{\nu=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{\nu\,\mu}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\,\hat{V}_\nu \quad . \tag{2-27}$$

Cette dernière transformation peut se généraliser aux *opérateurs tensoriels irréductibles d'ordre* k :

$$\hat{T}^k_\mu \longrightarrow \sum_{\nu=-k}^{k} \mathcal{D}^{(k)}_{\nu\,\mu}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\,\hat{T}^k_\nu \quad . \tag{2-28}$$

Comme dans le cas passif, la transformation d'une composante cartésienne quelconque d'un opérateur vectoriel peut se trouver d'une manière purement géométrique. Soit $\hat{\mathbf{V}}$ une observable ayant trois composantes cartésiennes $\hat{V}_x, \hat{V}_y, \hat{V}_z$ et $\mathbf{n}$ un vecteur quelconque. Étudions la loi de transformation de l'opérateur $\hat{\mathbf{V}} \cdot \mathbf{n} = \hat{V}_n$. On écrit le vecteur $\mathbf{n}$ initial sur la base $(\mathbf{e}_x,\, \mathbf{e}_y,\, \mathbf{e}_z)$:

$$\mathbf{n} = n_x\,\mathbf{e}_x + n_y\,\mathbf{e}_y + n_z\,\mathbf{e}_z \tag{2-29}$$

et

$$\hat{\mathbf{V}} \cdot \mathbf{n} = \hat{V}_n = \hat{V}_x\,n_x + \hat{V}_y\,n_y + \hat{V}_z\,n_z. \tag{2-30}$$

Dans la rotation du système physique, le vecteur $\mathbf{n}$ sera transformé en un autre vecteur $\mathbf{n}'$ (voir (2-3b)) :

$$\mathbf{n}' = n_x\,\mathbf{e}'_{x'} + n_y\,\mathbf{e}'_{y'} + n_z\,\mathbf{e}'_{z'}. \tag{2-31}$$

On peut alors exprimer à partir de (2-8a) les composantes de ce vecteur en fonction des axes fixes :

$$\begin{aligned} \mathbf{n}' = n_x\,&(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11}\,\mathbf{e}_x + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21}\,\mathbf{e}_y + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31}\,\mathbf{e}_z) \\ + n_y\,&(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12}\,\mathbf{e}_x + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22}\,\mathbf{e}_y + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32}\,\mathbf{e}_z) \\ + n_z\,&(\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13}\,\mathbf{e}_x + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23}\,\mathbf{e}_y + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33}\,\mathbf{e}_z) \end{aligned}$$

ou en regroupant les termes :

$$\begin{aligned}\mathbf{n}' = & (\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11}\ n_x\ + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12}\ n_y\ + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13}\ n_z)\,\mathbf{e}_x \\ & + (\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21}\ n_x\ + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22}\ n_y\ + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23}\ n_z)\,\mathbf{e}_y \\ & + (\mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31}\ n_x\ + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32}\ n_y\ + \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33}\ n_z)\,\mathbf{e}_z\end{aligned}$$

d'où :

$$\mathbf{n}' \ = \ n'_x\ \mathbf{e}_x \ + \ n'_y\ \mathbf{e}_y \ + \ n'_z\ \mathbf{e}_z \tag{2-32}$$

avec :

$$\begin{pmatrix} n'_x \\ n'_y \\ n'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}. \tag{2-33}$$

Cette relation n'est rien d'autre qu'une généralisation de (2-4a) à un vecteur quelconque.

On aura alors :

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n} \ = \ \hat{V}_n \rightarrow \hat{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}}\hat{V}_n\hat{R}^{\mathbf{r}\,\dagger}_{\mathrm{a}} \ & = \ \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n}' \\ & = \hat{V}_{n'} \\ & = \hat{V}_x\ n'_x \ + \ \hat{V}_y\ n'_y \ + \hat{V}_z\ n'_z.\end{aligned} \tag{2-34}$$

La loi de transformation de l'opérateur $\hat{V}_y$ par exemple se fait en posant $n_x = n_z = 0$. Dans la rotation particulière du paragraphe précédent, on a

$$\begin{pmatrix} n'_x \\ n'_y \\ n'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ce qui donne : $n'_x \ = \ n'_y \ = \ 0$ et $n'_z \ = \ 1$.

4. Transformation d'un champ de spineurs

4.1. Transformation dans l'espace $\mathcal{E}^{\mathrm{s}}$

L'opérateur de rotation associé à la rotation active s'écrit, en analogie avec le cas passif :

$$\hat{R}^{s}_{\mathrm{a}} \ = \ \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\,\mathbf{u}\cdot\mathbf{S}} \tag{2-35}$$

ou :

$$\hat{R}^{s}_{\mathrm{a}} \ = \ \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 S_z}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 S_y}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 S_z} \quad . \tag{2-36}$$

L'opérateur de rotation peut aussi s'exprimer en fonction des matrices de Pauli :

$$\hat{R}^{s}_{\mathrm{a}} \ = \ \cos\frac{\gamma}{2}\ I \ - \ i\ \sin\frac{\gamma}{2}\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{u} \tag{2-37}$$

ou, en tenant compte de la relation $\mathbf{S} = \dfrac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$:

$$\hat{R}^s_{\mathrm{a}} = \cos\frac{\gamma}{2}\, I \; - \; 2\frac{i}{\hbar}\, \sin\frac{\gamma}{2}\; \mathbf{S}\cdot\mathbf{u} \qquad . \tag{2-38}$$

Si l'état du physique est décrit dans l'état initial par le ket $|\; s\; m\,\rangle$, après la rotation du système physique, il sera décrit par le ket $|\; [s\; m]^{R^s_{\mathrm{a}}}\,\rangle$ tel que :

$$\begin{aligned} |\; s\; m\,\rangle \rightarrow |\; [s\; m]^{R^s_{\mathrm{a}}}\,\rangle &= \hat{R}^s_{\mathrm{a}}\; |\; s\; m\,\rangle \\ &= \sum_{m'=-s}^{s} [\,\hat{R}^s_{\mathrm{a}}\,]_{m'\,m}\; |\; s\; m'\,\rangle \end{aligned} \tag{2-39}$$

avec :

$$[\,\hat{R}^s_{\mathrm{a}}\,]_{m'\,m} \; = \langle\, s\; m' \;|\; \hat{R}^s_{\mathrm{a}} \;|\; s\; m\,\rangle. \tag{2-40}$$

En particulier pour une rotation définie par les angles d'Euler, on a :

$$[\,\hat{R}^s_{\mathrm{a}}\,]_{m'\,m} \; = \mathcal{D}^{(s)}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \tag{2-41}$$

et la transformation s'écrit :

$$\begin{aligned} |\; s\; m\,\rangle \rightarrow |\; [s\; m]^{R^s_{\mathrm{a}}}\,\rangle &= \hat{R}^s_{\mathrm{a}}\; |\; s\; m\,\rangle \\ &= \sum_{m'=-s}^{s} \mathcal{D}^{(s)}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\; |\; s\; m'\,\rangle. \end{aligned} \tag{2-42}$$

La loi de transformation des observables agissant dans l'espace $\mathcal{E}^s$ est la même que celle dans l'espace $\mathcal{E}^r$:

$$\hat{O}^{R^s_{\mathrm{a}}} \; = \hat{R}^s_{\mathrm{a}}\, \hat{O}\, \hat{R}^{s\,\dagger}_{\mathrm{a}} \tag{2-43}$$

tel que :

$$\langle\, [s\;\; m]^{R^s_{\mathrm{a}}} \;|\; \hat{O}^{R^s_{\mathrm{a}}} \;|\; [s\;\; m']^{R^s_{\mathrm{a}}}\,\rangle \; = \langle\, s\;\; m \,|\, \hat{O} \;|\; s\;\; m'\,\rangle. \tag{2-44}$$

Exemple. Considérons un système physique constitué par une particule de spin $1/2$ dont l'état quantique est décrit par le $|\; 1/2\;\; 1/2\,\rangle$. Son spin est donc dirigé positivement suivant le vecteur $\mathbf{n}$ confondu avec le vecteur unitaire $\mathbf{e}_z$. Après une rotation de $\gamma_1 = \varphi$ autour de Oz, suivie d'une rotation de $\gamma_2 = \vartheta$ autour du nouvel axe Oy, le spin de la particule sera dirigé positivement suivant $\mathbf{n}'$, vecteur transformé de $\mathbf{n}$.

D'après (2-6) et (2-33), on a :

$$\begin{pmatrix} n'_x \\ n'_y \\ n'_z \end{pmatrix} \; = \; \begin{pmatrix} \cos\varphi\, \cos\vartheta & -\sin\varphi & \cos\varphi\, \sin\vartheta \\ \sin\varphi\, \cos\vartheta & \cos\varphi & \sin\varphi\, \sin\vartheta \\ -\sin\vartheta & 0 & \cos\vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2-45}$$

d'où $n'_x = \cos\varphi \sin\vartheta$, $n'_y = \sin\varphi \sin\vartheta$, $n'_z = \cos\vartheta$.

Nous allons retrouver ce résultat en faisant agir l'opérateur de rotation sur le vecteur propre initial. Dans le cas particulier nous concernant, la matrice de rotation est donnée par (2B-12) :

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(A\,;\varphi\,,\vartheta\,,0\,) \;=\; \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,\cos(\vartheta/2) & -\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,\sin(\vartheta/2) \\ \mathrm{e}^{i\varphi/2}\,\sin(\vartheta/2) & \mathrm{e}^{i\varphi/2}\,\cos(\vartheta/2) \end{pmatrix} \tag{2-46}$$

et d'après (2-40) et (1-70a) :

$$\begin{aligned}\hat{R}_{\mathrm{a}}^{s}\mid 1/2\;\;1/2\,\rangle &= \mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,\cos\frac{\vartheta}{2}\;\mid 1/2\;\;1/2\,\rangle + \mathrm{e}^{i\varphi/2}\,\sin\frac{\vartheta}{2}\;\mid 1/2\;\;-1/2\,\rangle \\ &= \mid 1/2\;\;1/2\,\rangle_{n'}\end{aligned} \tag{2-47}$$

ce qui est le résultat attendu.

Étudions maintenant la loi de transformation des observables dans ce cas particulier. D'après la relation (2-34), on doit avoir :

$$\begin{aligned}\hat{S}_n = \hat{S}_z \;\rightarrow \hat{R}_{\mathrm{a}}^{s}\hat{S}_z\hat{R}_{\mathrm{a}}^{s\,\dagger} &= \;\hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{n}' \\ &= \hat{S}_{n'} \\ &= \hat{S}_x\;n'_x \;+\; \hat{S}_y\;n'_y\;+\hat{S}_z\;n'_z.\end{aligned} \tag{2-48}$$

Nous allons retrouver ce résultat par un calcul explicite. En effet :

$$(\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{n})^{R_{\mathrm{a}}^{s}} \;=\; S_z^{\;R_{\mathrm{a}}^{s}} \;=\; \hat{R}_{\mathrm{a}}^{s}\,S_z\,\hat{R}_{\mathrm{a}}^{s\,\dagger} \tag{2-49}$$

avec :

$$\hat{R}_{\mathrm{a}}^{s} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\varphi S_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vartheta S_y} \qquad . \tag{2-50}$$

L'opérateur $\hat{R}_{\mathrm{a}}^{s}$ peut encore s'écrire :

$$\hat{R}_{\mathrm{a}}^{s} \;=\; a + b\,\sigma_x + c\,\sigma_y + d\,\sigma_z \tag{2-51}$$

avec :

$$\begin{aligned} a &= \cos\frac{\vartheta}{2}\,\cos\frac{\varphi}{2} & c &= -\,i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\,\cos\frac{\varphi}{2} \\ b &= \,i\,\sin\frac{\vartheta}{2}\,\sin\frac{\varphi}{2} & d &= -\,i\,\cos\frac{\vartheta}{2}\,\sin\frac{\varphi}{2}\,\cdot \end{aligned} \tag{2-52}$$

Finalement, on trouve :

$$\begin{aligned}\hat{R}_{\mathrm{a}}^{s}\hat{S}_z\hat{R}_{\mathrm{a}}^{s\,\dagger} &= \cos\varphi\,\sin\vartheta\;S_x\;+\sin\varphi\,\sin\vartheta\;S_y\;+\cos\vartheta\;S_z \\ &= \;\mathbf{S}\cdot\mathbf{n}' \qquad .\end{aligned} \tag{2-53}$$

4.2. Transformation dans l'espace $\mathcal{E}^{\mathrm{r}} \otimes \mathcal{E}^{\mathrm{s}}$

Nous ne reprendrons pas en détail les développements effectués dans le cas des rotations passives et nous ne donnerons que les principaux résultats. Rappelons que l'état physique avant la rotation peut être décrit dans le repère $(\mathcal{S})$ par le ket

$$| \, \Psi \, \rangle \, = \sum_{m=-1/2}^{1/2} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \, | \, \mathbf{r} \; m \, \rangle \, \Psi_m(\mathbf{r}) \tag{1-94}$$

ou bien sous la forme d'un spineur à 2 composantes :

$$\big[\, \Psi \, \big] \, (\, \mathbf{r} \,) \, = \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \qquad . \tag{1-95}$$

En représentation $\{\mathbf{r}\}$, le ket $| \, \Psi \, \rangle$ s'écrit

$$\langle \, \mathbf{r} \, | \, \Psi \, \rangle \, = \sum_{m=-1/2}^{1/2} \Psi_m(\mathbf{r}) \, | \, m \, \rangle \qquad . \tag{1-96}$$

Le bra associé $\langle \Psi \, |$ s'écrit en développant de la même manière :

$$\langle \Psi \, | = \sum_{m=-1/2}^{1/2} \int d^3\mathbf{r} \; \Psi_m^*(\mathbf{r}) \langle \, \mathbf{r} \; m \, | \qquad . \tag{1-97}$$

Ce qui permet de définir le spineur adjoint :

$$\big[\, \Psi \, \big]^{\dagger} \, (\, \mathbf{r} \,) \, = \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}^*(\mathbf{r}) & \Psi_{-1/2}^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \qquad . \tag{1-98}$$

Après la rotation, le nouvel état sera représenté dans le même repère par le ket $| \, \Psi^{R_{\mathrm{a}}} \, \rangle$ défini par :

$$| \, \Psi^{R_{\mathrm{a}}} \, \rangle \, = \, \hat{R}_{\mathrm{a}} \, | \, \Psi \, \rangle \tag{2-54}$$

avec :

$$\hat{R}_{\mathrm{a}} = \hat{R}_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}} \hat{R}_{\mathrm{a}}^{s} \qquad . \tag{2-55}$$

Si $(x, \, y, \, z)$ et $(x', \, y', \, z')$ représentent respectivement les coordonnées du point M et de son transformé M' dans $(\mathcal{S})$, les composantes des spineurs décrivant le système physique avant et après la rotation sont reliées par :

$$\begin{pmatrix} \Psi_{1/2}^{R_{\mathrm{a}}}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1/2}^{R_{\mathrm{a}}}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \\ \hat{R}_{\mathrm{a}}^{s} \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \\ \Psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \tag{2-56a}$$

ou bien :

$$\begin{pmatrix} \Psi_{1/2}^{R_{\mathrm{a}}}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1/2}^{R_{\mathrm{a}}}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \\ \hat{R}_{\mathrm{a}}^{s} \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1/2}^{R_{\mathrm{a}}^{\mathbf{r}}}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \qquad . \tag{2-56b}$$

Sous forme condensée, on peut écrire :

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{a}}\right](\mathbf{r}') = \left(\hat{R}_\mathrm{a}^{s}\right)\left[\Psi\right](\mathbf{r}) \tag{2-57a}$$

ou :

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{a}}\right](\mathbf{r}') = \left(\hat{R}_\mathrm{a}^{s}\right)\left[\Psi^{R_\mathrm{a}^{\mathbf{r}}}\right](\mathbf{r}') \quad . \tag{2-57b}$$

L'opérateur de rotation quantique s'exprime, comme dans le cas passif, en fonction du moment cinétique total :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{1-146}$$

soit en fonction des angles d'Euler :

$$\hat{R}_\mathrm{a} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 J_z}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 J_z} \tag{2-58}$$

soit en fonction d'un vecteur unitaire et d'un axe :

$$\hat{R}_\mathrm{a} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\mathbf{u}\cdot\mathbf{J}} \quad . \tag{2-59}$$

Le transformé d'un opérateur $\hat{O}$ quelconque agissant dans l'espace total s'écrit :

$$\hat{O}^{R_\mathrm{a}} = \hat{R}_\mathrm{a}\,\hat{O}\,\hat{R}_\mathrm{a}^{\dagger} \quad . \tag{2-60}$$

Exemple. On considère une particule libre de spin 1/2 se dirigeant suivant $-Ox$ avec son spin dirigé négativement suivant l'axe Ox. Le ket décrivant cet état s'écrit :

$$|\,\Psi\,\rangle = |\,(-k,0,0)\,\rangle|\,1/2\ \ -1/2\,\rangle_x \tag{2-61}$$

avec ($\vartheta = \pi/2$, $\varphi = 0$ dans (1-70b)) :

$$|\,1/2\ \ -1/2\,\rangle_x = \frac{\sqrt{2}}{2}\,|\,1/2\ \ 1/2\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\,|\,1/2\ \ -1/2\rangle.$$

En terme de spineur, l'état initial s'écrit :

$$\begin{pmatrix}\Psi_{1/2}(\mathbf{r})\\ \\ \Psi_{-1/2}(\mathbf{r})\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\dfrac{\sqrt{2}}{2}\ \mathrm{e}^{-ikx}\\ \\ -\dfrac{\sqrt{2}}{2}\ \mathrm{e}^{-ikx}\end{pmatrix}. \tag{2-62}$$

Considérons maintenant une rotation de $\pi/2$ autour de l'axe Oy. La relation (2-4c) avec $\gamma = \pi/2$ dans (2-10) donne :

$$\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 0 & -1\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x'\\ y'\\ z'\end{pmatrix} \tag{2-63}$$

d'où ((2B-12) avec $\gamma_1 = \gamma_3 = 0$; $\gamma_2 = \pi/2$) :

$$\begin{pmatrix} \Psi_{1/2}^{R_a}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1/2}^{R_a}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \; \mathrm{e}^{-ikx} \\ \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \; \mathrm{e}^{-ikx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ikz'} \\ \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2-64}$$

On a donc :

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \; \mathrm{e}^{-ikx} \\ \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \; \mathrm{e}^{-ikx} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ikz} \\ \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2-65}$$

ou :

$$|\ (-k, 0, 0)\,\rangle|\ 1/2 \quad -1/2\,\rangle_x \ \rightarrow |\ (0, 0, k)\,\rangle|\ 1/2\ \ 1/2\,\rangle. \tag{2-66}$$

La particule libre, après la rotation, se dirige dans la direction portée par l'axe Oz avec son spin dirigé positivement suivant Oz. C'est bien le résultat attendu.

5. Transformation d'un champ de vecteurs

5.1. Base cartésienne

Soit dans le repère $(\mathcal{S})$ un vecteur $\mathbf{V}$ défini en tout point de l'espace M de coordonnées x, y, z par ses composantes cartésiennes supposées réelles $V_x(x, y, z), V_y(x, y, z)$ et $V_z(x, y, z)$. Après rotation, ce vecteur sera transformé en $\mathbf{V}'$ et le point M sera transformé en M' de coordonnées x', y', z'. Les composantes du nouveau vecteur en M' s'expriment en fonction des composantes de l'ancien vecteur en M suivant (2A-2) :

$$\begin{pmatrix} V_x^{R_a}\,(x', y', z') \\ \\ V_y^{R_a}\,(x', y', z') \\ \\ V_z^{R_a}\,(x', y', z') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} \\ \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} \\ \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x\,(x, y, z) \\ \\ V_y\,(x, y, z) \\ \\ V_z\,(x, y, z) \end{pmatrix} \tag{2-67}$$

avec :

$$\begin{pmatrix} x \\ \\ y \\ \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} \\ \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} \\ \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ \\ y' \\ \\ z' \end{pmatrix}. \tag{2-4c}$$

Des rotations infinitésimales autour des trois axes permettent, comme dans le cas passif, de trouver comment se modifient les formes analytiques des différentes composantes.

Par exemple dans une rotation infinitésimale autour de l'axe Oz, on obtient :

$$\begin{pmatrix} V_x^{R_a}(x',y',z') \\ V_y^{R_a}(x',y',z') \\ V_z^{R_a}(x',y',z') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I - \dfrac{i}{\hbar}\mathrm{d}\vartheta(L_{z'} + S_{z'}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x(x',y',z') \\ V_y(x',y',z') \\ V_z(x',y',z') \end{pmatrix} \tag{2-68}$$

où $S_{z'}$ est l'opérateur donné par :

$$S_{z'} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{1-155}$$

Rappelons que le champ $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ est susceptible de décrire une particule de spin 1. L'état physique peut être représenté par un ket $|\,\Psi\,\rangle$ que l'on écrit :

$$|\,\Psi\,\rangle = \int \mathrm{d}^3\mathbf{r}\,[\Psi_x(\mathbf{r})\,|\,x\,\rangle + \Psi_y(\mathbf{r})\,|\,y\,\rangle + \Psi_z(\mathbf{r})\,|\,z\,\rangle] \tag{1-162}$$

avec :

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = V_i(\mathbf{r}) \qquad i = x,\, y,\, z \tag{1-163}$$

et où les kets $|\,x\,\rangle, |\,y\,\rangle, |\,z\,\rangle$ caractérisent l'état interne du champ. En représentation $\{\mathbf{r}\}$, nous avons :

$$\langle\,\mathbf{r}\,|\,\Psi\,\rangle = \Psi_x(\mathbf{r})\,|\,x\,\rangle + \Psi_y(\mathbf{r})\,|\,y\,\rangle + \Psi_z(\mathbf{r})\,|\,z\,\rangle. \tag{1-164}$$

5.2. Base standard

Dans la base standard le vecteur $\mathbf{V}$ se décompose suivant :

$$\mathbf{V} = \sum_{\nu=-1}^{1} V_\nu^*(x,y,z)\,\mathbf{e}_\nu \tag{2-69}$$

et le vecteur $\mathbf{V}'$ transformé s'écrit :

$$\mathbf{V}' = \sum_{\nu=-1}^{1} V_\nu^{R_a^*}(x',y',z')\,\mathbf{e}_\nu \tag{2-70}$$

avec (2A-4) :

$$V_\mu^{R_a^*}(x',y',z') = \sum_{\nu=-1}^{1} \mathcal{D}_{\mu\,\nu}^{(1)}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\,V_\nu^*(x,y,z) \quad . \tag{2-71}$$

Comme dans le cas de la base cartésienne, on considère successivement trois rotations infinitésimales autour des axes cartésiens. Dans la rotation autour de l'axe Oz, on obtient :

$$\begin{pmatrix} V_1^{R_a^*}(x',y',z') \\ \\ V_0^{R_a^*}(x',y',z') \\ \\ V_{-1}^{R_a^*}(x',y',z') \end{pmatrix} = \left(I - \frac{i}{\hbar} \mathrm{d}\gamma_1 (L_{z'} + S_{z'}) \right) \begin{pmatrix} V_1^*(x',y',z') \\ \\ V_0^*(x',y',z') \\ \\ V_{-1}^*(x',y',z') \end{pmatrix} \tag{2-72}$$

avec :

$$S_{z'} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1-173}$$

Dans cette base où l'opérateur S_z est diagonal, on peut exprimer l'état d'une particule de spin égal à 1 d'une manière analogue à celui d'une particule de spin 1/2 :

$$| \, \Psi \, \rangle = \sum_{m=-1}^{1} \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \, | \, \mathbf{r} \, m \, \rangle \, \Psi_m(\mathbf{r}) \qquad . \tag{1-182}$$

Dans cette expression, les composantes Ψ_m du champ sont égales aux *complexes conjuguées* des composantes standard :

$$\Psi_m(\mathbf{r}) = V_m^*(\mathbf{r}) \qquad m = -1, 0, 1. \tag{1-183}$$

En représentation $\{\mathbf{r}\}$, on a :

$$\begin{aligned} \langle \, \mathbf{r} \, | \, \Psi \, \rangle &= \textstyle\sum_m \Psi_m(\mathbf{r}) \, | \, 1 \; m \, \rangle \\ &= \Psi_1(\mathbf{r}) \, | \, 1 \;\; 1 \, \rangle + \Psi_0(\mathbf{r}) \, | \, 1 \;\; 0 \, \rangle + \Psi_{-1}(\mathbf{r}) \, | \, 1 \;\; -1 \, \rangle. \end{aligned} \tag{1-185}$$

La loi de transformation des composantes que nous avons étudiée auparavant s'exprime aussi comme pour une particule de spin 1/2 :

$$\langle \, \mathbf{r}' \, | \, \Psi^{R_a} \, \rangle = \sum_{m'=-1}^{1} \Psi_{m'}^{R_a}(\mathbf{r}') \, | \, 1 \; m' \, \rangle \tag{2-73}$$

avec :

$$\Psi_{m'}^{R_a}(x',y',z') = \sum_{m=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{m' \, m}(\mathrm{A}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \, \Psi_m(x,y,z) \qquad . \tag{2-74}$$

Cette relation s'écrit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \Psi_1^{R_a}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_0^{R_a}(\mathbf{r}') \\ \\ \Psi_{-1}^{R_a}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \left(\hat{R}_a^s \right) \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \\ \Psi_0(\mathbf{r}) \\ \\ \Psi_{-1}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \tag{2-75}$$

avec $s = 1$. Sous la forme d'un spineur à 3 composantes, cette égalité devient :

$$\left[\Psi^{R_\mathrm{a}}\right](\mathbf{r}') = \left(\hat{R}_\mathrm{a}^s\right)\left[\Psi\right](\mathbf{r}). \tag{2-76}$$

Comme pour une rotation passive, l'opérateur de rotation quantique pourra s'exprimer en fonction du moment cinétique total :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \qquad . \tag{1-193}$$

par exemple, en fonction des angles d'Euler :

$$\hat{R}_\mathrm{a} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 J_z}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 J_z} \tag{2-77}$$

ou d'une manière équivalente :

$$\hat{R}_\mathrm{a} = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 S_z}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 S_y}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 S_z}\ \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 L_z}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 L_y}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 L_z} \qquad . \tag{2-78}$$

Tout ket transformé s'écrit en fonction des opérateurs ci-dessus :

$$\mid \Psi^{R_\mathrm{a}}\rangle = \hat{R}_\mathrm{a} \mid \Psi\rangle \qquad . \tag{2-79}$$

Le transformé d'un opérateur quelconque agissant dans l'espace produit tensoriel $\mathcal{E} = \mathcal{E}^\mathbf{r} \otimes \mathcal{E}^s$ sera défini par :

$$\hat{O}^{R_\mathrm{a}} = \hat{R}_\mathrm{a}\hat{O}\hat{R}_\mathrm{a}^\dagger. \tag{2-80}$$

Compléments au chapitre 2

A. Transformation d'un vecteur

A.1. Composantes cartésiennes

Il est évident que la loi de transformation d'un vecteur quelconque est la même que celle de $\mathbf{r}$. Les composantes du vecteur $\mathbf{V}$ s'expriment en fonction du vecteur transformé $\mathbf{V}'$ par (2-33) :

$$\begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} \tag{2A-1}$$

et inversement :

$$\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 11} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 12} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 13} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 21} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 22} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 23} \\ \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 31} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 32} & \mathcal{R}^{\mathbf{r}}_{\mathrm{a}\ 33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} . \tag{2A-2}$$

A.2. Composantes standard

Pour trouver la loi de transformation on peut exprimer dans (2A-1) et (2A-2) les composantes cartésiennes en fonction des composantes standard. Cependant, il est plus facile d'utiliser le fait, comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, que les composantes standard V_m d'un vecteur quelconque $\mathbf{V}$ étaient proportionnelles aux harmoniques sphériques Y_1^m :

$$V_m = v\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, Y_1^m(\hat{\mathbf{v}}) \qquad . \tag{1C-9b}$$

En utilisant (2-21a) et (1C-9b), on obtient :

$$V_\mu = \sum_{\nu=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)}_{\nu\,\mu}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\; V'_\nu \tag{2A-3}$$

et réciproquement :

$$V'_\mu \;=\; \sum_{\nu=-1}^{1} \mathcal{D}^{(1)\,*}_{\mu\,\nu}\;\;(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\;V_\nu \qquad . \tag{2A-4}$$

B. Matrices de rotation

B.1. Forme explicite des matrices de rotation

Les matrices de rotation sont définies pour un spin quelconque par :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \;=\; \langle j\,m' \mid \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_1 J_z}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_3 J_z} \;\mid\; j\,m\,\rangle \tag{2B-1}$$

ou encore :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \;=\; \mathrm{e}^{-im'\gamma_1}\;d^{(j)}_{m'\,m}(A;\gamma_2)\;\mathrm{e}^{-im\gamma_3} \tag{2B-2a}$$

avec :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(A;\gamma_2) = \langle\, j\,m' \;\mid \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\gamma_2 J_y} \;\mid\; j\,m\,\rangle. \tag{2B-2b}$$

La correspondance entre les matrices de rotation réduites passive et active est simplement donnée par :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(A;\gamma_2) \;=\; d^{(j)}_{m'\,m}(P;-\gamma_2). \tag{2B-2c}$$

En utilisant la relation de symétrie :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(P;-\gamma_2) \;=\; d^{(j)}_{m\,m'}(P;\gamma_2) \tag{1C-47d}$$

on déduit la forme explicite :

$$d^{(j)}_{m'\,m}(A;\gamma_2) \;=\sum_x\;(-1)^x\;\frac{\sqrt{(j+m')!(j-m')!(j+m)!(j-m)!}}{(j+m'-x)!(j-m-x)!\,x!\,(x-m'+m)!} \times \cos^{2j+m'-m-2x}(\gamma_2/2)\;\;\sin^{2x-m'+m}(\gamma_2/2). \tag{2B-3}$$

Les éléments de matrice de la rotation active sont reliés à ceux de la rotation passive par :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \;=\; \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;-\gamma_1,-\gamma_2,-\gamma_3). \tag{2B-4}$$

B.2. Propriétés des matrices de rotation

Nous donnons ici uniquement les différents résultats, les démonstrations étant semblables à celles du cas passif.

L'opérateur de rotation étant unitaire, on a :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}{}^{*} \;=\; \left[\mathcal{D}^{(j)\;-1}\right]_{m\,m'}. \tag{2B-5}$$

La même propriété d'unitarité entraîne les deux relations suivantes entre les éléments de matrice :

$$\sum_{m''} \mathcal{D}^{(j)\,*}_{m''\,m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\,\mathcal{D}^{(j)}_{m''\,m'}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \;=\; \delta_{m\,m'} \tag{2B-6}$$

et :

$$\sum_{m''} \mathcal{D}^{(j)}_{m\,m''}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\,\mathcal{D}^{(j)\,*}_{m'\,m''}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \;=\; \delta_{m\,m'} \tag{2B-7}$$

en prenant le complexe conjugué de cette égalité, on peut écrire :

$$\sum_{m''} \mathcal{D}^{(j)\,*}_{m\,m''}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m''}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \;=\; \delta_{m\,m'}. \tag{2B-8}$$

Ces matrices possèdent de plus des relations de symétrie :

$$\mathcal{D}^{(j)*}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \;=\; (-1)^{m'-m}\,\mathcal{D}^{(j)}_{-m'\,-m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \tag{2B-9}$$

et sont normalisées suivant :

$$\int_0^{\pi} \sin\gamma_2\,\mathrm{d}\gamma_2 \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\gamma_1 \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\gamma_3\; \mathcal{D}^{(j)*}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)\,\mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1'\,m_1}(\mathrm{A}\,;\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) = \frac{8\pi^2}{2j+1}\delta_{j\,j_1}\,\delta_{m\,m_1}\,\delta_{m_1'\,m'}. \tag{2B-10}$$

Propriétés de $d^{(j)}_{m'\,m}(A;\gamma_2)$. Les relations de symétrie peuvent être déduites aisément à partir des égalités (2B-3) et (1C-47a–1C-47f). Nous donnerons uniquement le résultat final :

$$d^{(j)}_{-m'\,-m}(A;\gamma_2) = d^{(j)}_{m\,m'}(A;\gamma_2) \tag{2B-11a}$$

$$d^{(j)}_{m'\,m}(A;\gamma_2) = (-1)^{m-m'}\,d^{(j)}_{m\,m'}(A;\gamma_2) \;=\; (-1)^{m'-m}\,d^{(j)}_{m\,m'}(A;\gamma_2) \tag{2B-11b}$$

$$d^{(j)}_{-m'\,-m}(A;\gamma_2) = (-1)^{m-m'}\,d^{(j)}_{m'\,m}(A;\gamma_2) \;=\; (-1)^{m'-m}\,d^{(j)}_{m'\,m}(A;\gamma_2) \tag{2B-11c}$$

$$d^{(j)}_{m'\,m}(A;-\gamma_2) = d^{(j)}_{m\,m'}(A;\gamma_2) \tag{2B-11d}$$

$$d^{(j)}_{m'\,m}(A;\pi-\gamma_2) = (-1)^{j+m'}d^{(j)}_{m'\,-m}(A;\gamma_2) \tag{2B-11e}$$

$$d^{(j)}_{m'\,m}(A;\pi+\gamma_2) = (-1)^{j-m}d^{(j)}_{m'\,-m}(A;\gamma_2). \tag{2B-11f}$$

B.3. Valeurs particulières

(α) $j = 1/2$

Lorsque le moment angulaire a la valeur $j \;=\; 1/2$, la forme explicite est donnée par :

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(A\,;\gamma_1\,,\gamma_2\,,\gamma_3\,) \;=\; \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\gamma_1/2}\,\cos(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{-i\gamma_3/2} & -\mathrm{e}^{-i\gamma_1/2}\,\sin(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{i\gamma_3/2} \\ \mathrm{e}^{i\gamma_1/2}\,\sin(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{-i\gamma_3/2} & \mathrm{e}^{i\gamma_1/2}\,\cos(\gamma_2/2)\,\mathrm{e}^{i\gamma_3/2} \end{pmatrix} \tag{2B-12}$$

et :

$$
\begin{aligned}
d^{(1/2)}_{1/2\,1/2}(A;\gamma_2) = d^{(1/2)}_{-1/2\,-1/2}(A;\gamma_2) \;&=\; \cos(\gamma_2/2)\\
d^{(1/2)}_{1/2\,-1/2}(A;\gamma_2) = -d^{(1/2)}_{-1/2\,1/2}(A;\gamma_2) \;&=\; -\sin(\gamma_2/2).
\end{aligned}
\tag{2B-13}
$$

(β) $j = 1$

Dans le cas où le moment angulaire j est égal à 1, on a :

$$
\mathcal{D}^{(1)}(A\,;\gamma_1\,,\gamma_2\,,\gamma_3\,) =
\begin{pmatrix}
\mathrm{e}^{-i\gamma_1}\,\dfrac{1+\cos\gamma_2}{2}\,\mathrm{e}^{-i\gamma_3} & -\mathrm{e}^{-i\gamma_1}\,\dfrac{\sin\gamma_2}{\sqrt{2}} & \mathrm{e}^{-i\gamma_1}\,\dfrac{1-\cos\gamma_2}{2}\,\mathrm{e}^{i\gamma_3}\\[2ex]
\dfrac{\sin\gamma_2}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{-i\gamma_3} & \cos\gamma_2 & -\dfrac{\sin\gamma_2}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{i\gamma_3}\\[2ex]
\mathrm{e}^{i\gamma_1}\,\dfrac{1-\cos\gamma_2}{2}\,\mathrm{e}^{-i\gamma_3} & \mathrm{e}^{i\gamma_1}\,\dfrac{\sin\gamma_2}{\sqrt{2}} & \mathrm{e}^{i\gamma_1}\,\dfrac{1+\cos\gamma_2}{2}\,\mathrm{e}^{i\gamma_3}
\end{pmatrix}
\tag{2B-14}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{(1)}_{1\,1}(A;\gamma_2) = d^{(1)}_{-1\,-1}(A;\gamma_2) \;&=\; \frac{1}{2}(1+\cos\gamma_2)\\
d^{(1)}_{0\,1}(A;\gamma_2) = d^{(1)}_{-1\,0}(A;\gamma_2) \;&=\; -d^{(1)}_{1\,0}(A;\gamma_2) \;=\; -d^{(1)}_{0\,-1}(A;\gamma_2) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\gamma_2\\
d^{(1)}_{-1\,1}(A;\gamma_2) = d^{(1)}_{1\,-1}(A;\gamma_2) \;&=\; \frac{1}{2}(1-\cos\gamma_2)\\
d^{(1)}_{0\,0}(A;\gamma_2) &= \cos\gamma_2.
\end{aligned}
\tag{2B-15}
$$

(γ) $j = 3/2$

$$
\begin{aligned}
d^{(3/2)}_{3/2\,3/2}(A;\gamma_2) &= d^{(3/2)}_{-3/2\,-3/2}(A;\gamma_2) \;=\; \cos^3(\gamma_2/2)\\
d^{(3/2)}_{1/2\,3/2}(A;\gamma_2) &= d^{(3/2)}_{-3/2\,-1/2}(A;\gamma_2) \;=\; -d^{(3/2)}_{3/2\,1/2}(A;\gamma_2)\\
&= -d^{(3/2)}_{-1/2\,-3/2}(A;\gamma_2) = \sqrt{3}\cos^2(\gamma_2/2)\,\sin(\gamma_2/2)\\
d^{(3/2)}_{-1/2\,3/2}(A;\gamma_2) &= d^{(3/2)}_{-3/2\,1/2}(A;\gamma_2) \;=\; d^{(3/2)}_{3/2\,-1/2}(A;\gamma_2) \;=\; d^{(3/2)}_{1/2\,-3/2}(A;\gamma_2)\\
&= \sqrt{3}\,\cos(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2)\\
d^{(3/2)}_{-3/2\,3/2}(A;\gamma_2) &= -d^{(3/2)}_{3/2\,-3/2}(A;\gamma_2) \;=\; \sin^3(\gamma_2/2)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
d^{(3/2)}_{1/2\,1/2}(A;\gamma_2) &= d^{(3/2)}_{-1/2\,-1/2}(A;\gamma_2)\\
&= \cos^3(\gamma_2/2) \,-\, 2\cos(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2)\\
&= \cos(\gamma_2/2)\,(\,3\cos^2(\gamma_2/2) - 2\,)\\
d^{(3/2)}_{-1/2\,1/2}(A;\gamma_2) &= -d^{(3/2)}_{1/2\,-1/2}(A;\gamma_2)\\
&= 2\cos^2(\gamma_2/2)\,\sin(\gamma_2/2) \,-\, \sin^3(\gamma_2/2)\\
&= \sin(\gamma_2/2)\,(\,2 - 3\sin^2(\gamma_2/2)). \qquad \text{(2B-16)}
\end{aligned}
$$

(δ) $j = 2$

$$
\begin{aligned}
d^{(2)}_{2\,2}(A;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-2\,-2}(A;\gamma_2) \,=\, \cos^4(\gamma_2/2)\\
d^{(2)}_{1\,2}(A;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-2\,-1}(A;\gamma_2) \,=\, -d^{(2)}_{2\,1}(A;\gamma_2) \,=\, -d^{(2)}_{-1\,-2}(A;\gamma_2)\\
&= \,2\cos^3(\gamma_2/2)\,\sin(\gamma_2/2) \,=\, \frac{1}{2}(1+\cos\gamma_2)\,\sin\gamma_2\\
d^{(2)}_{0\,2}(A;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-2\,0}(A;\gamma_2) \,=\, d^{(2)}_{2\,0}(A;\gamma_2) \,=\, d^{(2)}_{0\,-2}(A;\gamma_2)\\
&= \,\sqrt{6}\cos^2(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2) \,=\, \sqrt{\frac{3}{8}}\,\sin^2\gamma_2\\
d^{(2)}_{-1\,2}(A;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-2\,1}(A;\gamma_2) \,=\, -d^{(2)}_{2\,-1}(A;\gamma_2) \,=\, -d^{(2)}_{1\,-2}(A;\gamma_2)\\
&= 2\,\cos(\gamma_2/2)\sin^3(\gamma_2/2) \,=\, \frac{1}{2}(1-\cos\gamma_2)\,\sin\gamma_2\\
d^{(2)}_{-2\,2}(A;\gamma_2) &= d^{(2)}_{2\,-2}(A;\gamma_2) \,=\, \sin^4(\gamma_2/2)\\
d^{(2)}_{1\,1}(A;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-1\,-1}(A;\gamma_2)\\
&= \cos^4(\gamma_2/2) \,-\, 3\cos^2(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2)\\
&= \frac{1}{2}(1+\cos\gamma_2)\,(2\cos\gamma_2 - 1)\\
d^{(2)}_{0\,1}(A;\gamma_2) &= d^{(2)}_{-1\,0}(A;\gamma_2) \,=\, -d^{(2)}_{1\,0}(A;\gamma_2) \,=\, -d^{(2)}_{0\,-1}(A;\gamma_2)\\
&= \sqrt{6}\,(\cos^3(\gamma_2/2)\,\sin(\gamma_2/2) \,-\cos(\gamma_2/2)\sin^3(\gamma_2/2))\\
&= \sqrt{\frac{3}{2}}\,\sin\gamma_2\,\cos\gamma_2\\
d^{(2)}_{-1\,1}(A;\gamma_2) &= d^{(2)}_{1\,-1}(A;\gamma_2) \,=\, 3\cos^2(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2) \,-\, \sin^4(\gamma_2/2)\\
&= \frac{1}{2}(1-\cos\gamma_2)\,(2\cos\gamma_2 + 1)\\
d^{(2)}_{0\,0}(A;\gamma_2) &= \cos^4(\gamma_2/2) \,+\, \sin^4(\gamma_2/2) \,-\, 4\cos^2(\gamma_2/2)\sin^2(\gamma_2/2)\\
&= \frac{1}{2}\,(3\cos^2\gamma_2 - 1). \qquad \text{(2B-17)}
\end{aligned}
$$

B.4. Rotation de π autour de chacun des axes

(α) *Rotation autour de l'axe Oz*

$$\hat{R}_a(\pi/0z) \;=\; \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\pi\, J_z} \tag{2B-18}$$

soit :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;0,0,\pi) \;=\; \mathrm{e}^{-i\pi\, m}\;\delta_{m'\,m} \tag{2B-19}$$

et :

$$\hat{R}_a(\pi/0z)\;\mid j\,m\,\rangle \;=\; \mathrm{e}^{-i\pi\, m}\;\mid j\,m\,\rangle. \tag{2B-20}$$

(β) *Rotation autour de l'axe Oy*

$$\hat{R}_a(\pi/0y) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\pi\, J_y} \tag{2B-21}$$

soit :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{A}\,;0,\pi,0) = d^{(j)}_{m'\,m}(A;\pi). \tag{2B-22}$$

En utilisant (2B-2c), (1C-47d), (1C-74) et (1C-75), on trouve

$$d^{(j)}_{m'\,m}(A;\pi) \;=\; (-1)^{j-m}\;\delta_{m'\,-m} \;=\; \mathrm{e}^{i\,\pi\,(j-m)}\;\delta_{m'\,-m} \tag{2B-23}$$

et :

$$\hat{R}_a(\pi/0y)\;\mid j\,m\,\rangle \;=\; (-1)^{j-m}\;\mid j\;-m\,\rangle \;=\; \mathrm{e}^{i\,\pi\,(j-m)}\;\mid j\;-m\,\rangle. \tag{2B-24}$$

(γ) *Rotation autour de l'axe Ox*

$$\big[\,\hat{R}_a(\pi/0x)\,\big]_{m'\,m} = \mathrm{e}^{-i\pi\, j}\;\delta_{m'\,-m} \tag{2B-25}$$

et :

$$\hat{R}_a(\pi/0x)\;\mid j\,m\,\rangle = \mathrm{e}^{-i\pi\, j}\;\mid j\;-m\,\rangle. \tag{2B-26}$$

Addition des moments cinétiques

Dans ce chapitre, nous allons développer comment se transforment par rotation les produits des vecteurs propres des opérateurs moment cinétique associés à plusieurs sous espaces. Nous ferons le choix de prendre des rotations passives. Les formules obtenues seront écrites dans la notation de Dirac, celle-ci étant mieux appropriée aux différentes démonstrations en particulier par les relations de fermeture.

1. Rappel

Dans le premier paragraphe, nous allons rappeler différentes relations générales concernant les composantes du moment cinétique.

Soit donc $\mathbf{J}$ l'opérateur moment cinétique de composantes J_x, J_y et J_z. Elles vérifient les relations de commutation

$$[\,J_x, J_y\,] \,=\, i\,\hbar\,J_z\;;\quad [\,J_y, J_z\,] \,=\, i\,\hbar\,J_x\;;\quad [\,J_z, J_x\,] \,=\, i\,\hbar\,J_y. \tag{3-1a}$$

L'ensemble de ces trois relations s'écrit sous forme condensée :

$$\mathbf{J} \wedge \mathbf{J} \,=\, i\,\hbar\,\mathbf{J} \qquad . \tag{3-1b}$$

Le carré du moment cinétique défini par

$$\mathbf{J}^2 \,=\, J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{3-2}$$

commute avec chacune des composantes

$$[\,\mathbf{J}^2, J_x\,] \,=\, [\,\mathbf{J}^2, J_y\,] \,=\, [\,\mathbf{J}^2, J_z\,] \,=\, 0. \tag{3-3}$$

À partir des composantes cartésiennes, on peut construire les opérateurs J_+ et J_- :

$$J_+ \,=\, J_x + iJ_y\;; \qquad J_- \,=\, J_x - iJ_y. \tag{3-4}$$

Ils vérifient les relations de commutation

$$\begin{aligned} [\,\mathbf{J}^2, J_+\,] \,=\, [\,\mathbf{J}^2, J_-\,] = 0\;; &\qquad [\,J_z, J_+\,] = \hbar\,J_+ \\ [\,J_z, J_-\,] = -\hbar\,J_-\;; &\quad [\,J_+, J_-\,] = 2\hbar\,J_+. \end{aligned} \tag{3-5}$$

L'opérateur $\mathbf{J}^2$ s'exprime en fonction de J_+ et J_- :

$$\mathbf{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \tag{3-6}$$

ce qui entraîne les relations supplémentaires :

$$J_-J_+ = \mathbf{J}^2 - J_z(J_z+1)\,; \quad J_+J_- = \mathbf{J}^2 - J_z(J_z-1). \tag{3-7}$$

Soit $|\ \alpha\, j\, m\rangle$ un état propre commun aux opérateurs $\mathbf{J}^2$ et J_z avec les valeurs propres respectives $\hbar^2 j(j+1)$ et $\hbar\, m\ (-j \leq m \leq j)$ où α est un nombre quantique supplémentaire permettant de caractériser l'état physique :

$$\mathbf{J}^2 \mid \alpha\ j\ m\rangle = \hbar^2 j(j+1) \mid \alpha\ j\ m\rangle \tag{3-8a}$$
$$J_z \mid \alpha\ j\ m\rangle = m\hbar \mid \alpha\ j\ m\rangle. \tag{3-8b}$$

Ces vecteurs de base sont choisis de manière à ce que les opérateurs J_+ et J_- vérifient

$$J_- \mid \alpha\ j\ m\rangle = \hbar\ \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \mid \alpha\ j\ m\rangle \tag{3-9a}$$

$$J_+ \mid \alpha\ j\ m\rangle = \hbar\ \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \mid \alpha\ j\ m\rangle. \tag{3-9b}$$

2. Addition de deux moments cinétiques

2.1. Définition

On considère un système physique formé de la réunion de deux sous systèmes (a) et (b). Ces deux sous systèmes peuvent être par exemple les parties orbitales de deux particules sans spin ou bien l'espace orbital et la partie intrinsèque d'une particule avec spin etc. Dans chacun des deux sous espaces $\mathcal{E}^i$ on suppose connue une base standard des vecteurs propres communs à $\mathbf{J}_i^2$ et J_{iz} notée $|\ \alpha_i\, j_i\, m_i\rangle$ où α_i représente un ensemble de nombres quantiques permettant de caractériser l'état. D'après le paragraphe précédent, ces états propres vérifient les relations suivantes :

$$\begin{array}{ll} \mathbf{J}_i^2 & \mid \alpha_i\ j_i\, m_i\rangle = \hbar^2\, j_i(j_i+1) \mid \alpha_i\ j_i\, m_i\rangle \\ J_{iz} & \mid \alpha_i\ j_i\, m_i\rangle = \hbar\, m_i \mid \alpha_i\ j_i\, m_i\rangle \\ J_{i\pm} & \mid \alpha_i\ j_i\, m_i\rangle = \hbar\sqrt{j_i(j_i+1) - m_i(m_i \pm 1)} \mid \alpha_i\ j_i\ m_i \pm 1\rangle \end{array} \tag{3-10}$$

et de plus les opérateurs moment cinétique de chacun des deux sous espaces commutent :

$$[\,\mathbf{J}_a, \mathbf{J}_b\,] = 0. \tag{3-11}$$

Chaque sous espace $\mathcal{E}^i$ est la somme directe des sous espaces $\mathcal{E}^i(\alpha_i\ j_i\, m_i)$ associé aux vecteurs propres $|\ \alpha_i\ j_i\, m_i\rangle$:

$$\mathcal{E}^i = \sum_{\oplus} \mathcal{E}^i(\alpha_i\ j_i\ m_i) \quad . \tag{3-12}$$

La relation de fermeture dans l'espace $\mathcal{E}^i$ est donnée par :

$$\sum_{\alpha_i\, j_i\, m_i} \mid \alpha_i\, j_i\, m_i \rangle \langle \alpha_i\, j_i\, m_i \mid = 1. \tag{3-13}$$

Chacun des sous-espaces $\mathcal{E}^i(\alpha_i\; j_i)$ obtenu en fixant α_i et j_i est de dimension $2j_i+1$ et possède la relation de fermeture :

$$\sum_{m_i} \mid j_i\, m_i \rangle \langle j_i\, m_i \mid = 1. \tag{3-14}$$

Dans l'espace $\mathcal{E}^a(\alpha_a\,; j_a) \otimes \mathcal{E}^b(\alpha_b\,; j_b)$ de dimension $(2j_a+1)(2j_b+1)$, on peut former la base standard en faisant le produit tensoriel des vecteurs de base de chacun des sous espaces $\mid \alpha_a\, j_a\, m_a \;\; \alpha_b\, j_b\, m_b \rangle = \mid \alpha_a\, j_a\, m_a \rangle \;\; \mid \alpha_b\, j_b\, m_b \rangle$. La relation de fermeture associée à cette base est une généralisation de (3-14) :

$$\sum_{m_a\, m_b} \mid j_a\, m_a\, j_b\, m_b \rangle \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid = 1. \tag{3-15}$$

L'opérateur moment cinétique total $\mathbf{J} = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_b$ agissant dans l'espace $\mathcal{E}$ possède, de même que $\mathbf{J}_a$ et $\mathbf{J}_b$, les relations de commutation données par les formules (3-1) à (3-9). On peut construire une base standard constituée des états propres de $\mathbf{J}_a^2$, $\mathbf{J}_b^2$, $\mathbf{J}^2$ et J_z à l'aide d'une combinaison linéaire appropriée des vecteurs de base $\mid \alpha_a\, j_a\, m_a \;\; \alpha_b\, j_b\, m_b \rangle$. Les coefficients de cette transformation unitaire sont appelés coefficients de Clebsch-Gordan. Ce développement s'écrit :

$$\begin{aligned} \mid \alpha_a\, \alpha_b\;\; (j_a\, j_b)\, j\, m \rangle &= [\mid \alpha_a\; j_a \rangle \;\mid \alpha_b\; j_b \rangle]^j_m \\ &= \textstyle\sum_{m_a\, m_b} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle \;\mid \alpha_a\; j_a\, m_a \;\; \alpha_b\; j_b\, m_b \rangle. \end{aligned} \tag{3-16a}$$

Par définition les états $\mid \alpha_a\; \alpha_b\;\; (j_a\, j_b)\, j\, m \rangle$ vérifient :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_a^2 \mid \alpha_a\; \alpha_b\;\; (j_a\, j_b)\, j\, m \rangle &= \hbar^2\, j_a(j_a+1) \;\mid \alpha_a\; \alpha_b\;\; (j_a\, j_b)\, j\, m \rangle \\ \mathbf{J}_b^2 \mid \alpha_a\; \alpha_b\;\; (j_a\, j_b)\, j\, m \rangle &= \hbar^2\, j_b(j_b+1) \;\mid \alpha_a\; \alpha_b\;\; (j_a\, j_b)\, j\, m \rangle. \end{aligned} \tag{3-17}$$

Les valeurs numériques des C.G peuvent être obtenues à partir des opérateurs $J_{a\pm}$, $J_{b\pm}$, $J_\pm$ et peuvent être définis réels. La forme explicite et les principales propriétés sont données dans le complément A. La relation de symétrie

$$\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = (-1)^{j_a+j_b-j} \;\langle j_b\, m_b\, j_a\, m_a \mid j\, m\rangle \tag{3A-23}$$

entraîne :

$$\mid \alpha_a\; \alpha_b\;\; (j_a\, j_b)\, j\, m \rangle = (-1)^{j_a+j_b-j} \;\mid \alpha_b\; \alpha_a\;\; (j_b\, j_a)\, j\, m \rangle. \tag{3-16b}$$

La nouvelle base associée à l'espace $\mathcal{E}^a(\alpha_a\,; j_a) \otimes \mathcal{E}^b(\alpha_b\,; j_b)$ possède la relation de fermeture suivante :

$$\sum_{j\, m} \mid j_a\, j_b\; j\, m \rangle \langle j_a\, j_b\; j\, m \mid = 1 \tag{3-18a}$$

que l'on peut écrire aussi :

$$\sum_{j\,m} \mid j\,m\,\rangle\,\langle\, j\,m\,\mid = 1. \tag{3-18b}$$

Nous allons maintenant montrer deux propriétés des coefficients de Clesch-Gordan permettant d'inverser la relation (3-16a). En utilisant (3-18b) et le fait que les C.G sont réels, on a :

$$\begin{aligned}
\delta_{m'_a\,m_a}\,\delta_{m'_b\,m_b} &= \langle\,\alpha_a\; j_a\, m'_a\;\; \alpha_b\; j_b\, m'_b\;\mid\;\alpha_a\; j_a\, m_a\;\; \alpha_b\; j_b\, m_b\,\rangle\\
&= \sum_{j\,m} \langle j_a\, m'_a\, j_b\, m'_b\;\mid\; j\,m\rangle\;\langle j\,m\;\mid\; j_a\, m_a\, j_b\, m_b\,\rangle\\
&= \sum_{j\,m} \langle j_a\, m'_a\, j_b\, m'_b\;\mid\; j\,m\rangle\;\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\;\mid\; j\,m\rangle
\end{aligned} \tag{3-19}$$

et en utilisant (3-15) :

$$\begin{aligned}
\delta_{j'\,j}\,\delta_{m'\,m} &= \langle\, j\,m\mid\, j'\,m'\,\rangle \;=\; \langle\,\alpha_a\;\alpha_b\;\;(j_a\,j_b)\,j\,m\;\mid\;\alpha_a\;\alpha_b\;\;(j_a\,j_b)\,j'\,m'\,\rangle\\
&= \sum_{m_a\,m_b} \;\langle\, j\,m\mid\; j_a\,m_a\,j_b\,m_b\,\rangle\;\langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\;\mid\; j'\,m'\rangle\\
&= \sum_{m_a\,m_b} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\;\mid\; j\,m\rangle\;\langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\;\mid\; j'\,m'\rangle.
\end{aligned} \tag{3-20}$$

En multipliant (3-16a) par $\langle j_a\, m'_a\, j_b\, m'_b\;\mid\; j'\,m'\rangle$ et en sommant sur j' et m', on obtient, à l'aide de (3-19) :

$$\mid\;\alpha_a\; j_a\, m_a\;\;\alpha_b\; j_b\, m_b\,\rangle \;=\; \sum_{j\,m} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\;\mid\; j\,m\rangle\;\mid\;\alpha_a\;\alpha_b\;\;(j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle. \tag{3-21}$$

2.2. Propriétés des matrices de rotation

Dans une rotation quelconque supposée définie par les angles d'Euler, si on pose :

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i) \;\equiv\; \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\gamma_2,\gamma_1) \tag{3-22}$$

on aura :

$$\begin{aligned}
\hat{R}^a_{\mathrm{p}}\;\mid\;\alpha_a\; j_a\, m_a\,\rangle &= \sum_{m'_a} \mathcal{D}^{(j_a)}_{m'_a\,m_a}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;\mid\;\alpha_a\; j_a\, m'_a\,\rangle\\
\hat{R}^b_{\mathrm{p}}\;\mid\;\alpha_b\; j_b\, m_b\,\rangle &= \sum_{m'_b} \mathcal{D}^{(j_b)}_{m'_b\,m_b}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;\mid\;\alpha_b\; j_b\, m'_b\,\rangle.
\end{aligned} \tag{3-23}$$

L'opérateur de rotation dans le système total est le produit des opérateurs de rotation :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}} \;=\; \hat{R}^a_{\mathrm{p}}\,\hat{R}^b_{\mathrm{p}} \tag{3-24}$$

d'où :

$$\hat{R}^a_{\rm p}\,\hat{R}^b_{\rm p}\ \mid \alpha_a\ j_a\,m_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m_b\,\rangle = \sum_{m'_a m'_b} \mathcal{D}^{(j_a)}_{m'_a\,m_a}({\rm P}\,;\gamma_i)\,\mathcal{D}^{(j_b)}_{m'_b\,m_b}({\rm P}\,;\gamma_i)\ \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \qquad . \quad (3\text{-}25)$$

Par définition l'état propre du moment angulaire total obéit à :

$$\hat{R}_{\rm p}\ \mid \alpha_a\ \alpha_b\ \ (j_a\,j_b)\,j\,m\ \rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}({\rm P}\,;\gamma_i)\ \mid \alpha_a\ \alpha_b\ \ (j_a\,j_b)\,j\,m'\,\rangle \qquad . \quad (3\text{-}26)$$

Cette égalité peut encore s'écrire d'après (3-16a) :

$$\begin{aligned}\hat{R}_{\rm p}\ \mid \alpha_a\ \alpha_b\ \ (j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle &= \sum_{m'} \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}({\rm P}\,;\gamma_i) \sum_{m'_a\,m'_b} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b\ \mid\ j\,m'\rangle\ \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \\ &= \sum_{m'_a\,m'_b}\left[\sum_{m'} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b\ \mid\ j\,m'\rangle \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}({\rm P}\,;\gamma_i)\right] \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \qquad . \quad (3\text{-}27a)\end{aligned}$$

Si on écrit l'opérateur de rotation comme le produit des deux opérateurs, le membre de gauche devient :

$$\begin{aligned}\hat{R}_{\rm p}\ \mid \alpha_a\ \alpha_b\ \ (j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle &= \sum_{m_a\,m_b} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ \mid\ j\,m\rangle\ \hat{R}^a_{\rm p}\,\hat{R}^b_{\rm p}\ \mid \alpha_a\ j_a\,m_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m_b\,\rangle \\ &= \sum_{m_a\ m_b} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ \mid\ j\,m\rangle \sum_{m'_a\ m'_b} \mathcal{D}^{(j_a)}_{m'_a\,m_a}({\rm P}\,;\gamma_i)\ \mathcal{D}^{(j_b)}_{m'_b\,m_b}({\rm P}\,;\gamma_i) \\ &\qquad \times \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \\ &= \sum_{m'_a\ m'_b}\left[\sum_{m_a\,m_b} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ \mid\ j\,m\rangle\,\mathcal{D}^{(j_a)}_{m'_a\,m_a}({\rm P}\,;\gamma_i)\,\mathcal{D}^{(j_b)}_{m'_b\,m_b}({\rm P}\,;\gamma_i)\right] \\ &\qquad \times \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \qquad . \quad (3\text{-}27b)\end{aligned}$$

En comparant (3-27a) et (3-27b), on déduit :

$$\begin{aligned}\sum_{m_a\,m_b} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ \mid\ j\,m\rangle\,\mathcal{D}^{(j_a)}_{m'_a\,m_a}({\rm P}\,;\gamma_i)\,\mathcal{D}^{(j_b)}_{m'_b\,m_b}({\rm P}\,;\gamma_i) &= \\ \sum_{m'} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b\ \mid\ j\,m'\rangle\ \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}({\rm P}\,;\gamma_i)& \\ = \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b\ \mid\ j\,m'\rangle\ \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}({\rm P}\,;\gamma_i)\ \delta_{m'\ m'_a+m'_b}& \qquad (3\text{-}28)\end{aligned}$$

la dernière ligne étant obtenue en utilisant (3A-1b).

Cette relation est indépendante de la rotation et elle reste valable pour la transformation inverse. On peut donc remplacer dans (3-28) $\mathcal{D}^{(k)}_{q'\,q}({\rm P}\,;\gamma_i)$ par

$\left[\mathcal{D}^{(k)}\left(\mathrm{P}\,;\gamma_i\right)\right]^{-1}_{q'\,q}$ avec $k = j_a$, j_b ou j et q et q' les projections correspondantes sur l'axe Oz. En prenant le complexe conjugué de la nouvelle égalité obtenue et en utilisant (1C-52b) on obtient une relation faisant intervenir la sommation sur les indices de ligne :

$$\sum_{m_a\,m_b} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b \mid j\,m\rangle\, \mathcal{D}^{(j_a)}_{m_a\,m'_a}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\, \mathcal{D}^{(j_b)}_{m_b\,m'_b}(\mathrm{P}\,;\gamma_i) = \sum_{m'} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m'\rangle\, \mathcal{D}^{(j)}_{m\,m'}(\mathrm{P}\,;\gamma_i) = \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m'\rangle\, \mathcal{D}^{(j)}_{m\,m'}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\,\delta_{m'\;m'_a+m'_b}. \quad (3\text{-}29)$$

Multiplions les deux membres de (3-28) par le coefficient $\langle j_a\,m''_a\,j_b\,m''_b \mid j\,m\rangle$:

$$\sum_{m_a\,m_b} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b \mid j\,m\rangle\, \langle j_a\,m''_a\,j_b\,m''_b \mid j\,m\rangle \mathcal{D}^{(j_a)}_{m_a\,m'_a}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\, \mathcal{D}^{(j_b)}_{m_b\,m'_b}(\mathrm{P}\,;\gamma_i) = \sum_{m'} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m'\rangle\, \langle j_a\,m''_a\,j_b\,m''_b \mid j\,m\rangle \mathcal{D}^{(j)}_{m\,m'}(\mathrm{P}\,;\gamma_i).$$

Sommons sur j et m les deux membres de cette égalité. En utilisant la relation (3-19), on a :

$$\mathcal{D}^{(j_a)}_{m'_a\,m_a}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\, \mathcal{D}^{(j_b)}_{m'_b\,m_b}(\mathrm{P}\,;\gamma_i) = \sum_{j\,m\,m'} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m'\rangle\, \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b \mid j\,m\rangle\, \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i) = \sum_{j} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m'\rangle\, \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b \mid j\,m\rangle\, \mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i) \times \delta_{m'\;m'_a+m'_b}\;\; \delta_{m\;m_a+m_b}. \quad (3\text{-}30)$$

Applications

(α) Composition des harmoniques sphériques

Nous allons utiliser cette relation pour composer deux harmoniques sphériques de mêmes arguments. D'après (1-35) :

$$Y_l^m(\vartheta\,,\varphi) \;=\; \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\;\mathcal{D}^{(l)}_{0\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\vartheta,\varphi)$$

d'où :

$$Y_l^m(\vartheta\,,\varphi)\, Y_{l'}^{m'}(\vartheta\,,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}}\;\mathcal{D}^{(l)}_{0\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\vartheta,\varphi)\;\mathcal{D}^{(l')}_{0\,m'}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\vartheta,\varphi)$$
$$= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}} \sum_{l''\,m''} \langle l\,0\,l'\,0 \mid l''\,0\rangle \langle l\,m\,l'\,m' \mid l''\,m''\rangle \mathcal{D}^{(l'')}_{0\,m''}(\mathrm{P}\,;\gamma_3,\vartheta,\varphi)$$
$$= \sum_{l''\,m''} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{4\pi(2l''+1)}} \langle l\,0\,l'\,0 \mid l''\,0\rangle \langle l\,m\,l'\,m' \mid l''\,m''\rangle Y_{l''}^{m''}(\vartheta\,,\varphi)$$

c'est-à-dire finalement :

$$Y_l^m(\vartheta\,,\varphi)\,Y_{l'}^{m'}(\vartheta\,,\varphi) = \sum_{l''\,m''}\sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{4\pi(2l''+1)}}\langle l\,0\;l'\,0\mid l''\,0\rangle\langle l\,m\;l'\,m'\mid l''\,m''\rangle Y_{l''}^{m''}(\vartheta\,,\varphi). \tag{3-31}$$

(β) Théorème d'addition des harmoniques sphériques.

Soient $(\vartheta_1,\,\varphi_1)$ et $(\vartheta_2,\,\varphi_2)$ les angles définissant les directions des vecteurs $\mathbf{v}_1$ et $\mathbf{v}_2$ dans le repère $(\mathcal{S})$. Le produit scalaire des deux vecteurs reste inchangé lorsqu'on passe du repère $(\mathcal{S})$ au repère $(\mathcal{S}')$ obtenu à partir de $(\mathcal{S})$ par une rotation quelconque. L'angle entre ces deux vecteurs ϑ_{12} défini par $\cos\vartheta_{12} = \mathbf{v}_1\cdot\mathbf{v}_2/v_1\,v_2$ est lui-même invariant dans cette rotation. Nous allons maintenant établir comment se transforme l'expression $\mathcal{I}$ définie par :

$$\mathcal{I} = \sum_m Y_l^{m^*}(\vartheta_1,\varphi_1)\,Y_l^m(\vartheta_2,\varphi_2). \tag{3-32}$$

D'après (1-32a), on a

$$Y_l^{m^*}(\vartheta_1,\varphi_1) = \sum_{m'}\mathcal{D}^{(l)\,*}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\,Y_l^{m'^*}(\vartheta_1{}',\varphi_1{}')$$

et

$$Y_l^m(\vartheta_2,\varphi_2) = \sum_{m''}\mathcal{D}^{(l)}_{m''\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\,Y_l^{m''}(\vartheta_2{}',\varphi_2{}')$$

soit

$$\begin{aligned}\mathcal{I} &= \textstyle\sum_{m'\,m''} Y_l^{m'^*}(\vartheta_1{}',\varphi_1{}')\,Y_l^{m''}(\vartheta_2{}',\varphi_2{}')\;\; \sum_m \mathcal{D}^{(l)\,*}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\,\mathcal{D}^{(l)}_{m''\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\\ &= \textstyle\sum_{m'} Y_l^{m'^*}(\vartheta_1{}',\varphi_1{}')\,Y_l^{m'}(\vartheta_2{}',\varphi_2{}')\end{aligned}$$

où nous avons utilisé (1C-55). On a donc l'invariance :

$$\sum_m Y_l^{m^*}(\vartheta_1,\varphi_1)\,Y_l^m(\vartheta_2,\varphi_2) = \sum_m Y_l^{m^*}(\vartheta_1{}',\varphi_1{}')\,Y_l^m(\vartheta_2{}',\varphi_2{}'). \tag{3-33}$$

Remarque. La position de l'astérisque dans l'expression de $\mathcal{I}$ est indifférente. En effet, on peut utiliser deux fois la relation

$$Y_l^{m^*}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m\,Y_l^{-m}(\vartheta,\varphi) \tag{3-34}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}\sum_m Y_l^{m^*}(\vartheta_1,\varphi_1)\,Y_l^m(\vartheta_2,\varphi_2) &= \sum_m (-1)^m\,Y_l^{-m}(\vartheta_1,\varphi_1)\,Y_l^m(\vartheta_2,\varphi_2)\\ &= \sum_m (-1)^m\,Y_l^{-m}(\vartheta_1,\varphi_1)\,(-1)^m\,Y_l^{-m^*}(\vartheta_2,\varphi_2)\\ &= \sum_m Y_l^m(\vartheta_1,\varphi_1)\,Y_l^{m^*}(\vartheta_2,\varphi_2).\end{aligned} \tag{3-35}$$

Nous allons maintenant retrouver l'égalité (3-33) d'une autre manière. On sait que si les moments angulaires j_a et j_b sont égaux, on peut construire un invariant (voir (3A-1a) et (3-26)). D'après (3-16a) :

$$\left[\, Y_l\,(\vartheta_1,\varphi_1)\ \otimes\ Y_l\,(\vartheta_2,\varphi_2)\,\right]^0_0 = \sum_m \langle l\, m\ l\, {-m}\ \mid\ 0\,0\rangle\ Y_l^m\,(\vartheta_1,\varphi_1)\ Y_l^{-m}\,(\vartheta_2,\varphi_2)$$

avec :

$$\langle l\, m\ l\, {-m}\ \mid\ 0\,0\rangle\ =\ (-1)^{l-m}\,\frac{1}{\sqrt{2l+1}}$$

et la relation (3-34), on a

$$\left[\, Y_l\,(\vartheta_1,\varphi_1)\ \otimes\ Y_l\,(\vartheta_2,\varphi_2)\,\right]^0_0\ =\ (-1)^l\,\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\ \sum_m\ Y_l^m\,(\vartheta_1,\varphi_1)\ Y_l^{m^*}\,(\vartheta_2,\varphi_2) \tag{3-36a}$$

et inversement :

$$\sum_m\ Y_l^m\,(\vartheta_1,\varphi_1)\ Y_l^{m^*}\,(\vartheta_2,\varphi_2)\ =\ (-1)^l\,\sqrt{2l+1}\,\left[\, Y_l\,(\vartheta_1,\varphi_1)\ \otimes\ Y_l\,(\vartheta_2,\varphi_2)\,\right]^0_0. \tag{3-36b}$$

L'invariant (3-32) peut être calculé dans un repère quelconque. Choisissons $(\mathcal{S})$ tel que le vecteur $\mathbf{v}_1$ soit dirigé suivant l'axe Oz ; l'angle ϑ_2 n'est alors rien d'autre que ϑ_{12}. En utilisant (voir (1-34)) :

$$Y_l^m\,(\hat{\mathbf{v}} = Oz\,)\ =\ \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\delta_{m\,0} \tag{3-37a}$$

on obtient (voir (1-35b)) :

$$Y_l^0\,(\vartheta_2,\varphi_2)\ =\ \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,d^{(l)}_{0\,0}\,(\vartheta_{12}). \tag{3-37b}$$

Si on admet de plus que les matrices réduites et les polynômes de Legendre sont reliés par :

$$P_l\,(\cos\vartheta_{12})\ =\ d^{(l)}_{0\,0}\,(\vartheta_{12}) \tag{3-38}$$

on a :

$$\frac{2l+1}{4\pi}\,P_l\,(\cos\vartheta_{12})\ =\ \sum_m\ Y_l^m\,(\vartheta_1,\varphi_1)\ Y_l^{m^*}\,(\vartheta_2,\varphi_2). \tag{3-39}$$

3. Définition des coefficients de recouplage

Dans ce paragraphe nous allons étudier le couplage de plus de deux moments angulaires. Si le couplage de deux moments cinétiques quelconques se fait d'une manière unique (à une phase près (3-16b)), il n'en est pas de même lorsque le nombre de moments angulaires que l'on veut coupler est supérieur à deux. Nous allons successivement regarder comment on peut coupler trois puis quatre moments cinétiques.

3.1. Couplage de 3 moments angulaires

Si nous voulons additionner trois moments angulaires $\mathbf{J}_a,\ \mathbf{J}_b,\ \mathbf{J}_c$ pour obtenir le moment angulaire total $\mathbf{J} = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_b + \mathbf{J}_c$, on peut soit additionner $\mathbf{J}_a$ et $\mathbf{J}_b$ pour donner $\mathbf{J}_{ab} = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_b$ d'où $\mathbf{J} = \mathbf{J}_{ab} + \mathbf{J}_c$, soit additionner $\mathbf{J}_b$ et $\mathbf{J}_c$ pour donner $\mathbf{J}_{bc} = \mathbf{J}_b + \mathbf{J}_c$ ce qui entraîne $\mathbf{J} = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_{bc}$. Il existe une transformation unitaire qui permet de passer d'un couplage à l'autre. Dans les espaces $\mathcal{E}^a(\alpha_a\, j_a) \otimes \mathcal{E}^b(\alpha_b\, j_b)$ et $\mathcal{E}^b(\alpha_b\, j_b) \otimes \mathcal{E}^c(\alpha_b\, j_c)$ les relations de fermeture s'écrivent respectivement :

$$\sum_{j_{ab}\, m_{ab}} \mid (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, m_{ab} \,\rangle \,\langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, m_{ab} \mid = 1 \tag{3-40a}$$

$$\sum_{j_{bc}\, m_{bc}} \mid (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, m_{bc} \,\rangle \,\langle\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, m_{bc} \mid = 1. \tag{3-40b}$$

Dans l'espace total $\mathcal{E}^a(\alpha_a\, j_a) \otimes \mathcal{E}^b(\alpha_b\, j_b) \otimes \mathcal{E}^c(\alpha_b\, j_c)$, nous aurons :

$$\sum_{j_{ab}\, j\, m} \mid (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m \,\rangle \,\langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m \mid = 1 \tag{3-41a}$$

et :

$$\sum_{j_{bc}\, j\, m} \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m \,\rangle \,\langle\, j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m \mid = 1. \tag{3-41b}$$

Si nous désignons par α l'ensemble des nombres quantiques additionnels autres que les moments angulaires, la relation (3-41a) entraîne :

$$\begin{aligned} &\mid \alpha\ j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m \,\rangle = \\ &\quad \sum_{j_{ab}\, j'\, m'} \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j'\, m' \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m \,\rangle \ \mid \alpha\ (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j'\, m' \,\rangle \\ &\quad = \sum_{j_{ab}} \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m \,\rangle \ \mid \alpha\ (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m \,\rangle. \end{aligned} \tag{3-42}$$

On peut de même écrire :

$$\begin{aligned} &\mid \alpha\ j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m+1 \,\rangle = \\ &\quad \sum_{j_{ab}} \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m+1 \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m+1 \rangle \ \mid \alpha\ (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m+1 \,\rangle. \end{aligned} \tag{3-43}$$

Faisons agir l'opérateur J_+ sur les deux membres de l'égalité (3-42) :

$$\begin{aligned} &\hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\ \mid \alpha\ j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m+1 \,\rangle = \\ &\qquad \sum_{j_{ab}} \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m \rangle \\ &\qquad \times\ \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\ \mid \alpha\ (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m+1 \,\rangle \end{aligned} \tag{3-44}$$

c'est-à-dire :

$$| \; \alpha \;\; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m+1 \, \rangle = \\ \sum_{j_{ab}} \langle \, (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m \rangle \quad | \; \alpha \;\; (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m+1 \, \rangle. \quad (3\text{-}45)$$

En comparant (3-43) et (3-45), on voit que le produit scalaire est indépendant de m. Le passage d'une base à l'autre peut donc être écrit :

$$| \; \alpha \;\; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m \, \rangle = \\ \sum_{j_{ab}} \langle \, (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \, \rangle \quad | \; \alpha \;\; (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m \rangle. \quad (3\text{-}46)$$

Cette indépendance en fonction de m est une propriété intrinsèque des rotations. En effet :

$$\begin{aligned} &\langle \, (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m \, \rangle = \\ &\quad \langle \, (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m \; | \; \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger} \, \hat{R}_{\mathrm{p}} \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m \, \rangle \\ &= \sum_{m'' \, m'} \mathcal{D}^{(j)\,*}_{m'' \, m}(\mathrm{P} \, ; \gamma_i) \, \mathcal{D}^{(j)}_{m' \, m}(\mathrm{P} \, ; \gamma_i) \, \langle \, (j_a \, j_b) \, j_{ab} \, j_c \, ; j \; m'' \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m' \rangle \\ &= \sum_{m'} \mathcal{D}^{(j)\,*}_{m' \, m}(\mathrm{P} \, ; \gamma_i) \, \mathcal{D}^{(j)}_{m' \, m}(\mathrm{P} \, ; \gamma_i) \; \langle \, (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m' \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m' \, \rangle \\ &= \sum_{m'} \langle \, (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m' \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m' \, \rangle \, \mathcal{D}^{(j)\,*}_{m' \, m}(\mathrm{P} \, ; \gamma_i) \, \mathcal{D}^{(j)}_{m' \, m}(\mathrm{P} \, ; \gamma_i). \end{aligned} \quad (3\text{-}47)$$

On peut intégrer les deux membres de cette égalité et en utilisant la relation suivante

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\gamma_3 \; \int_0^{\pi} \sin \gamma_2 \mathrm{d}\gamma_2 \; \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\gamma_1 \; = \; 8\pi^2 \quad (3\text{-}48)$$

et (1C-57). On obtient :

$$\langle \, (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m \rangle = \\ \frac{1}{2j+1} \sum_{m'} \langle \, (j_a \, j_b) \; j_{ab} \, j_c \, ; j \; m' \; | \; j_a \, (j_b \, j_c) \; j_{bc} \, ; j \; m' \rangle. \quad (3\text{-}49)$$

Le membre de droite est indépendant de m ce qui doit être le cas pour le membre de gauche.

3.2. Couplage de 4 moments angulaires

Considérons à présent l'addition de quatre moments angulaires $\mathbf{J}_a$, $\mathbf{J}_b$, $\mathbf{J}_c$, $\mathbf{J}_d$ pour obtenir le moment angulaire total $\mathbf{J} = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_b + \mathbf{J}_c + \mathbf{J}_d$. Examinons la transformation unitaire qui permet de passer du couplage $\mathbf{J} = \mathbf{J}_{ab} + \mathbf{J}_{cd}$ au couplage $\mathbf{J} = \mathbf{J}_{ac} + \mathbf{J}_{bd}$.

Les relations de fermeture dans les espaces $\mathcal{E}^a(\alpha_a\ j_a) \otimes \mathcal{E}^b(\alpha_b\ j_b)$ et $\mathcal{E}^c(\alpha_c\ j_c) \otimes \mathcal{E}^d(\alpha_d\ j_d)$ s'écrivent respectivement :

$$\sum_{j_{ab}\, m_{ab}} \mid (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, m_{ab} \rangle \langle (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, m_{ab} \mid = 1 \tag{3-50}$$

$$\sum_{j_{cd}\, m_{cd}} \mid (j_c\, j_d)\, j_{cd}\, m_{cd} \rangle \langle (j_c\, j_d)\, j_{cd}\, m_{cd} \mid = 1. \tag{3-51}$$

De même dans les espaces $\mathcal{E}^a(\alpha_a\ j_a) \otimes \mathcal{E}^c(\alpha_c\ j_c)$ et $\mathcal{E}^b(\alpha_b\ j_b) \otimes \mathcal{E}^d(\alpha_d\ j_d)$ nous avons :

$$\sum_{j_{ac}\, m_{ac}} \mid (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, m_{ac} \rangle \langle (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, m_{ac} \mid = 1 \tag{3-52}$$

$$\sum_{j_{cd}\, m_{cd}} \mid (j_c\, j_d)\, j_{cd}\, m_{cd} \rangle \langle (j_c\, j_d)\, j_{cd}\, m_{cd} \mid = 1. \tag{3-53}$$

Dans l'espace total, produit tensoriel $\mathcal{E}^a(\alpha_a\ j_a) \otimes \mathcal{E}^b(\alpha_b\ j_b) \otimes \mathcal{E}^c(\alpha_c\ j_c) \otimes \mathcal{E}^d(\alpha_d\ j_d)$, nous aurons les relations de fermeture :

$$\sum_{j_{ab}\, j_{cd}} \sum_{j\, m} \mid (j_a j_b)\, j_{ab}\, (j_c j_d)\, j_{cd}\, ; j\, m \rangle \langle (j_a j_b)\, j_{ab}\, (j_c j_d)\, j_{cd}\, ; j\, m \mid = 1 \tag{3-54}$$

et

$$\sum_{j_{ac}\, j_{bd}} \sum_{j\, m} \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\, (j_b j_d)\, j_{bd}\, ; j\, m \rangle \langle (j_a j_c)\, j_{ac}\, (j_b j_d)\, j_{bd}\, ; j\, m \mid = 1. \tag{3-55}$$

On peut alors développer un état propre des opérateurs $\mathbf{J}^2$ et J_z exprimé dans une base en fonction de l'autre base :

$$\begin{aligned} \mid \alpha\, (j_a j_c)\, j_{ac}\, (j_b j_d)\, j_{bd}\, ; j\, m \rangle = & \\ \sum_{j_{ab}\, j_{cd}} \langle (j_a j_b)\, j_{ab}\, (j_c j_d)\, j_{cd}\, ; j \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\, (j_b j_d)\, j_{bd}\, ; j \rangle & \\ \times \mid \alpha\, (j_a j_b)\, j_{ab}\, (j_c j_d)\, j_{cd}\, ; j\, m \rangle. & \qquad \text{(3-56a)} \end{aligned}$$

et inversement :

$$\begin{aligned} \mid \alpha\, (j_a j_b)\, j_{ab}\, (j_c j_d)\, j_{cd}\, ; j\, m \rangle = & \\ \sum_{j_{ac}\, j_{bd}} \langle (j_a j_c)\, j_{ac}\, (j_b j_d)\, j_{bd}\, ; j \mid (j_a j_b)\, j_{ab}\, (j_c j_d)\, j_{cd}\, ; j \rangle & \\ \times \mid \alpha\, (j_a j_c)\, j_{ac}\, (j_b j_d)\, j_{bd}\, ; j\, m \rangle. & \qquad \text{(3-57a)} \end{aligned}$$

En général, plutôt que d'utiliser les éléments de la matrice de passage unitaire on préfère, pour des raison de symétrie, écrire la transformation à l'aide des coefficients $9-j$ dont la définition est donnée par (3B-74). Les relations (3-56a) et (3-57a) deviennent alors respectivement

$$| \, \alpha \, (j_a j_c) \, j_{ac} \, (j_b j_d) \, j_{bd} \, ; j \, m \, \rangle = \sum_{j_{ab} \, j_{cd}} \hat{\jmath}_{ab} \, \hat{\jmath}_{cd} \, \hat{\jmath}_{ac} \, \hat{\jmath}_{bd} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j_d & j_{cd} \\ j_{ac} & j_{bd} & j \end{Bmatrix} | \, \alpha \, (j_a j_b) \, j_{ab} \, (j_c j_d) \, j_{cd} \, ; j \, m \, \rangle \tag{3-56b}$$

$$| \, \alpha \, (j_a j_b) \, j_{ab} \, (j_c j_d) \, j_{cd} \, ; j \, m \, \rangle = \sum_{j_{ac} \, j_{bd}} \hat{\jmath}_{ac} \, \hat{\jmath}_{bd} \, \hat{\jmath}_{ab} \, \hat{\jmath}_{cd} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j_d & j_{cd} \\ j_{ac} & j_{bd} & j \end{Bmatrix} | \, \alpha \, (j_a j_c) \, j_{ac} \, (j_b j_d) \, j_{bd} \, ; j \, m \, \rangle \tag{3-57b}$$

où nous avons posé $\hat{x} = \sqrt{2x+1}$.

Il est aussi possible d'additionner les trois premiers moments angulaires puis le quatrième : $\mathbf{J} = \mathbf{J}_{ab\,c} + \mathbf{J}_d$ avec $\mathbf{J}_{ab\,c} = \mathbf{J}_{ab} + \mathbf{J}_c$. Le ket

$$| \, \alpha \, [\, (j_a j_b) \, j_{ab} \, j_c \,] \, j_{ab\,c} \, j_d \, ; j \, m \, \rangle$$

décrira l'état physique dans cette base. Si on pose :

$$| \, (j_a j_b) \, j_{ab} \, \rangle \equiv | \, (j_a j_b) \, J_A \, \rangle ; \quad | \, j_c \, \rangle \equiv | \, J_B \, \rangle ; \quad | \, j_d \, \rangle \equiv | \, J_C \, \rangle . \tag{3-58}$$

On aura :

$$| \, \alpha \, [\, (j_a j_b) \, j_{ab} \, j_c \,] \, j_{ab\,c} \, j_d \, ; j \, m \, \rangle \equiv | \, \alpha \, (J_A J_B) \, J_{AB} \, J_C \, ; jm \, \rangle = \sum_{J_{BC}} \langle \, J_A \, (J_B \, J_C) \, J_{BC} \, ; j \, | \, (J_A \, J_B) \, J_{AB} \, J_C \, ; j \rangle \ \ | \, \alpha \ J_A \, (J_B \, J_C) \, J_{BC} \, ; j \, m \, \rangle$$

ou encore :

$$| \, \alpha \, [\, (j_a j_b) \, j_{ab} \, j_c \,] \, j_{ab\,c} \, j_d \, ; j \, m \, \rangle = \sum_{j_{cd}} \langle \, j_{ab} \, (j_c \, j_d) \, j_{cd} \, ; j \, | \, (j_{ab} \, j_c) \, j_{ab\,c} \, j_d \, ; j \rangle \ \ | \, \alpha \ (j_a j_b) \, j_{ab} \, (j_c \, j_d) \, j_{cd} \, ; j \, m \, \rangle \tag{3-59}$$

et inversement :

$$| \, \alpha \ (j_a j_b) \, j_{ab} \, (j_c \, j_d) \, j_{cd} \, ; j \, m \, \rangle = \sum_{j_{ab\,c}} \langle \, (j_{ab} \, j_c) \, j_{ab\,c} \, j_d \, ; j \, | \, j_{ab} \, (j_c \, j_d) \, j_{cd} \, ; j \rangle \ \ | \, \alpha \, [\, (j_a j_b) \, j_{ab} \, j_c \,] \, j_{ab\,c} \, j_d \, ; j \, m \, \rangle . \tag{3-60}$$

La relation (3-59) donne le développement d'un couplage basé sur un sous ensemble de 3 moments angulaires et un autre réduit au dernier moment angulaire en fonction de deux sous ensembles de deux moments angulaires. Nous allons maintenant établir une transformation faisant passer d'un sous ensemble de trois moments angulaires à un autre sous ensemble de 3 moments cinétiques. Cette partie peut être omise en première lecture.

La relation (3-59) peut s'écrire en utilisant les coefficients de Racah (voir le complément B) :

$$\begin{aligned} &|\ \alpha\,[\,(j_a j_b)\,j_{ab}\,j_c\,]\,j_{ab\,c}\,j_d\ ;j\,m\,\rangle = \\ &\qquad \sum_{j_{cd}} \sqrt{(2j_{ab\,c}+1)\,(2j_{cd}+1)}\,W(j_{ab}\,j_c\,j\,j_d\,;j_{ab\,c}\,j_{cd}) \\ &\qquad\qquad \times \mid\ \alpha\ (j_a j_b)\,j_{ab}\,(j_c\,j_d)\,j_{cd}\,;j\,m\rangle. \end{aligned} \tag{3-61}$$

Si on permute j_c et j_d dans le ket de droite, puis si on recouple j_a et j_d d'une part et j_b et j_c d'autre part, on obtient :

$$\begin{aligned} &|\ \alpha\,[\,(j_a j_b)\,j_{ab}\,j_c\,]\,j_{ab\,c}\,j_d\ ;j\,m\,\rangle = \sum_{j_{cd}\,j_{ad}\,j_{bc}} (-1)^{j_c+j_d-j_{cd}}\,(-1)^{j_b+j_c-j_{bc}} \\ &\quad \times \sqrt{(2j_{ab\,c}+1)\,(2j_{cd}+1)}\,\sqrt{(2j_{ad}+1)\,(2j_{bc}+1)}\,\sqrt{(2j_{ab}+1)\,(2j_{cd}+1)} \\ &\quad \times W(j_{ab}\,j_c\,j\,j_d\,;j_{ab\,c}\,j_{cd}) \begin{Bmatrix} j_a & j_d & j_{ad} \\ j_b & j_c & j_{bc} \\ j_{ab} & j_{cd} & j \end{Bmatrix} \mid\ \alpha\ (j_a j_d)\,j_{ad}\,(j_c\,j_b)\,j_{bc}\,;j\,m\rangle. \end{aligned} \tag{3-62}$$

Le membre de droite de cette équation peut se développer sur une nouvelle base obtenue en couplant j_a et j_d à j_{ad} et j_{ad} à j_c pour obtenir $j_{ad\,c}$ et enfin en couplant $j_{ad\,c}$ à j_b pour obtenir j. Si on écrit cette transformation en fonction des coefficients de Racah, on obtient

$$\begin{aligned} &|\ \alpha\ (j_a j_d)\,j_{ad}\,(j_c\,j_b)\,j_{bc}\,;j\,m\,\rangle = \\ &\qquad \sum_{j_{ad\,c}} \sqrt{(2j_{ad\,c}+1)\,(2j_{bc}+1)}\,W(j_{ad}\,j_c\,j\,j_b\,;j_{ad\,c}\,j_{bc}) \\ &\qquad\qquad \times \mid\ \alpha\,[\,(j_a j_d)\,j_{ad}\,j_c\,]\,j_{ad\,c}\,j_b\ ;j\,m\rangle. \end{aligned} \tag{3-63}$$

En utilisant la relation (3B-78) et les relations de symétrie des $9-j$, on trouve :

$$\begin{aligned} &\textstyle\sum_{j_{bc}} (-1)^{j_b+j_c-j_{bc}}\,(2j_{bc}+1)\,W(j_{ad}\,j_c\,j\,j_b\,;j_{ad\,c}\,j_{bc}) \begin{Bmatrix} j_a & j_d & j_{ad} \\ j_b & j_c & j_{bc} \\ j_{ab} & j_{cd} & j \end{Bmatrix} = \\ &(-1)^{j_a+j_d+j_{ad}+2j_b+2j_c+j_{ab}+j_{cd}+j}\,W(j_b\,j\,j_a\,j_{cd}\,;j_{ad\,c}\,j_{ab})\,W(j_c\,j_{ad}\,j_{cd}\,j_a\,;j_{ad\,c}\,j_d). \end{aligned} \tag{3-64}$$

D'autre part, on peut aussi utiliser la relation (3B-77) qui donne la contraction de trois coefficients de Racah en fonction d'un coefficient $9-j$:

$$\sum_{j_{cd}} (2j_{cd}+1)\, W(j_{ab}\, j_c\, j\, j_d\, ; j_{ab\,c}\, j_{cd})\, W(j_b\, j\, j_a\, j_{cd}\, ; j_{ad\,c}\, j_{ab})$$
$$\times\, W(j_c\, j_{ad}\, j_{cd}\, j_a\, ; j_{ad\,c}\, j_d) = (-1)^{j_b-j_{ab}-j_{ad}+j_d} \begin{Bmatrix} j & j_{ad\,c} & j_b \\ j_d & j_{ad} & j_a \\ j_{ab\,c} & j_c & j_{ab} \end{Bmatrix}. \qquad \text{(3-65)}$$

On a donc la transformation :

$$\begin{aligned} &|\ \alpha\,[\,(j_a j_b)\, j_{ab}\, j_c\,]\, j_{ab\,c}\, j_d\, ; j\, m\,\rangle = \sqrt{(2j_{ab\,c}+1)\,(2j_{ab}+1)} \\ &\times \sum_{j_{ad}\, j_{ad\,c}} (-1)^{j_a+j_{ad}-j_d}\, (-1)^{j+j_{ad\,c}-j_b}\, (-1)^{j_c+j_{ad\,c}+j_{ad}} \sqrt{(2j_{ad}+1)\,(2j_{ad\,c}+1)} \\ &\times \begin{Bmatrix} j & j_{ad\,c} & j_b \\ j_d & j_{ad} & j_a \\ j_{ab\,c} & j_c & j_{ab} \end{Bmatrix} |\ \alpha\,[\,(j_a j_d)\, j_{ad}\, j_c\,]\, j_{ad\,c}\, j_b\, ; j\, m\,\rangle. \end{aligned} \qquad \text{(3-66a)}$$

En utilisant les relations de symétrie des $9-j$, ce développement s'écrit aussi :

$$\begin{aligned} &|\ \alpha\,[\,(j_a j_b)\, j_{ab}\, j_c\,]\, j_{ab\,c}\, j_d\, ; j\, m\,\rangle = \sqrt{(2j_{ab\,c}+1)\,(2j_{ab}+1)} \\ &\times \sum_{j_{ad}\, j_{ad\,c}} (-1)^{j_a+j_{ad}-j_d}\, (-1)^{j+j_{ad\,c}-j_b}\, (-1)^{j_c+j_{ad\,c}+j_{ad}} \sqrt{(2j_{ad}+1)\,(2j_{ad\,c}+1)} \\ &\times \begin{Bmatrix} j_b & j_a & j_{ab} \\ j & j_d & j_{ab\,c} \\ j_{ad\,c} & j_{ad} & j_c \end{Bmatrix} |\ \alpha\,[\,(j_a j_d)\, j_{ad}\, j_c\,]\, j_{ad\,c}\, j_b\, ; j\, m\,\rangle. \end{aligned} \qquad \text{(3-66b)}$$

En multipliant les deux membres par $\sqrt{(2j_{ab}+1)\,(2j_{ab\,c}+1)} \begin{Bmatrix} j_b & j_a & j_{ab} \\ j & j_d & j_{ab\,c} \\ j'_{ad\,c} & j'_{ad} & j_c \end{Bmatrix}$, en sommant sur $j_{ab}, j_{ab\,c}$ et en utilisant la relation d'orthogonalité (3B-75), on a :

$$\begin{aligned} &\textstyle\sum_{j_{ab}\, j_{ab\,c}} \sqrt{(2j_{ab}+1)\,(2j_{ab\,c}+1)} \begin{Bmatrix} j_b & j_a & j_{ab} \\ j & j_d & j_{ab\,c} \\ j'_{ad\,c} & j'_{ad} & j_c \end{Bmatrix} \\ &\times\, |\ \alpha\,[\,(j_a j_b)\, j_{ab}\, j_c\,]\, j_{ab\,c}\, j_d\, ; j\, m\,\rangle = \\ &\textstyle\sum_{j_{ad}\, j_{ad\,c}} (-1)^{j_a+j_{ad}-j_d}\, (-1)^{j+j_{ad\,c}-j_b}\, (-1)^{j_c+j_{ad\,c}+j_{ad}} \sqrt{(2j_{ad}+1)\,(2j_{ad\,c}+1)} \\ &\times\, |\ \alpha\,[\,(j_a j_d)\, j_{ad}\, j_c\,]\, j_{ad\,c}\, j_b\, ; j\, m\,\rangle \\ &\times \textstyle\sum_{j_{ab}\, j_{ab\,c}} (2j_{ab\,c}+1)\,(2j_{ab}+1) \begin{Bmatrix} j_b & j_a & j_{ab} \\ j & j_d & j_{ab\,c} \\ j_{ad\,c} & j_{ad} & j_c \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_b & j_a & j_{ab} \\ j & j_d & j_{ab\,c} \\ j'_{ad\,c} & j'_{ad} & j_c \end{Bmatrix} \\ &= \frac{(-1)^{j_a+j'_{ad}-j_d}\, (-1)^{j+j'_{ad\,c}-j_b}\, (-1)^{j_c+j'_{ad\,c}+j'_{ad}}}{\sqrt{(2j'_{ad}+1)\,(2j'_{ad\,c}+1)}}\ |\ \alpha\,[\,(j_a j_d)\, j'_{ad}\, j_c\,]\, j'_{ad\,c}\, j_b\, ; j\, m\,\rangle. \end{aligned}$$

D'où finalement

$$
\begin{aligned}
&|\ \alpha\,[\,(j_a j_d)\,j_{ad}\,j_c\,]\,j_{ad\,c}\,j_b\;;j\,m\,\rangle = \\
&(-1)^{j_a+j_{ad}-j_d}\,(-1)^{j+j_{ad\,c}-j_b}\,(-1)^{j_c+j_{ad\,c}-j_{ad}}\,\sqrt{(2j_{ad}+1)\,(2j_{ad\,c}+1)} \\
&\times \sum_{j_{ab}\,j_{ab\,c}} \sqrt{(2j_{ab}+1)\,(2j_{ab\,c}+1)} \begin{Bmatrix} j_b & j_a & j_{ab} \\ j & j_d & j_{ab\,c} \\ j_{ad\,c} & j_{ad} & j_c \end{Bmatrix} \\
&\times |\ \alpha\,[\,(j_a j_b)\,j_{ab}\,j_c\,]\,j_{ab\,c}\,j_d\;;j\,m\,\rangle. \qquad (3\text{-}67)
\end{aligned}
$$

Compléments au chapitre 3

A. Coefficients de Clebsch-Gordan et de Wigner

A.1. Formules de récurrence

Les coefficients de C.G $\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle$ ne sont non nuls que si les relations suivantes sont respectées :

$$\mid j_a - j_b \mid \leq j \leq j_a + j_b \tag{3A-1a}$$

et

$$m = m_a + m_b. \tag{3A-1b}$$

La relation (3A-1a) est démontrée dans les cours de mécanique quantique aussi nous ne nous y attarderons pas davantage. La seconde égalité peut être établie à l'aide des opérateurs $J_z = J_{az} + J_{bz}$ que l'on fait agir sur les états $\mid \alpha_a\, \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\, m\,\rangle$:

$$\begin{aligned}
&J_z \mid \alpha_a\, \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\, m\,\rangle = m\hbar \mid \alpha_a\, \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\, m\,\rangle \\
&= m\hbar \sum_{m'_a\, m'_b} \langle j_a\, m'_a\, j_b\, m'_b \mid j\, m\rangle \mid \alpha_a\, j_a\, m'_a\ \ \alpha_b\, j_b\, m'_b\,\rangle \\
&= (J_{az} + J_{bz}) \mid \alpha_a\, \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\, m\,\rangle \\
&= \sum_{m'_a\, m'_b} \langle j_a\, m'_a\, j_b\, m'_b \mid j\, m\rangle\, (J_{az} + J_{bz}) \mid \alpha_a\, j_a\, m'_a\ \ \alpha_b\, j_b\, m'_b\,\rangle \\
&= \sum_{m'_a\, m'_b} \langle j_a\, m'_a\, j_b\, m'_b \mid j\, m\rangle\, \hbar\, (m'_a + m'_b) \mid \alpha_a\, j_a\, m'_a\ \ \alpha_b\, j_b\, m'_b\,\rangle
\end{aligned}$$

en multipliant les deux membres de cette égalité par $\langle\, j_a m_a \alpha_a \mid \langle\, j_b m_b \alpha_b \mid$, on obtient la condition $m = m_a + m_b$.

Il existe une autre méthode pour retrouver la conservation de la troisième composante du moment angulaire. Il suffit pour cela de considérer l'action de l'opérateur de rotation autour de l'axe Oz sur le ket $\mid \alpha_a\, \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\, m\rangle$ et d'utiliser l'égalité

$$\hat{R}_{\mathrm{p}} = \hat{R}^{a}_{\mathrm{p}}\, \hat{R}^{b}_{\mathrm{p}}.$$

En effet :

$$\begin{aligned}
&\hat{R}_{\mathrm{p}}(\gamma/Oz) \mid \alpha_a\,\alpha_b\ \ (j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle\ =\ \mathrm{e}^{i\,m}\ \mid \alpha_a\,\alpha_b\ \ (j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle \\
&=\ \mathrm{e}^{i\,m} \sum_{m'_a\,m'_b} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m\rangle \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \\
&=\ \sum_{m'_a\,m'_b} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m\rangle\ \hat{R}^a_{\mathrm{p}}\,(\gamma/Oz)\ \hat{R}^b_{\mathrm{p}}\,(\gamma/Oz) \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \\
&=\ \sum_{m'_a\,m'_b} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m\rangle\ \mathrm{e}^{i\,(m'_a+m'_b)} \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle
\end{aligned}$$

en multipliant les deux membres de cette relation par $\langle\, j_a m_a \alpha_a \mid \langle\, j_b m_b \alpha_b \mid$, il vient :

$$\mathrm{e}^{i\,m}\ =\ \mathrm{e}^{i\,(m_a+m_b)}$$

ce qui démontre l'égalité cherchée.

Les opérateurs $J_\pm\ =\ J_{a\pm} + J_{b\pm}$ agissant sur les états $\mid\ \alpha_a\,\alpha_b\ \ (j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle$ permettent d'établir des formules de récurrence pour $\Delta j = 0$ et $\Delta m\ =\ \pm 1$. Par exemple avec les opérateurs $J_+ = J_{a+} + J_{b+}$, on a :

$$\begin{aligned}
&J_+ \mid \alpha_a\ j_a\,m_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m_b\,\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \mid \alpha_a\ \alpha_b\ \ (j_a\,j_b)\,j\,m+1\,\rangle \\
&=\ \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \sum_{m'_a\,m'_b} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m\rangle \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \\
&=\ (J_{a+} + J_{b+}) \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \\
&=\ \sum_{m'_a\,m'_b} \langle j_a\,m'_a\,j_b\,m'_b \mid j\,m\rangle\,[\hbar\sqrt{j_a(j_a+1) - m'_a(m'_a+1)} \\
&\qquad\qquad \times \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a + 1\ \alpha_b\ j_b\,m'_b\,\rangle \\
&\qquad\qquad + \hbar\sqrt{j_b(j_b+1) - m'_b(m'_b+1)} \mid \alpha_a\ j_a\,m'_a\ \ \alpha_b\ j_b\,m'_b + 1\,\rangle\,]
\end{aligned}$$

en multipliant les deux membres de cette égalité par $\langle\, j_a m_a \alpha_a \mid \langle\, j_b m_b \alpha_b \mid$, on trouve :

$$\begin{aligned}
&\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\ \langle j_a\,m_a\ \ j_b\,m_b \mid j\,m+1\rangle = \\
&\qquad \sqrt{j_a(j_a+1) - m_a(m_a-1)}\ \langle j_a\,m_a - 1\,j_b\,m_b \mid j\,m\rangle \\
&\qquad\qquad + \sqrt{j_b(j_b+1) - m_b(m_b-1)}\ \langle j_a\,m_a\ \ j_b\,m_b - 1 \mid j\,m\rangle.
\end{aligned}$$

On trouve une relation analogue à l'aide des opérateurs $J_-\ =\ J_{a-} + J_{b-}$. Avec la substitution $m\ \to\ m+1$, ces relations de récurrence deviennent :

(i) $\Delta j\ =\ 0 \qquad \Delta m\ =\ 1$

$$\begin{aligned}
&\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\ \langle j_a\,m_a\ \ j_b\,m_b \mid j\,m\rangle = \\
&\qquad \sqrt{j_a(j_a+1) - m_a(m_a+1)}\ \langle j_a\,m_a + 1\ j_b\,m_b \mid j\,m+1\rangle \\
&\qquad\quad + \sqrt{j_b(j_b+1) - m_b(m_b+1)}\ \langle j_a\,m_a\ \ j_b\,m_b + 1 \mid j\,m+1\rangle. \qquad \text{(3A-2)}
\end{aligned}$$

(ii) $\Delta j = 0 \qquad \Delta m = -1$

$$\begin{aligned}\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \\ \sqrt{j_a(j_a+1)-m_a(m_a-1)}\,\langle j_a\, m_a-1\ j_b\, m_b \mid j\, m-1\rangle \\ +\sqrt{j_b(j_b+1)-m_b(m_b-1)}\,\langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b-1 \mid j\, m-1\rangle. \quad \text{(3A-3)}\end{aligned}$$

Messiah donne une relation de récurrence supplémentaire :

(iii) $\Delta j = \pm 1 \qquad \Delta m = 0$

$$\begin{aligned}A_0\,\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle \\ = A_+\,\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j+1\, m\rangle + A_-\,\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j-1\, m\rangle \quad \text{(3A-4)}\end{aligned}$$

avec :

$$A_0 = m_a - m_b + m\,\frac{j_b(j_b+1)-j_a(j_a+1)}{j(j+1)}\,; \quad A_+ = f(j+1)\,; \quad A_- = f(j)$$

$$f(x) = \sqrt{x^2-m^2}\left[\frac{(j_a+j_b+1+x)}{2x}\,\frac{(j_a+j_b+1-x)}{2x}\,\frac{(x+j_a-j_b)}{2x-1}\,\frac{(x+j_b-j_a)}{2x+1}\right]^{1/2}.$$

A.2. Conventions et forme explicite

Conventions

Posons $m = j+1$ dans (3A-3) :

$$\begin{aligned}\langle j_a\, m_a-1\ j_b\, m_b \mid j\, j\rangle = -\sqrt{\frac{j_b(j_b+1)-m_b(m_b-1)}{j_a(j_a+1)-m_a(m_a-1)}} \\ \times\,\langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b-1 \mid j\, j\rangle. \quad \text{(3A-5)}\end{aligned}$$

Cette relation permet de calculer les coefficients de Clebsch-Gordan pour $m = j$. Ils sont tous proportionnels les uns aux autres avec des coefficients de proportionnalité réels. Pour que les C.G avec $m = j$ soient réels, il suffit qu'un seul soit défini réel. Les conventions de Condon et Shortley, Racah et Wigner conduisent aux mêmes valeurs. Suivant Racah, on peut imposer à $\langle j_a\, j_a\ j_b\, j-j_a \mid j\, j\rangle$ d'être réel et positif. Les relations de récurrence générales (3A-2) et (3A-3) montrent qu'alors tous les C.G sont réels, ce qui entraîne :

$$\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle^* \quad \text{(3A-6a)}$$

et

$$\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \langle j\, m \mid j_a\, m_a\, j_b\, m_b\rangle. \quad \text{(3A-6b)}$$

Forme explicite des coefficients de Clebsch-Gordan

Racah a donné une formule générale donnant la valeur des C.G sous forme explicite :

$$\begin{aligned}
&\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \delta_{m_a+m_b\ \, m}\ \ \Delta(j_a, j_b, j) \\
&\times \Big[\ (2j+1)\ (j_a+m_a)!\ (j_a-m_a)!\ (j_b+m_b)!\ (j_b-m_b)!\ (j+m)!\ (j-m)!\ \Big]^{1/2} \\
&\times \sum_{\nu} (-1)^{\nu}\ \big[\, (j_a-m_a-\nu)!\, (j-j_b+m_a+\nu)!\, (j_b+m_b-\nu)! \\
&\times (j-j_a-m_b+\nu)!\ \nu!\ (j_a+j_b-j-\nu)!\ \big]^{-1}
\end{aligned} \tag{3A-7a}$$

avec :

$$\Delta(a,b,c) = \left[\ \frac{(a+b-c)!\ (a+c-b)!\ (b+c-a)!}{(a+b+c+1)!}\ \right]^{1/2}. \tag{3A-7b}$$

Cette fonction Δ impose en particulier que les inégalités triangulaires soient respectées :

$$\mid a-b \mid \leq c\ \leq a+b. \tag{3A-7c}$$

Nous allons maintenant établir l'expression ci-dessus en suivant le raisonnement de Wigner. Nous montrerons que les deux formes obtenues c'est-à-dire celle de Racah et celle de Wigner, qui semblent différentes, sont en fait tout à fait équivalentes.

En multipliant à gauche la relation (3-30) par $\mathcal{D}^{(j)\ *}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)$, en intégrant sur tout le volume, en utilisant (1C-57) et en définissant

$$\mathrm{d}\gamma_i\ =\ \sin\gamma_2\, \mathrm{d}\gamma_2\, \mathrm{d}\gamma_3 \mathrm{d}\gamma_1 \tag{3A-8}$$

on obtient :

$$\begin{aligned}
&\int \mathcal{D}^{(j_a)}_{m'_a\,m_a}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\ \mathcal{D}^{(j_b)}_{m'_b\,m_b}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\ \mathcal{D}^{(j)\ *}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\ \mathrm{d}\gamma_i = \\
&\qquad \frac{8\pi^2}{2j+1}\ \langle j_a\, m'_a\ \ j_b\, m'_b \mid j\, m'\rangle\ \langle j_a\, m_a\ \ j_b\, m_b \mid j\, m\rangle.
\end{aligned} \tag{3A-9}$$

L'idée de Wigner a été de calculer le second membre pour des valeurs particulières de m'_a, m'_b et m' pour lesquelles le membre de gauche est relativement simple.

D'après (1C-40a) et (1C-40b), les matrices de rotation réduites $d^{(k)}_{q'\,q}(P;\gamma)$ sont particulièrement simples lorsque $q' = k$ ou $q' = -k$. Dans le premier cas la somme sur x est réduite au seul terme $x = 0$ tandis que dans le second, seule la valeur $x = k + q$ est permise :

$$d^{(k)}_{k\,q}(P;\gamma)\ =\ \sqrt{\frac{(2k)!}{(k+q)!\ (k-q)!}}\ \cos^{k+q}(\gamma/2)\ \sin^{k-q}(\gamma/2) \tag{3A-11a}$$

et

$$d^{(k)}_{-k\,q}(P;\gamma) \;=\; (-1)^{k+q}\,\sqrt{\frac{(2k)!}{(k+q)!\,(k-q)!}}\;\cos^{k-q}(\gamma/2)\;\sin^{k+q}(\gamma/2). \quad \text{(3A-11b)}$$

Suivant Wigner, nous allons supposer que $\langle j_a\,j_a\;\;j_b\,{-j_b}\;\mid\;j\,j_a-j_b\rangle$ est réel et positif. Il vient alors :

$$\begin{aligned}
&\langle j_a\,j_a\;\;j_b\,{-j_b}\;\mid\;j\,j_a-j_b\rangle\;\langle j_a\,m_a\;\;j_b\,m_b\;\mid\;j\,m\rangle = \\
&\quad\frac{2j+1}{8\pi^2}\int \mathcal{D}^{(j_a)}_{j_a\,m_a}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;\mathcal{D}^{(j_b)}_{-j_b\,m_b}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;\mathcal{D}^{(j)}_{j_a-j_b\,m}{}^{*}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;\mathrm{d}\gamma_i \\
&= \frac{2j+1}{2}\sqrt{\frac{(2j_a)!}{(j_a+m_a)!\,(j_a-m_a)!}}\sqrt{\frac{(2j_b)!}{(j_b+m_b)!\,(j_b-m_b)!}} \\
&\quad\times\sum_x(-1)^{x+j_b+m_b}\;\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+j_a-j_b)!\,(j+j_b-j_a)!}}{(j+j_b-j_a-x)!\,(j+m-x)!\,x!\,(x+j_a-j_b-m)!} \\
&\qquad\times\int_0^{\pi}\cos^{2j+2j_b+2m_a-2x}(\gamma/2)\;\sin^{2j_a-2m_a+2x}(\gamma/2)\;\sin(\gamma/2)\mathrm{d}\gamma
\end{aligned}$$

en utilisant $\sin\gamma \;=\; 2\sin(\gamma/2)\;\cos(\gamma/2)$ et le résultat suivant valable pour $p+1$ et $q+1$ des nombres réels positifs :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin^p u\;\cos^q u\,\mathrm{d}u \;=\; \frac{\left(\dfrac{p+1}{2}-1\right)!\;\left(\dfrac{q+1}{2}-1\right)!}{2\left(\dfrac{p+q}{2}\right)!}$$

avec $q = 2j+2j_b+2m_a-2x+1$ et $p = 2j_a-2m_a+2x+1$, on trouve :

$$\begin{aligned}
&\langle j_a\,j_a\;\;j_b\,{-j_b}\;\mid\;j\;j_a-j_b\rangle\;\langle j_a\,m_a\;\;j_b\,m_b\;\mid\;j\,m\rangle = \\
&(2j+1)\sqrt{\frac{(2j_a)!}{(j_a+m_a)!\,(j_a-m_a)!}}\sqrt{\frac{(2j_b)!}{(j_b+m_b)!\,(j_b-m_b)!}} \\
&\quad\times\sum_x(-1)^{x+j_b+m_b}\;\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+j_a-j_b)!\,(j+j_b-j_a)!}}{(j+j_b-j_a-x)!\,(j+m-x)!\,x!\,(x+j_a-j_b-m)!} \\
&\qquad\times\frac{(j_a-m_a+x)!\,(j+j_b+m_a-x)!}{(j+j_a+j_b+1)!} \\
&= \frac{2j+1}{(j+j_a+j_b+1)!}\sqrt{\frac{(2j_a)!\,(2j_b)!\,(j+j_a-j_b)!\,(j+j_b-j_a)!\,(j+m)!\,(j-m)!}{(j_a+m_a)!\,(j_a-m_a)!\,(j_b+m_b)!\,(j_b-m_b)!}} \\
&\quad\times\sum_x(-1)^{x+j_b+m_b}\;\frac{(j_a-m_a+x)!\,(j+j_b+m_a-x)!}{(j+j_b-j_a-x)!\,(j+m-x)!\,x!\,(x+j_a-j_b-m)!}\,. \qquad \text{(3A-12)}
\end{aligned}$$

Dans le cas particulier où $m_a = j_a$ et $m_b = -j_b$, on a :

$$\langle j_a\, j_a \;\; j_b \; {-j_b} \mid j \;\, j_a - j_b\rangle^2 =$$
$$\frac{(2j{+}1)(j{+}j_a{-}j_b)!\,(j{+}j_b{-}j_a)!}{(j{+}j_a{+}j_b{+}1)!}\sum_x (-1)^x \frac{(j{+}j_b{+}j_a{-}x)!}{(j{+}j_b{-}j_a{-}x)!\,x!\,(j{+}j_a{-}j_b{-}x)!}$$
$$= \frac{(2j+1)(j+j_a-j_b)!}{(j+j_a+j_b+1)!}\;\sum_x (-1)^x\;\frac{(j+j_b+j_a-x)!\,(j+j_b-j_a)!}{(j+j_b-j_a-x)!\,x!\,(j+j_a-j_b-x)!}$$
$$= \frac{(2j+1)(j+j_a-j_b)!}{(j+j_a+j_b+1)!}\;\sum_x (-1)^x\;\binom{j+j_b-j_a}{x}\;\frac{(j+j_b+j_a-x)!}{(j+j_a-j_b-x)!}$$
$$= \frac{(2j+1)(2j_a)!\,(2j_b)!}{(j+j_a+j_b+1)!\,(j_a+j_b-j)!} \tag{3A-13}$$

la dernière ligne étant obtenue à l'aide de (AC3-9). On peut alors définir :

$$\langle j_a\, j_a \;\; j_b \; {-j_b} \mid j \;\, j_a - j_b\rangle \;=\; \sqrt{\frac{(2j+1)(2j_a)!\,(2j_b)!}{(j+j_a+j_b+1)!\,(j_a+j_b-j)!}}. \tag{3A-14}$$

En remplaçant (3A-14) dans (3A-12), on trouve :

$$\langle j_a\, m_a \;\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \delta_{m \;\, m_a+m_b}\sqrt{\frac{(j+j_a-j_b)!\,(j+j_b-j_a)!\,(j_a+j_b-j)!}{(j+j_a+j_b+1)!}}$$
$$\times\sqrt{\frac{(2j+1)\,(j+m)!\,(j-m)!}{(j_a+m_a)!\,(j_a-m_a)!\,(j_b+m_b)!\,(j_b-m_b)!}}$$
$$\times\sum_x (-1)^{x+j_b+m_b}\;\frac{(j_a-m_a+x)!\,(j+j_b+m_a-x)!}{(j+j_b-j_a-x)!\,(j+m-x)!\,x!\,(x+j_a-j_b-m)!}$$
$$= \delta_{m \;\, m_a+m_b}\;\Delta(j_a,j_b,j)\;\sqrt{\frac{(2j+1)\,(j+m)!\,(j-m)!}{(j_a+m_a)!\,(j_a-m_a)!\,(j_b+m_b)!\,(j_b-m_b)!}}$$
$$\times\sum_x (-1)^{x+j_b+m_b}\;\frac{(j_a-m_a+x)!\,(j+j_b+m_a-x)!}{(j+j_b-j_a-x)!\,(j+m-x)!\,x!\,(x+j_a-j_b-m)!}\,. \tag{3A-15}$$

Cette relation représente la forme explicite des C.G donnée par Wigner. Nous allons maintenant montrer l'équivalence avec la forme déduite par Racah. Si on utilise (AC3-10), on a :

$$\langle j_a\, m_a \;\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle =$$
$$\delta_{m \;\, m_a+m_b}\;\;\Delta(j_a,j_b,j)\;\;\sqrt{\frac{(2j+1)\,(j+m)!\,(j-m)!(j_a+m_a)!\,(j_b-m_b)!}{(j_a-m_a)!\,(j_b+m_b)!}}$$
$$\times\sum_{xu}\frac{(-1)^{x+j_b+m_b}\;(j_a-m_a+x)!}{x!\,(x{+}j_a{-}j_b{-}m)!\,u!\,(j_a{+}m_a{-}u)!\,(j_b{-}m_b{-}u)!\,(j{-}j_a{+}m_b{+}u{-}x)!}\,. \tag{3A-16}$$

Si on utilise (AC3-11), on obtient :

$$\langle j_a\, m_a \;\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \delta_{m \;\, m_a+m_b} \;\; (-1)^{j-j_a-j_b} \;\; \Delta(j_a, j_b, j) \;\; \sqrt{2j+1} \;\; S(j_a, m_a; j_b, m_b; j, m) \times \sum_u (-1)^u \;\; [\, u!\,(j_a+m_a-u)!\,(j_b-m_b-u)!\,(j-j_b-m_a+u)! \times (j-j_a+m_b+u)!\,(j_b+j_a-j-u)!\,]^{-1} \quad \text{(3A-17a)}$$

avec :

$$S(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j,\, m) = \sqrt{(j_a+m_a)!\,(j_a-m_a)!\,(j_b+m_b)!\,(j_b-m_b)!\,(j+m)!\,(j-m)!}\;. \quad \text{(3A-17b)}$$

Il est clair que S est inchangé lorsqu'on change les signes des composantes magnétiques :

$$S(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j,\, m) \; = \; S(j_a,\, -m_a;\, j_b,\, -m_b;\, j,\, -m). \quad \text{(3A-17c)}$$

Si on définit

$$X(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j) = \sum_u (-1)^u \, [\, u!\,(j_a+m_a-u)!\,(j_b-m_b-u)!\,(j-j_b-m_a+u)! \times (j-j_a+m_b+u)!\,(j_b+j_a-j-u)!\,]^{-1} \quad \text{(3A-18)}$$

on a :

$$\langle j_a\, m_a \;\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \delta_{m \;\, m_a+m_b} \;\; (-1)^{j-j_a-j_b} \;\; \Delta(j_a, j_b, j) \times \sqrt{2j+1} \;\; S(j_a, m_a; j_b, m_b; j, m) X(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j). \quad \text{(3A-19)}$$

Si on fait le changement de variable $t = j_a + j_b - j - u$ dans $X(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j)$, on obtient la relation de symétrie :

$$X(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j) \; = \; (-1)^{j_a+j_b-j} \; X(j_a,\, -m_a;\, j_b,\, -m_b;\, j) \quad \text{(3A-20a)}$$

avec explicitement :

$$X(j_a,\, -m_a;\, j_b,\, -m_b;\, j) = \sum_u (-1)^u \, [\, u!\,(j_a-m_a-u)!\,(j_b+m_b-u)!\,(j-j_b+m_a+u)! \times (j-j_a-m_b+u)!\,(j_b+j_a-j-u)!\,]^{-1} \quad \text{(3A-20b)}$$

ce qui donne :

$$\langle j_a\, m_a \;\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \delta_{m \;\, m_a+m_b} \, \Delta(j_a, j_b, j) \, \sqrt{2j+1} \;\; S(j_a, m_a; j_b, m_b; j, m) \times \sum_u (-1)^u \;\; [\, u!\,(j_a-m_a-u)!\,(j_b+m_b-u)!\,(j-j_b+m_a+u)! \times (j-j_a-m_b+u)!\,(j_b+j_a-j-u)!\,]^{-1}. \quad \text{(3A-21)}$$

On retrouve exactement la forme donnée par Racah (voir (3A-7a)).

A.3. Relations de symétrie et d'orthogonalité

Relations de symétrie

La première relation de symétrie est donnée par (3A-17c) et (3A-20a) :

$$\langle j_a\, m_a\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle \;=\; (-1)^{j_a+j_b-j}\,\langle j_a\, {-m_a}\; j_b\, {-m_b} \mid j\, {-m}\rangle. \tag{3A-22}$$

D'après leur définition, on a aussi

$$S(j_b,\, m_b;\, j_a,\, m_a;\, j,\, m) \;=\; S(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j,\, m) \tag{3A-17d}$$

et

$$X(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j) \;=\; X(j_b,\, -m_b;\, j_a,\, -m_a;\, j). \tag{3A-20b}$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} X(j_b,\, m_b;\, j_a,\, m_a;\, j) &= X(j_a,\, -m_a;\, j_b,\, -m_b;\, j) \\ &= (-1)^{j_a+j_b-j}\, X(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j). \end{aligned} \tag{3A-20c}$$

Les relations (3A-17d) et (3A-20c) entraînent alors :

$$\langle j_b\, m_b\; j_a\, m_a \mid j\, m\rangle \;=\; (-1)^{j_a+j_b-j}\,\langle j_a\, m_a\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle\cdot \tag{3A-23}$$

Si on pose $t = j_b + m_b - u$ dans X, on obtient :

$$X(j_a,\, m_a;\, j_b,\, m_b;\, j) \;=\; (-1)^{j_b+m_b}\, X(j,\, m;\, j_b,\, m_b;\, j_a) \tag{3A-20d}$$

ce qui conduit à :

$$\langle j_a\, m_a\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle \;=\; (-1)^{j_b+m_b}\sqrt{\frac{2j+1}{2j_a+1}}\,\langle j\; {-m}\; j_b\, m_b \mid j_a\; {-m_a}\rangle. \tag{3A-24}$$

Finalement, si on pose $t = j_a - m_a - u$ dans X, on obtient :

$$\langle j_a\, m_a\; j_b\, m_b \mid j\, m\rangle \;=\; (-1)^{j_a-m_a}\sqrt{\frac{2j+1}{2j_b+1}}\,\langle j_a\, m_a\; j\; {-m} \mid j_b\; {-m_b}\rangle. \tag{3A-25}$$

Relations d'orthogonalité

Rappelons les relations que nous avons obtenues dans le chapitre 3 :

$$\sum_{j\,m}\langle j_a\, m'_a\, j_b\, m'_b \mid j\, m\rangle\,\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle \;=\; \delta_{m'_a\, m_a}\,\delta_{m'_b\, m_b} \tag{3A-26a}$$

$$\sum_{m_a\, m_b}\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle\,\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j'\, m'\rangle \;=\; \delta_{j'\, j}\,\delta_{m'\, m}. \tag{3A-26b}$$

A.4. Valeurs particulières

(α) Un des moments angulaires est nul

$$\langle 0\,0\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = \delta_{j\, j_b}\, \delta_{m\, m_b} \tag{3A-27}$$

$$\langle j_a\, m_a\, 0\,0 \mid j\, m\rangle = \delta_{j\, j_a}\, \delta_{m\, m_a} \tag{3A-28}$$

$$\begin{aligned}\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid 0\,0\rangle &= (-1)^{j_a - m_a} \sqrt{\frac{1}{2j_b+1}}\, \delta_{j_b\, j_a}\, \delta_{m_b\, -m_a} \\ &= (-1)^{j_b + m_b} \sqrt{\frac{1}{2j_a+1}}\, \delta_{j_a\, j_b}\, \delta_{m_a\, -m_b}.\end{aligned} \tag{3A-29}$$

(β) $m_a = m_b = 0$

Si on pose $2j_s = j_a + j_b + j$, on obtient

$$\langle j_a\, 0\; j_b\, 0 \mid j\, 0\rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } j_a + j_b + j \text{ est impair} \\ (-1)^{j_s + j}\ \ \hat{\jmath}\ \ \Delta(j_a, j_b, j)\ \dfrac{j_s!}{(j_s - j_a)!\,(j_s - j_b)!\,(j_s - j)!} & \text{si } j_a + j_b + j \text{ est pair} \end{cases} \tag{3A-30}$$

avec $\hat{\jmath} = \sqrt{2j+1}$.

A.5. Coefficients 3-j

Wigner a introduit les coefficients *3-j* qui sont définis par :

$$\begin{pmatrix} j_a & j_b & j \\ m_a & m_b & m \end{pmatrix} = (-1)^{j_b + m - j_a}\ \frac{1}{\sqrt{2j+1}}\ \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, -m\rangle \tag{3A-31a}$$

ou encore

$$\begin{pmatrix} j_a & j_b & j \\ m_a & m_b & -m \end{pmatrix} = (-1)^{j_b - m - j_a}\ \frac{1}{\sqrt{2j+1}}\ \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle. \tag{3A-32b}$$

Inversement, on a :

$$\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, m\rangle = (-1)^{j_a + m - j_b}\ \sqrt{2j+1}\ \begin{pmatrix} j_a & j_b & j \\ m_a & m_b & -m \end{pmatrix} \tag{3A-33a}$$

et

$$\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j\, -m\rangle = (-1)^{j_a - m - j_b}\ \sqrt{2j+1}\ \begin{pmatrix} j_a & j_b & j \\ m_a & m_b & m \end{pmatrix}. \tag{3A-33b}$$

Les coefficients *3-j* possèdent les règles de symétrie :

$$\begin{pmatrix} j_a & j_b & j \\ m_a & m_b & m \end{pmatrix}$$

est

(i) invariant dans une permutation circulaire des trois colonnes ;
(ii) multiplié par $(-1)^{j_a + j_b + j}$ lorsqu'on permute deux colonnes ;
(iii) multiplié par $(-1)^{j_a + j_b + j}$ lorsqu'on change les signes de m_a, m_b, m.

A.6. Tables

Nous présentons les tables de C.G pour $j_b = 1/2,\ 1,\ 3/2$, et 2 dans les tableaux 1–4.

$\langle j_a\, m_a\, \frac{1}{2}\, m_b \mid j\, m\rangle$		
$j =$	$m_b = 1/2$	$m_b = -1/2$
$j_a + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_a+m+1/2}{2j_a+1}}$	$\sqrt{\frac{j_a-m+1/2}{2j_a+1}}$
$j_a - \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{j_a-m+1/2}{2j_a+1}}$	$\sqrt{\frac{j_a+m+1/2}{2j_a+1}}$

Table 1. Expression algébrique des C.G pour $j_b = 1/2$.
[Algebraic formula for the C.G coefficients for $j_b = 1/2$.]

$\langle j_a\, m_a\, 1\, m_b \mid j\, m\rangle$			
$j =$	$m_b = 1$	$m_b = 0$	$m_b = -1$
$j_a + 1$	$\sqrt{\frac{(j_a+m)(j_a+m+1)}{(2j_a+1)(2j_a+2)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a-m+1)(j_a+m+1)}{(2j_a+1)(j_a+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a-m)(j_a-m+1)}{(2j_a+1)(2j_a+2)}}$
j_a	$-\sqrt{\frac{(j_a+m)(j_a-m+1)}{2j_a(j_a+1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{j_a(j_a+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a-m)(j_a+m+1)}{2j_a(j_a+1)}}$
$j_a - 1$	$\sqrt{\frac{(j_a-m)(j_a-m+1)}{2j_a(2j_a+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(j_a-m)(j_a+m)}{j_a(2j_a+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a+m)(j_a+m+1)}{2j_a(2j_a+1)}}$

Table 2. Expression algébrique des C.G pour $j_b = 1$.
[Algebraic formula for the C.G coefficients for $j_b = 1$.]

$\langle j_a\, m_a\, \frac{3}{2}\, m_b \mid j\, m\rangle$		
$j =$	$m_b = 3/2$	$m_b = 1/2$
$j_a + \frac{3}{2}$	$\sqrt{\frac{(j_a+m-1/2)(j_a+m+1/2)(j_a+m+3/2)}{(2j_a+1)(2j_a+2)(2j_a+3)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_a+m+1/2)(j_a+m+3/2)(j_a-m+3/2)}{(2j_a+1)(2j_a+2)(2j_a+3)}}$
$j_a + \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{3(j_a+m-1/2)(j_a+m+1/2)(j_a-m+3/2)}{2j_a(2j_a+1)(2j_a+3)}}$	$-(j_a - 3m + \frac{3}{2})\sqrt{\frac{j_a+m+1/2}{2j_a(2j_a+1)(2j_a+3)}}$
$j_a - \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{3(j_a+m-1/2)(j_a-m+1/2)(j_a-m+3/2)}{(2j_a-1)(2j_a+1)(2j_a+2)}}$	$-(j_a + 3m - \frac{1}{2})\sqrt{\frac{j_a-m+1/2}{(2j_a-1)(2j_a+1)(2j_a+2)}}$
$j_a - \frac{3}{2}$	$-\sqrt{\frac{(j_a-m-1/2)(j_a-m+1/2)(j_a-m+3/2)}{2j_a(2j_a-1)(2j_a+1)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_a+m-1/2)(j_a-m-1/2)(j_a-m+1/2)}{2j_a(2j_a-1)(2j_a+1)}}$
$\langle j_a\, m_a\, \frac{3}{2}\, m_b \mid j\, m\rangle$		
$j =$	$m_b = -1/2$	$m_b = -3/2$
$j_a + \frac{3}{2}$	$\sqrt{\frac{3(j_a-m+1/2)(j_a+m+3/2)(j_a-m+3/2)}{(2j_a+1)(2j_a+2)(2j_a+3)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a-m-1/2)(j_a-m+1/2)(j_a-m+3/2)}{(2j_a+1)(2j_a+2)(2j_a+3)}}$
$j_a + \frac{1}{2}$	$(j_a + 3m + \frac{3}{2})\sqrt{\frac{(j_a-m+1/2)}{2j_a(2j_a+1)(2j_a+3)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_a-m-1/2)(j_a-m+1/2)(j_a+m+3/2)}{2j_a(2j_a+1)(2j_a+3)}}$
$j_a - \frac{1}{2}$	$-(j_a - 3m - \frac{1}{2})\sqrt{\frac{(j_a+m+1/2)}{(2j_a-1)(2j_a+1)(2j_a+2)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_a-m-1/2)(j_a+m+1/2)(j_a+m+3/2)}{(2j_a-1)(2j_a+1)(2j_a+2)}}$
$j_a - \frac{3}{2}$	$-\sqrt{\frac{3(j_a-m-1/2)(j_a+m-1/2)(j_a+m+1/2)}{2j_a(2j_a-1)(2j_a+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a+m-1/2)(j_a+m+1/2)(j_a+m+3/2)}{2j_a(2j_a-1)(2j_a+1)}}$

Table 3. Expression algébrique des C.G pour $j_b = 3/2$.
[Algebraic formula for the C.G coefficients for $j_b = 3/2$.]

$\langle j_a\, m_a\, 2\, m_b \mid j\, m\rangle$		
$j =$	$m_b = 2$	$m_b = 1$
j_a+2	$\sqrt{\frac{(j_a+m-1)(j_a+m)(j_a+m+1)(j_a+m+2)}{(2j_a+1)(2j_a+2)(2j_a+3)(2j_a+4)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a-m+2)(j_a+m+2)(j_a+m+1)(j_a+m)}{(2j_a+1)(j_a+1)(2j_a+3)(j_a+2)}}$
j_a+1	$-\sqrt{\frac{(j_a+m-1)(j_a+m)(j_a+m+1)(j_a-m+2)}{2j_a(j_a+1)(j_a+2)(2j_a+1)}}$	$-(j_a-2m+2)\sqrt{\frac{(j_a+m+1)(j_a+m)}{2j_a(2j_a+1)(j_a+1)(j_a+2)}}$
j_a	$\sqrt{\frac{3(j_a+m-1)(j_a+m)(j_a-m+1)(j_a-m+2)}{(2j_a-1)2j_a(j_a+1)(2j_a+3)}}$	$(1-2m)\sqrt{\frac{3(j_a-m+1)(j_a+m)}{(2j_a-1)j_a(2j_a+2)(2j_a+3)}}$
j_a-1	$-\sqrt{\frac{(j_a+m-1)(j_a-m)(j_a-m+1)(j_a-m+2)}{2(j_a-1)j_a(j_a+1)(2j_a+1)}}$	$(j_a+2m-1)\sqrt{\frac{(j_a-m+1)(j_a-m)}{(j_a-1)j_a(2j_a+1)(2j_a+2)}}$
j_a-2	$\sqrt{\frac{(j_a-m-1)(j_a-m)(j_a-m+1)(j_a-m+2)}{(2j_a-2)(2j_a-1)2j_a(2j_a+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(j_a-m+1)(j_a-m)(j_a-m-1)(j_a+m-1)}{(j_a-1)(2j_a-1)j_a(2j_a+1)}}$

$\langle j_a\, m_a\, 2\, m_b \mid j\, m\rangle$	
$j =$	$m_b = 0$
j_a+2	$\sqrt{\frac{3(j_a-m+2)(j_a-m+1)(j_a+m+2)(j_a+m+1)}{(2j_a+1)(2j_a+2)(2j_a+3)(j_a+2)}}$
j_a+1	$m\sqrt{\frac{3(j_a-m+1)(j_a+m+1)}{j_a(2j_a+1)(j_a+1)(j_a+2)}}$
j_a	$\frac{3m^2-j_a(j_a+1)}{\sqrt{(2j_a-1)j_a(j_a+1)(2j_a+3)}}$
j_a-1	$-m\sqrt{\frac{3(j_a-m)(j_a+m)}{(j_a-1)j_a(2j_a+1)(j_a+1)}}$
j_a-2	$\sqrt{\frac{3(j_a-m)(j_a-m-1)(j_a+m)(j_a+m-1)}{(2j_a-2)(2j_a-1)j_a(2j_a+1)}}$

$\langle j_a\, m_a\, 2\, m_b \mid j\, m\rangle$		
$j =$	$m_b = -1$	$m_b = -2$
j_a+2	$\sqrt{\frac{(j_a-m+2)(j_a+m+2)(j_a-m+1)(j_a-m)}{(2j_a+1)(j_a+1)(2j_a+3)(j_a+2)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a-m-1)(j_a-m)(j_a-m+1)(j_a-m+2)}{(2j_a+1)(2j_a+2)(2j_a+3)(2j_a+4)}}$
j_a+1	$(j_a+2m+2)\sqrt{\frac{(j_a-m+1)(j_a-m)}{j_a(2j_a+1)(2j_a+2)(j_a+2)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a-m-1)(j_a-m)(j_a-m+1)(j_a+m+2)}{j_a(2j_a+1)(j_a+1)(2j_a+4)}}$
j_a	$(1+2m)\sqrt{\frac{3(j_a+m+1)(j_a-m)}{(2j_a-1)j_a(2j_a+2)(2j_a+3)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_a-m-1)(j_a-m)(j_a+m+1)(j_a+m+2)}{(2j_a-1)j_a(2j_a+2)(2j_a+3)}}$
j_a-1	$-(j_a-2m-1)\sqrt{\frac{(j_a+m+1)(j_a+m)}{(j_a-1)j_a(2j_a+1)(2j_a+2)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a-m-1)(j_a+m)(j_a+m+1)(j_a+m+2)}{(j_a-1)j_a(2j_a+1)(2j_a+2)}}$
j_a-2	$-\sqrt{\frac{(j_a-m-1)(j_a+m)(j_a+m+1)(j_a+m-1)}{(j_a-1)(2j_a-1)j_a(2j_a+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_a+m-1)(j_a+m)(j_a+m+1)(j_a+m+2)}{(2j_a-2)(2j_a-1)2j_a(2j_a+1)}}$

Table 4. Expression algébrique des C.G pour $j_b = 2$.
[Algebraic formula for the C.G coefficients for $j_b = 2$.]

Coefficients du binôme

Dans cette annexe, nous allons donner quelques formules utiles dans le développement de l'expression des coefficients de Clebsch-Gordan.

(α) Relations générales

Lorsque p et q sont positifs, on a :

$$\binom{p}{q} = \frac{p!}{q!\,(p-q)!}. \qquad \text{(AC3-1)}$$

Si p est négatif, la relation précédente devient :

$$\binom{p}{q} = (-1)^q \frac{(q-p-1)!}{q!\,(-p-1)!} = (-1)^q \binom{q-p-1}{q}. \qquad \text{(AC3-2)}$$

Cette relation peut se démontrer facilement en utilisant certaines propriétés des fonctions Γ. Par définition, on a :

$$\binom{p}{q} = \frac{p!}{q!\,(p-q)!} = \frac{(-p')!}{q!\,(-p'-q)!}$$

où nous avons posé $p' = -p$. On peut maintenant tirer profit de la relation :

$$(-z)! = \frac{\pi}{(z-1)!\ \sin\pi z}$$

que l'on applique à $(-p')!$ et à $(-p'-q)!$. Si on suppose que $-p'$ et q sont des entiers, la relation $\cos\pi q = (-1)^q$ achève la démonstration.

La seconde relation dont nous aurons besoin s'obtient en développant $(1+x)^{p+q}$

$$\begin{aligned}
(1+x)^{p+q} &= \textstyle\sum_v \binom{p+q}{v}\, x^{p+q-v} \\
&= (1+x)^p\,(1+x)^q \\
&= \textstyle\sum_t \binom{p}{t}\, x^{p-t}\ \sum_u \binom{q}{u}\, x^{q-u} \\
&= \textstyle\sum_{t\,u} \binom{p}{t} \binom{q}{u}\ x^{p+q-t-u}.
\end{aligned}$$

En posant $v = t+u$, on obtient :

$$\sum_t \binom{p}{t}\binom{q}{v-t} = \binom{p+q}{v} \qquad \text{(AC3-3a)}$$

cette relation s'écrit explicitement :

$$\sum_t \frac{p!\,q!}{t!\,(p-t)!\,(v-t)!\,(q-v+t)!} = \frac{(p+q)!}{v!\,(p+q-v)!}. \qquad \text{(AC3-3b)}$$

La relation (AC3-3b) peut encore s'écrire

$$\sum_t \frac{p!\,v!}{t!\,(p-t)!\,(v-t)!\,(q-v+t)!} = \frac{(p+q)!}{q!\,(p+q-v)!} \tag{AC3-3c}$$

ou encore :

$$\sum_t \frac{1}{t!\,(p-t)!\,(v-t)!\,(q-v+t)!} = \frac{(p+q)!}{p!\,q!\,v!\,(p+q-v)!}\cdot \tag{AC3-4}$$

Lorsque p est négatif et $|\,p\,| < q$, en utilisant (AC3-2), l'égalité (AC3-3) devient :

$$\sum_t (-1)^t \frac{(t-p-1)!\,q!}{t!\,(-p-1)!\,(v-t)!\,(q-v+t)!} = \frac{(p+q)!}{v!\,(p+q-v)!} \tag{AC3-5a}$$

ce qui est équivalent à :

$$\sum_t (-1)^t \frac{(t-p-1)!}{t!\,(v-t)!\,(q-v+t)!} = \frac{(p+q)!\,(-p-1)!}{q!\,v!\,(p+q-v)!} \tag{AC3-5b}$$

en posant $\rho = -p-1$ et $\lambda = q-v$, on a

$$\sum_t (-1)^t \frac{(t+\rho)!}{t!\,(v-t)!\,(\lambda+t)!} = \frac{(\lambda+v-\rho-1)!\,\rho!}{(\lambda+v)!\,v!\,(\lambda-\rho-1)!}\cdot \tag{AC3-5c}$$

Lorsque p est négatif et $|\,p\,| > q$, en utilisant (AC3-2) dans les membres de gauche et de droite de l'égalité (AC3-3) on obtient :

$$\sum_t (-1)^t \frac{(t-p-1)!\,q!}{t!\,(-p-1)!\,(v-t)!\,(q-v+t)!} = (-1)^v \frac{(v-p-q-1)!}{v!\,(-p-q-1)!} \tag{AC3-6a}$$

ce qui est équivalent à :

$$\sum_t (-1)^t \frac{(t-p-1)!}{t!\,(v-t)!\,(q-v+t)!} = (-1)^v \frac{(v-p-q-1)!\,(-p-1)!}{q!\,v!\,(-p-q-1)!} \tag{AC3-6b}$$

en faisant les mêmes changements de variable que précédemment $\rho = -p-1$ et $\lambda = q-v$, on a

$$\sum_t (-1)^t \frac{(t+\rho)!}{t!\,(v-t)!\,(\lambda+t)!} = (-1)^v \frac{(\rho-\lambda)!\,\rho!}{(\lambda+v)!\,v!\,(\rho-\lambda-1)!}\cdot \tag{AC3-6c}$$

(β) Application au calcul des C.G

D'après (AC3-2) nous avons :

$$\begin{aligned}\binom{-2j_b-1}{j+j_a-j_b-x} &= (-1)^{j+j_a-j_b-x}\binom{j+j_a+j_b-x}{j+j_a-j_b-x}\\ &= (-1)^{j+j_a-j_b-x}\frac{(j+j_a+j_b-x)!}{(2j_b)!\,(j+j_a-j_b-x)!}\end{aligned}$$

d'où :

$$\frac{(j+j_a+j_b-x)!}{(j+j_a-j_b-x)!} = (-1)^{j+j_a-j_b-x}\,(2j_b)!\binom{-2j_b-1}{j+j_a-j_b-x}. \tag{AC3-7}$$

On en déduit alors :

$$\begin{aligned}\sum_x (-1)^x \binom{j+j_b-j_a}{x}\frac{(j+j_a+j_b-x)!}{(j+j_a-j_b-x)!} &=\\ (-1)^{j+j_a-j_b}\,(2j_b)!&\binom{j+j_b-j_a}{x}\binom{-2j_b-1}{j+j_a-j_b-x}\\ &= (-1)^{j+j_a-j_b}\,(2j_b)!\binom{j-j_a-j_b-1}{j+j_a-j_b}\end{aligned} \tag{AC3-8}$$

la dernière ligne étant obtenue en appliquant (AC3-3a). Mais d'après (AC3-2) on a :

$$\binom{j-j_a-j_b-1}{j+j_a-j_b} = (-1)^{j+j_a-j_b}\binom{2j_a}{j+j_a-j_b}$$

ce qui donne finalement :

$$\begin{aligned}\sum_x (-1)^x \binom{j+j_b-j_a}{x}\frac{(j+j_a+j_b-x)!}{(j+j_a-j_b-x)!} &= (2j_b)!\binom{2j_a}{j+j_a-j_b}\\ &= \frac{(2j_a)!\,(2j_b)!}{(j+j_a-j_b)!\,(j_a+j_b-j)!}.\end{aligned} \tag{AC3-9}$$

Si maintenant on pose $p = j_a + m_a$, $q = j + j_b - j_a - x$ et $v = j_b - m_b$, la relation (AC3-3c) devient :

$$\frac{(j+j_b+m_a-x)!}{(j+j_b-j_a-x)!\,(j+m-x)!} = \sum_t \frac{(j_a+m_a)!\,(j_b-m_b)!}{t!\,(j_a+m_a-t)!\,(j_b-m_b-t)!\,(j-j_a+m_b-x+t)!}. \tag{AC3-10}$$

Si on pose $\rho = j_a - m_a$, $\lambda = j_a - j_b - m$ et $v = j - j_a + m_b + u$ dans (AC3-6c), on obtient :

$$\sum_x (-1)^x \frac{(j_a-m_a+x)!}{x!\,(j-j_a+m_b+u-x)!\,(j_a-j_b-m+x)!} = (-1)^{j-j_a+m_b+u}\frac{(j_a-m_a)!\,(j_b+m_b)!}{(j-j_b-m_a+u)!\,(j-j_a+m_b+u)!\,(j_b+j_a-j-u)!}. \tag{AC3-11}$$

B. Coefficients de recouplage

Nous avons vu dans le chapitre 3 que lorsqu'on couple trois ou quatre moments cinétiques, ce couplage peut se faire de plusieurs manières et on a été amené à introduire une matrice unitaire pour passer d'un couplage à l'autre. En plus de ces éléments de matrice, il existe dans la littérature d'autres coefficients qui leur sont proportionnels dont nous donnerons la définition. Nous allons dans ce complément donner quelques propriétés de l'ensemble de ces coefficients.

Nous ne donnerons pas toutes les règles de somme ou d'orthogonalité possibles mais nous allons plutôt illustrer sur des exemples comment on peut procéder pour les déterminer.

B.1. Couplage de 3 moments angulaires

Transformation unitaire

(A) Expression en fonction des coefficients de Clebsch-Gordan

D'après (3-46), on a :

$$\begin{aligned}
&|\ \alpha\ j_a\,(j_b\,j_c)\,j_{bc}\,;j\,m\,\rangle = \\
&\qquad\sum_{j_{ab}\,m_a\,m_b\,m_{ab}\,m_c} \langle\,(j_a\,j_b)\,j_{ab}\,j_c\,;j\ |\ j_a\,(j_b\,j_c)\,j_{bc}\,;j\,\rangle\,\langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ |\ j_{ab}\,m_{ab}\rangle \\
&\qquad\qquad\times\langle j_{ab}\,m_{ab}\,j_c\,m_c\ |\ j\,m\rangle\ |\ \alpha_a\ j_a\,m_a\,\rangle\ |\ \alpha_b\ j_b\,m_b\,\rangle\ |\ \alpha_c\ j_c\,m_c\,\rangle \\
&\qquad\qquad= \sum_{m_a\,m_b\,m_{bc}\,m_c} \langle j_a\,m_a\,j_{bc}\,m_{bc}\ |\ j\,m\rangle\,\langle j_b\,m_b\,j_c\,m_c\ |\ j_{bc}\,m_{bc}\rangle \\
&\qquad\qquad\qquad\times\ |\ \alpha_a\ j_a\,m_a\,\rangle\ |\ \alpha_b\ j_b\,m_b\,\rangle\ |\ \alpha_c\ j_c\,m_c\,\rangle. \qquad (3B\text{-}1)
\end{aligned}$$

En multipliant cette égalité par $\langle\, j_a m'_a \alpha_a\ \ |\ \langle\, j_b m'_b \alpha_b\ \ |\ \langle\, j_c m'_c \alpha_c\ \ |$, on obtient :

$$\begin{aligned}
&\sum_{j_{ab}\,m_{ab}} \langle j_a\,m_a\ j_b\,m_b\ |\ j_{ab}\,m_{ab}\rangle\,\langle j_{ab}\,m_{ab}\ j_c\,m_c\ |\ j\,m\rangle \\
&\qquad\qquad\times\langle\,(j_a\,j_b)\,j_{ab}\,j_c\,;j\ |\ j_a\,(j_b\,j_c)\,j_{bc}\,;j\,\rangle = \\
&\qquad\qquad\sum_{m_{bc}} \langle j_a\,m_a\ j_{bc}\,m_{bc}\ |\ j\,m\rangle\,\langle j_b\,m_b\ j_c\,m_c\ |\ j_{bc}\,m_{bc}\rangle. \qquad (3B\text{-}2)
\end{aligned}$$

Si on prend comme cas particulier $m_a = m_b = m_c = 0$, on a :

$$\begin{aligned}
&\sum_{j_{ab}} \langle j_a\,0\ j_b\,0\ |\ j_{ab}\,0\rangle\langle j_{ab}\,0\ j_c\,0\ |\ j\,0\rangle\langle\,(j_a\,j_b)\,j_{ab}\,j_c\,;j\ |\ j_a\,(j_b\,j_c)\,j_{bc}\,;j\rangle = \\
&\qquad\qquad\langle j_a\,0\ j_{bc}\,0\ |\ j\,0\rangle\,\langle j_b\,0\ j_c\,0\ |\ j_{bc}\,0\rangle. \qquad (3B\text{-}3)
\end{aligned}$$

En multipliant par $\sum_{m_a\,m_b} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ \ |\ \ j'_{ab}\,m'_{ab}\rangle$ les deux membres de l'égalité (3B-2) et en utilisant (3A-26b), on obtient :

$$\langle j_{ab}\, m_{ab}\ j_c\, m_c \mid j\, m\rangle\, \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\,\rangle = \sum_{m_a\, m_b\, m_{bc}} \langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle\, \langle j_b\, m_b\ j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \times \langle j_a\, m_a\ j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle. \quad \text{(3B-4)}$$

Multiplions les deux membres de cette égalité par $\langle j_{ab}\, m_{ab}\ j_c\, m_c \mid j\, m\rangle$ et sommons sur m_{ab} et m_c. On a alors :

$$\langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\,\rangle = \sum_{m_a\, m_b\, m_c} \sum_{m_{ab}\, m_{bc}} \langle j_{ab}\, m_{ab}\ j_c\, m_c \mid j\, m\rangle\, \langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \times \langle j_b\, m_b\ j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \langle j_a\, m_a\ j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \quad \text{(3B-5a)}$$

ou encore

$$\langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\,\rangle = \frac{1}{2j+1} \sum_{m_a\, m_b\, m_c} \sum_{m_{ab}\, m_{bc}\, m} \langle j_{ab}\, m_{ab}\ j_c\, m_c \mid j\, m\rangle\, \langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \langle j_b\, m_b\ j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \langle j_a\, m_a\ j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle. \quad \text{(3B-5b)}$$

D'une manière analogue, nous avons :

$$\mid \alpha\ (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\, m\,\rangle = \sum_{j_{bc}} \langle\, j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j \mid (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\,\rangle \mid \alpha\ j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\, m\,\rangle \quad \text{(3B-6)}$$

avec :

$$\sum_{j_{bc}\, m_{bc}} \langle j_b\, m_b\, j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle\, \langle j_a\, m_a\, j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \times \langle\, j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j \mid (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\rangle = \sum_{m_{ab}} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle\, \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_c\, m_c \mid j\, m\rangle \quad \text{(3B-7)}$$

$$\sum_{j_{bc}} \langle j_b\, 0\ j_c\, 0 \mid j_{bc}\, 0\rangle \langle j_a\, 0\ j_{bc}\, 0 \mid j\, 0\rangle \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\,\rangle = \langle j_{ab}\, 0\ j_c\, 0 \mid j\, 0\rangle\, \langle j_a\, 0\ j_b\, 0 \mid j_{ab}\, 0\rangle \quad \text{(3B-8)}$$

et :

$$\langle j_a\, m_a\, j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \, \langle j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j \mid (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\rangle = \sum_{m_b\, m_c\, m_{ab}} \langle j_b\, m_b\, j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \, \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_c\, m_c \mid j\, m\rangle . \tag{3B-9}$$

(B) Règles de somme

Nous avons vu plus particulièrement par les relations (3-43) et (3-45) que les coefficients qui déterminent la matrice unitaire sont indépendants de m. On peut alors écrire pour toute valeur de m :

$$\langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\ m \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\ m\, \rangle = \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\rangle . \tag{3B-10}$$

On peut d'autre part introduire la relation de fermeture :

$$\sum_{j_{ac}\, j'\, m'} \mid j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j'\, m'\, \rangle \, \langle\, j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j'\, m' \mid = 1 \tag{3B-11}$$

ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} &\langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\rangle = \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\ m \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\ m\, \rangle \\ &= \sum_{j_{ac}\, j'\, m'} \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\ m \mid j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j'\, m'\, \rangle \\ &\quad \times \langle\, j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j'\, m' \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\ m\, \rangle \\ &= \sum_{j_{ac}} \langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\ m \mid j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j\, m\, \rangle \\ &\quad \times \langle\, j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j\, m \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\ m\, \rangle \end{aligned} \tag{3B-12}$$

mais on peut utiliser les relations de symétrie (3A-23) :

$$\begin{aligned} &\langle\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\ m \mid j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j\, m\, \rangle = \\ &\qquad (-1)^{j_a+j_b-j_{ab}} \, \langle\, (j_b\, j_a)\, j_{ab}\, j_c\, ; j\ m \mid j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j\, m\, \rangle \\ &\qquad = (-1)^{j_a+j_b-j_{ab}} \, \langle\, (j_b\, j_a)\, j_{ab}\, j_c\, ; j \mid j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j\, \rangle \end{aligned} \tag{3B-13}$$

et :

$$\begin{aligned} &\langle\, j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j\, m \mid j_a\, (j_b\, j_c)\, j_{bc}\, ; j\ m\, \rangle = \\ &\qquad (-1)^{j_b+j_c-j_{bc}} \, \langle\, j_b\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j\, m \mid j_a\, (j_c\, j_b)\, j_{bc}\, ; j\ m\, \rangle \\ &\quad = (-1)^{j_b+j_{ac}-j} \, (-1)^{j_b+j_c-j_{bc}} \, \langle\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, j_b\, ; j\, m \mid j_a\, (j_c\, j_b)\, j_{bc}\, ; j\ m\, \rangle \\ &\quad = (-1)^{j_b+j_{ac}-j} \, (-1)^{j_b+j_c-j_{bc}} \, \langle\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, j_b\, ; j \mid j_a\, (j_c\, j_b)\, j_{bc}\, ; j\, \rangle \end{aligned} \tag{3B-14}$$

d'où :

$$\begin{aligned}\langle\, (j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j \;\mid\; j_a\,(j_b\, j_c)\; j_{bc}\,;j\,\rangle &= (-1)^{j_a+j_b-j_{ab}}\;(-1)^{j_b+j_c-j_{bc}}\\ &\times \sum_{j_{ac}} (-1)^{j_b+j_{ac}-j}\;\langle\, (j_b\, j_a)\; j_{ab}\, j_c\,;j \;\mid j_b\,(j_a\, j_c)\, j_{ac}\,;j\,\rangle\\ &\times \langle\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, j_b\,;j \;\mid j_a\,(j_c\, j_b)\; j_{bc}\,;j\,\rangle. \end{aligned} \tag{3B-15}$$

(C) Relation d'orthogonalité

Si on injecte la relation de fermeture

$$\sum_{j_{ab}\, j'\, m'} \mid\, (j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j'\, m'\,\rangle\,\langle\, (j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j'\, m'\;\mid = 1 \tag{3B-16}$$

on obtient :

$$\begin{aligned}\delta_{j_{bc}\;j'_{bc}} &= \langle\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j_{bc}\,;j\, m\;\mid\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j'_{bc}\,;j\, m\,\rangle\\ &= \sum_{j_{ab}} \langle\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j_{bc}\,;j\, m\;\mid\,(j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j\, m\,\rangle\\ &\quad\times \langle\, (j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j\, m\;\mid\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j'_{bc}\,;j\, m\,\rangle\\ &= \sum_{j_{ab}} \langle\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j_{bc}\,;j\;\mid\,(j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j\,\rangle\\ &\quad\times \langle\, (j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j\;\mid\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j'_{bc}\,;j\,\rangle \end{aligned} \tag{3B-17}$$

c'est-à-dire finalement, on a la relation d'orthogonalité :

$$\sum_{j_{ab}} \langle\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j_{bc}\,;j\;\mid\,(j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j\,\rangle\,\langle\, (j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j\;\mid\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j'_{bc}\,;j\,\rangle \;=\; \delta_{j_{bc}\;j'_{bc}}. \tag{3B-18}$$

(D) Valeurs particulières

$$\langle\, 0\,(j_b\, j_c)\, j_{bc}\,;j\;\mid\,(0\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;j\,\rangle = \delta_{j_{bc}\, j}\;\delta_{j_b\, j_{ab}} \tag{3B-19}$$

$$\langle\, j_a\,(0\, j_c)\, j_{bc}\,;j\;\mid\,(j_a\, 0)\; j_{ab}\, j_c\,;j\,\rangle = \delta_{j_{bc}\, j_c}\;\delta_{j_{ab}\, j_a} \tag{3B-20}$$

$$\langle\, j_a\,(j_b\, 0)\, j_{bc}\,;j\;\mid\,(j_a\, j_b)\; j_{ab}\, 0\,;j\,\rangle = \delta_{j_{bc}\, j_b}\;\delta_{j_{ab}\, j} \tag{3B-21}$$

$$\langle\, j_a\,(j_b\, j_c)\, j_{bc}\,;0\;\mid\,(j_a\, j_b)\; j_{ab}\, j_c\,;0\,\rangle = \delta_{j_{ab}\, j_c}\;\delta_{j_{bc}\, j_a}. \tag{3B-22}$$

Coefficients de Racah

(A) Définition et forme explicite

Les coefficients de Racah sont définis par :

$$\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\; j_c\;;j\;\mid j_a\;(j_b j_c)\, j_{bc}\;;j\,\rangle = \sqrt{(2j_{ab}+1)\,(2j_{bc}+1)}\;\; W(j_a\, j_b\, j\, j_c\;;j_{ab}\, j_{bc}). \tag{3B-23}$$

Racah a donné une forme compacte pour le calcul de ces coefficients :

$$\begin{aligned} W(abcd;ef) = {} & \Delta(a,b,e)\ \Delta(a,c,f)\ \Delta(b,d,f)\ \Delta(c,d,e) \\ & \times \sum_z (-1)^z\ (a+b+c+d+1-z)! \\ & \times \Big[z!\ (e+f-a-d+z)!\ (e+f-b-c+z)!\ (a+b-e-z)! \\ & \times (c+d-e-z)!\ (a+c-f-z)!\ (b+d-f-z)! \Big]^{-1} \end{aligned} \tag{3B-24}$$

où $\Delta(x,y,z)$ est défini par la relation (3A-7b). Si on convient de schématiser les inégalités triangulaires qui doivent être vérifiées dans le coefficient de Racah par le symbole $\circ$, on aura :

$$W(\circ\circ\cdot\cdot;\circ\cdot)\,; \quad W(\circ\cdot\circ\cdot;\cdot\circ)\,; \quad W(\cdot\circ\cdot\circ;\cdot\circ)\,; \quad W(\cdot\cdot\circ\circ;\circ\cdot).$$

(B) Expression en fonction des coefficients de Clebsch-Gordan

Il suffit d'utiliser la définition des coefficients de Racah pour obtenir :

$$\begin{aligned} & \sum_{j_{ab}\, m_{ab}} \langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle\ \langle j_{ab}\, m_{ab}\ j_c\, m_c \mid j\, m\rangle \\ & \qquad \times \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\ \ W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \\ & \qquad\qquad \sum_{m_{bc}} \langle j_a\, m_a\ j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle\ \langle j_b\, m_b\ j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle. \end{aligned} \tag{3B-25}$$

Si on prend comme cas particulier $m_a = m_b = m_c = 0$, on a :

$$\begin{aligned} & \sum_{j_{ab}} \langle j_a\, 0\ j_b\, 0 \mid j_{ab}\, 0\rangle\ \langle j_{ab}\, 0\ j_c\, 0 \mid j\, 0\rangle \\ & \qquad \times \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\ \ W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \\ & \qquad\qquad \langle j_a\, 0\ j_{bc}\, 0 \mid j\, 0\rangle\ \langle j_b\, 0\ j_c\, 0 \mid j_{bc}\, 0\rangle. \end{aligned} \tag{3B-26}$$

Les autres relations s'écrivent :

$$\begin{aligned} & \langle j_{ab}\, m_{ab}\ j_c\, m_c \mid j\, m\rangle\ \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\ \ W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \\ & \quad \sum_{m_a\, m_b\, m_{bc}} \langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle\ \langle j_b\, m_b\ j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \langle j_a\, m_a\ j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \end{aligned} \tag{3B-27}$$

$$\begin{aligned} & \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\ \ W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \\ & \qquad \sum_{m_a\, m_b\, m_c}\ \sum_{m_{ab}\, m_{bc}} \langle j_{ab}\, m_{ab}\ j_c\, m_c \mid j\, m\rangle\ \langle j_a\, m_a\ j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \\ & \qquad\qquad \times \langle j_b\, m_b\ j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \langle j_a\, m_a\ j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \end{aligned} \tag{3B-28a}$$

ou encore, si on somme sur tous les indices magnétiques :

$$\sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\;\; W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \\ \frac{1}{2j+1} \sum_{m_a\, m_b\, m_c} \; \sum_{m_{ab}\, m_{bc}\, m} \langle j_{ab}\, m_{ab}\; j_c\, m_c \mid j\, m\rangle \,\langle j_a\, m_a\; j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \\ \times \langle j_b\, m_b\; j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \langle j_a\, m_a\; j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle. \quad \text{(3B-28b)}$$

D'une manière analogue, nous avons :

$$\sum_{j_{bc}\, m_{bc}} \langle j_b\, m_b\, j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \,\langle j_a\, m_a\, j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \\ \times \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\;\; W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \\ \sum_{m_{ab}} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \,\langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_c\, m_c \mid j\, m\rangle \quad \text{(3B-29)}$$

$$\sum_{j_{bc}} \langle j_b\, 0\; j_c\, 0 \mid j_{bc}\, 0\rangle \,\langle j_a\, 0\; j_{bc}\, 0 \mid j\, 0\rangle \\ \times \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\;\; W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \\ \langle j_{ab}\, 0\; j_c\, 0 \mid j\, 0\rangle \,\langle j_a\, 0\; j_b\, 0 \mid j_{ab}\, 0\rangle \quad \text{(3B-30)}$$

et :

$$\langle j_a\, m_a\, j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \,\sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\;\; W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \\ \sum_{m_b\, m_c\, m_{ab}} \langle j_b\, m_b\, j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \,\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_c\, m_c \mid j\, m\rangle. \\ \text{(3B-31)}$$

(C) Relations de symétrie

Elles se déduisent de la relation (3B-28b) en utilisant les propriétés des C.G. Nous allons en démontrer trois, les autres se calculant par la même méthode. Posons $J_A = j_a$, $J = j_b$, $J_{BC} = j_{ab}$, $J_C = j_c$, $J_{AB} = j_{bc}$, $J_B = j$ avec les projections sur l'axe Oz correspondantes. On a alors :

$$\hat{\jmath}_{ab}\, \hat{\jmath}_{bc}\;\, W(j_a\, j_b\, j\, j_c\,; j_{ab}\, j_{bc}) = \hat{J}_{BC}\, \hat{J}_{AB}\;\, W(J_A\, J\, J_B\, J_C\,; J_{BC}\, J_{AB}) \\ = \frac{1}{2J_B+1} \sum \langle J_{BC}\, M_{BC}\;\, J_C\, M_C \mid J_B\, M_B\rangle \,\langle J_A\, M_A\;\, J\, M \mid J_{BC}\, M_{BC}\rangle \\ \times \langle J\, M\;\, J_C\, M_C \mid J_{AB}\, M_{AB}\rangle \langle J_A\, M_A\;\, J_{AB}\, M_{AB} \mid J_B\, M_B\rangle.$$

Si on utilise les relations (3A-24) et (3A-25), le membre de droite s'écrit :

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2J+1}\sum \langle J_{AB}\,{-M_{AB}}\ J_C\,M_C \mid J\,{-M}\rangle\,\langle J_A\,M_A\ J_B\,{-M_B} \mid J_{AB}\,M_{-AB}\rangle \\
&\times \langle J_B\,{-M_B}\ J_C\,M_C \mid J_{BC}\,{-M_{BC}}\rangle\langle J_A\,M_A\ J_{BC}\,{-M_{BC}} \mid J\,{-M}\rangle = \\
&\sqrt{(2J_{AB}+1)(2J_{BC}+1)}\ \ W(J_A\,J_B\,J\,J_C\,;J_{AB}\,J_{BC}) \\
&= \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\ \ W(j_a\,j\,j_b\,j_c\,;j_{bc}\,j_{ab})
\end{aligned}$$

c'est-à-dire que l'on peut permuter les deux termes du milieu à gauche du point virgule et les deux termes de droite sans changer la valeur du coefficient de Racah.

Si on pose maintenant $J_B = j_a$, $J_A = j_b$, $J_C = j$, $J = j_c$, $J_{AB} = j_{ab}$ et $J_{BC} = j_{bc}$, il vient :

$$\begin{aligned}
&\hat{j}_{ab}\,\hat{j}_{bc}\ \ W(j_a\,j_b\,j\,j_c\,;j_{ab}\,j_{bc}) = \hat{J}_{AB}\,\hat{J}_{BC}\ \ W(J_B\,J_A\,J_C\,J\,;J_{AB}\,J_{BC}) \\
&\quad = \frac{1}{2J_C+1}\sum \langle J_{AB}\,M_{AB}\ J\,M \mid J_C\,M_C\rangle\,\langle J_B\,M_B\ J_A\,M_A \mid J_{AB}\,M_{AB}\rangle \\
&\qquad\qquad \times \langle J_A\,M_A\ J\,M \mid J_{BC}\,M_{BC}\rangle\langle J_B\,M_B\ J_{BC}\,M_{BC} \mid J_C\,M_C\rangle.
\end{aligned}$$

Avec (3A-22), (3A-24) et (3A-25), le membre de droite devient égal à :

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2J+1}\sum \langle J_{AB}\,M_{AB}\ J_C\,{-M_C} \mid J\,{-M}\rangle\,\langle J_A\,M_A\ J_B\,M_B \mid J_{AB}\,M_{AB}\rangle \\
&\times \langle J_A\,M_A\ J_{BC}\,{-M_{BC}} \mid J\,{-M}\rangle\langle J_B\,M_B\ J_C\,{-M_C} \mid J_{BC}\,{-M_{BC}}\rangle = \\
&\sqrt{(2J_{AB}+1)(2J_{BC}+1)}\ \ W(J_A\,J_B\,J\,J_C\,;J_{AB}\,J_{BC}) \\
&= \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\ \ W(j_b\,j_a\,j_c\,j\,;j_{ab}\,j_{bc}).
\end{aligned}$$

Cette égalité signifie qu'on peut permuter à gauche du point virgule les deux premiers moments angulaires entre eux et les troisièmes et quatrièmes moments cinétiques entre eux. Il existe d'autres relations analogues qui ne concernent que les permutations des moments angulaires de la partie gauche du coefficient de Racah. Elles sont données dans la relation (3B-32). La dernière relation que nous allons démontrer est la conséquence du passage du couple du milieu du terme de gauche vers la droite du point virgule. Pour cela, posons successivement $J_A = j_a$, $J_{AB} = j_b$, $J_{BC} = j$, $J_C = j_c$, $J_B = j_{ab}$ et $J = j_{bc}$. On a alors

$$\begin{aligned}
&\hat{j}_{ab}\,\hat{j}_{bc}\ \ W(j_a\,j_b\,j\,j_c\,;j_{ab}\,j_{bc}) = \hat{J}_B\,\hat{J}\ W(J_A\,J_{AB}\,J_{BC}\,J_C\,;J_B\,J) \\
&\quad = \frac{1}{2J_{BC}+1}\sum \langle J_B\,M_B\ J_C\,M_C \mid J_{BC}\,M_{BC}\rangle\langle J_A\,M_A\ J_{AB}\,M_{AB} \mid J_B\,M_B\rangle \\
&\qquad\qquad \times \langle J_{AB}\,M_{AB}\ J_C\,M_C \mid J\,M\rangle\langle J_A\,M_A\ J\,M \mid J_{BC}\,M_{BC}\rangle.
\end{aligned}$$

Le membre de droite devient égal à :

$$\sqrt{\frac{(2J_B+1)\,(2J+1)}{(2J_{AB}+1)\,(2J_{BC}+1)}}\,(-1)^{J_{AB}+J_{BC}-J_B-J}$$
$$\times\,\frac{1}{2J+1}\sum\langle J_B\,M_B\;J_C\,M_C\mid J_{BC}\,M_{BC}\rangle\langle J_A\,{-M_A}\;J_B\,M_B\mid J_{AB}\,M_{AB}\rangle$$
$$\times\,\langle J_{AB}\,M_{AB}\;J_C\,M_C\mid J\,M\rangle\langle J_A\,{-M_A}\;J_{BC}\,M_{BC}\mid J\,M\rangle =$$
$$\sqrt{\frac{(2J_B+1)\,(2J+1)}{(2J_{AB}+1)\,(2J_{BC}+1)}}\,(-1)^{J_{AB}+J_{BC}-J_B-J}\;\hat{J}_{AB}\,\hat{J}_{BC}\;W(J_A\,J_B\,J\,J_C\,;J_{AB}\,J_{BC})$$
$$=\hat{J}_B\,\hat{J}\,(-1)^{J_{AB}+J_{BC}-J_B-J}\;W(J_A\,J_B\,J\,J_C\,;J_{AB}\,J_{BC}).$$

Soit finalement

$$W(j_a\,j_b\,j\,j_c\,;j_{ab}\,j_{bc})\;=\;(-1)^{j_b+j-j_{ab}-j_{bc}}\;W(j_a\,j_{ab}\,j_{bc}\,j_c\,;j_b\,j).$$

L'ensemble des résultats est donné dans la relation (3B-32) :

$$\begin{aligned}W(abcd;ef) = W(badc;ef) &= W(cdab;ef) = W(acbd;fe)\\ &= (-1)^{b+c-e-f}\;W(aefd;bc).\end{aligned}\qquad\text{(3B-32)}$$

(D) Relations d'orthogonalité

Si on utilise (3B-18) et la relation (3B-23) qui définit les coefficients de Racah, on obtient :

$$\sum_e (2e+1)(2f+1)\,W(abcd;ef)\,W(abcd;eg)\;=\;\delta_{f\,g}\qquad\text{(3B-33)}$$

(E) Règles de somme

La première règle de somme se déduit de (3B-15) :

$$W(abcd;ef)\;=\;\sum_g(-1)^{b+g-c}\,(2g+1)\;W(gabf;dc)\,W(gdbe;ac).\qquad\text{(3B-34)}$$

Il existe d'autres relations dont nous ne donnerons pas la démonstration :

$$\begin{aligned}W(abcd;ef)\,W(abgh;ei) &= \sum_j(2j+1)\,W(jgfa;ci)\,W(jdib;hf)\,W(jgde;ch)\\ &= \sum_{j\,k}(2j+1)\,(2k+1)\\ &\quad\times W(cifg;ka)\,W(cijb;kh)\,W(gfjb;kd)\,W(cdhg;ej).\end{aligned}$$

(3B-35)

(F) Valeurs particulières

$$W(0bcd;ef) = \sqrt{\frac{1}{(2b+1)\,(2c+1)}}\,\delta_{b\,e}\,\delta_{c\,f} \qquad (\,|\,b-c\,|\leq d\leq b+c\,) \quad \text{(3B-36a)}$$

$$W(abcd;0f) = \frac{(-1)^{a+c-f}}{\sqrt{(2a+1)(2c+1)}}\,\delta_{a\,b}\,\delta_{c\,d} \qquad (\,|\,a-c\,|\leq f\leq a+c\,) \quad \text{(3B-36b)}$$

(G) Tables pour e = 1/2 et e = 1

$$W(a\;a+1/2\;\;b\;b+1/2\;\;;1/2\;c) = (-1)^{a+b-c}\sqrt{\frac{(a+b+c+2)(a+b-c+1)}{(2a+1)(2a+2)(2b+1)(2b+2)}}$$

$$W(a\;a+1/2\;\;b\;b-1/2\;\;;1/2\;c) = (-1)^{a+b-c}\sqrt{\frac{(a-b+c+1)(c-a+b)}{(2a+1)(2a+2)2b(2b+1)}}$$

Table 5. Expression algébrique des coefficients de Racah pour $e = 1/2$.
[Algebraic formula for the Racah coefficients for $e = 1/2$.]

$$W(a\;a+1\;\;b\;b+1\;;1\;c) = (-1)^{a+b-c}\sqrt{\frac{(a+b+c+3)(a+b+c+2)(a+b-c+2)(a+b-c+1)}{4(2a+3)(a+1)(2a+1)(2b+3)(2b+1)(b+1)}}$$

$$W(a\;a+1\;\;b\;b\;;1\;c) = (-1)^{a+b-c}\sqrt{\frac{(a+b+c+2)(a-b+c+1)(a+b-c+1)(c-a+b)}{4(2a+3)(a+1)(2a+1)b(b+1)(2b+1)}}$$

$$W(a\;a+1\;\;b\;b-1\;;1\;c) = (-1)^{a+b-c}\sqrt{\frac{(c-a+b)(c-a+b-1)(a-b+c+2)(a-b+c+1)}{4(2a+3)(a+1)(2a+1)(2b-1)b(2b+1)}}$$

$$W(a\;a\;\;b\;b\;;1\;c) = (-1)^{a+b-c-1}\,\frac{a(a+1)+b(b+1)-c(c+1)}{\sqrt{4a(a+1)(2a+1)b(b+1)(2b+1)}}$$

Table 6. Expression algébrique des coefficients de Racah pour $e = 1$.
[Algebraic formula for the Racah coefficients for $e = 1$.]

Coefficients de Jahn

(A) Définition

Ces coefficients sont définis par :

$$\langle\,(j_a j_b)\, j_{ab}\; j_c\;; j\;|\; j_a\; (j_b j_c)\, j_{bc}\;; j\,\rangle \;=\; U(j_a\, j_b\, j\, j_c\;; j_{ab}\, j_{bc}). \tag{3B-37}$$

La relation entre ces derniers et les coefficients de Racah est particulièrement simple :

$$U(abcd;ef) \;=\; \sqrt{(2e+1)\,(2f+1)}\;\; W(abcd;ef) \tag{3B-38}$$

ce qui permet de schématiser les inégalités triangulaires par :

$$U(\circ\circ\cdot\cdot;\circ\cdot)\,;\quad U(\circ\cdot\circ\cdot;\cdot\circ)\,;\quad U(\cdot\circ\cdot\circ;\cdot\circ)\,;\quad U(\cdot\cdot\circ\circ;\circ\cdot).$$

(B) Symétrie

$$\begin{aligned} U(abcd;ef) &= U(badc;ef) \;=\; U(cdab;ef) \;=\; U(dcba;ef) \;=\; U(acbd;fe) \\ &= (-1)^{e+f-a-d}\sqrt{\frac{(2e+1)\,(2f+1)}{(2a+1)\,(2d+1)}}\; U(ebcf;ad). \end{aligned} \tag{3B-38}$$

(C) Orthogonalité

$$\sum_f U(abcd;ef)\, U(abcd;gf) \;=\; \delta_{e\,g}. \tag{3B-39}$$

(D) Règles de somme

$$\sum_b \sqrt{\frac{2b+1}{2c+1}}\; U(adda;bc) = 1 \tag{3B-40}$$

$$\sum_d (-1)^{b-a-d}\sqrt{\frac{2b+1}{(2a+1)\,(2d+1)}}\; U(adad;bc) \;=\; \delta_{c\,0} \tag{3B-41}$$

$$\sum_f (-1)^{e+f+g}\; U(abcd;ef)\; U(adcb;gf) = (-1)^{a+b+c+d}\; U(abdc;eg) \tag{3B-42}$$

$$U(abcd;ef)\; U(afgh;cj) = \sum_k\; U(dbhj;fk)\; U(dehg;ck)\; U(abgk;ej). \tag{3B-43}$$

(E) Valeurs particulières

$$U(0bcd;ef) = \delta_{b\,e}\;\delta_{c\,f} \qquad (\,|\, b-c\,| \le d \le b+c\,) \tag{3B-44}$$

$$U(abcd;0f) = \sqrt{\frac{2f+1}{(2a+1)\,(2c+1)}}\;(-1)^{a+c-f}\;\delta_{a\,b}\;\delta_{c\,d} \qquad (\,|\, a-c\,| \le f \le a+c\,). \tag{3B-45}$$

Coefficients 6-j

(A) Définition

Ces coefficients *6-j* sont définis par :

$$\begin{Bmatrix} a & b & e \\ d & c & f \end{Bmatrix} = (-1)^{a+b+c+d}\, W(abcd; ef). \tag{3B-46}$$

Les inégalités triangulaires qui doivent être satisfaites pourront être schématisées ainsi :

$$\begin{Bmatrix} \circ & \circ & \circ \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{Bmatrix} ; \quad \begin{Bmatrix} \circ & \cdot & \cdot \\ \cdot & \circ & \circ \end{Bmatrix} ; \quad \begin{Bmatrix} \cdot & \circ & \cdot \\ \circ & \cdot & \circ \end{Bmatrix} ; \quad \begin{Bmatrix} \cdot & \cdot & \circ \\ \circ & \circ & \cdot \end{Bmatrix}.$$

(B) Expression en fonction des coefficients de Clebsch-Gordan

Les relations que nous avons obtenues avec les coefficients de Racah s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} &\sum_{j_{ab}\, m_{ab}} \langle j_a\, m_a\; j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \langle j_{ab}\, m_{ab}\; j_c\, m_c \mid j\, m\rangle \\ &\qquad \times (-1)^{j_a+j_b+j_c+j} \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j & j_{bc} \end{Bmatrix} = \\ &\qquad\qquad \sum_{m_{bc}} \langle j_a\, m_a\; j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \langle j_b\, m_b\; j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \end{aligned} \tag{3B-47}$$

$$\begin{aligned} &\sum_{j_{ab}} \langle j_a\, 0\; j_b\, 0 \mid j_{ab}\, 0\rangle \langle j_{ab}\, 0\; j_c\, 0 \mid j\, 0\rangle \\ &\qquad \times (-1)^{j_a+j_b+j_c+j} \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j & j_{bc} \end{Bmatrix} = \\ &\qquad\qquad \langle j_a\, 0\; j_{bc}\, 0 \mid j\, 0\rangle \langle j_b\, 0\; j_c\, 0 \mid j_{bc}\, 0\rangle \end{aligned} \tag{3B-48}$$

$$\begin{aligned} &\langle j_{ab}\, m_{ab}\; j_c\, m_c \mid j\, m\rangle\, (-1)^{j_a+j_b+j_c+j} \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j & j_{bc} \end{Bmatrix} = \\ &\qquad \sum_{m_a\, m_b\, m_{bc}} \langle j_a\, m_a\; j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \langle j_b\, m_b\; j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \\ &\qquad\qquad \times \langle j_a\, m_a\; j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \end{aligned} \tag{3B-49}$$

$$\begin{aligned} &(-1)^{j_a+j_b+j_c+j} \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j & j_{bc} \end{Bmatrix} = \\ &\qquad \sum_{m_a\, m_b\, m_c}\; \sum_{m_{ab}\, m_{bc}} \langle j_{ab}\, m_{ab}\; j_c\, m_c \mid j\, m\rangle \langle j_a\, m_a\; j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \\ &\qquad\qquad \times \langle j_b\, m_b\; j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle \langle j_a\, m_a\; j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle \end{aligned} \tag{3B-50}$$

$$\sum_{j_{bc}\, m_{bc}} \langle j_b\, m_b\, j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle\, \langle j_a\, m_a\, j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle$$
$$\times\, (-1)^{j_a+j_b+j_c+j}\, \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\, \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j & j_{bc} \end{Bmatrix} =$$
$$\sum_{m_{ab}} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle\, \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_c\, m_c \mid j\, m\rangle \qquad \text{(3B-51)}$$

$$\sum_{j_{bc}} \langle j_b\, 0\; j_c\, 0 \mid j_{bc}\, 0\rangle\, \langle j_a\, 0\; j_{bc}\, 0 \mid j\, 0\rangle$$
$$\times\, (-1)^{j_a+j_b+j_c+j}\, \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\, \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j & j_{bc} \end{Bmatrix} =$$
$$\langle j_{ab}\, 0\; j_c\, 0 \mid j\, 0\rangle\, \langle j_a\, 0\; j_b\, 0 \mid j_{ab}\, 0\rangle \qquad \text{(3B-52)}$$

$$\langle j_a\, m_a\, j_{bc}\, m_{bc} \mid j\, m\rangle\, (-1)^{j_a+j_b+j_c+j}\, \sqrt{(2j_{ab}+1)(2j_{bc}+1)}\, \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j & j_{bc} \end{Bmatrix} =$$
$$\sum_{m_b\, m_c\, m_{ab}} \langle j_b\, m_b\, j_c\, m_c \mid j_{bc}\, m_{bc}\rangle\, \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b \mid j_{ab}\, m_{ab}\rangle \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_c\, m_c \mid j\, m\rangle. \qquad \text{(3B-53)}$$

(C) Symétries

Le symbole *6-j* est invariant lorsque
(i) on permute ses colonnes ;
(ii) on échange deux éléments de la première ligne avec les éléments qui leur correspondent dans la deuxième ligne.

(D) Valeurs particulières

$$\begin{Bmatrix} a & b & 0 \\ d & c & f \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} a & c & f \\ d & b & 0 \end{Bmatrix}$$
$$= (-1)^{a+c+f}\, \frac{\delta_{a\,b}\, \delta_{d\,c}}{\sqrt{(2a+1)\,(2c+1)}} \qquad (\,|\, a-c\,| \leq f \leq a+c\,). \qquad \text{(3B-54)}$$

B.2. Couplage de 4 moments angulaires

Transformation unitaire

(A) Expression en fonction des coefficients de Clebsch-Gordan

Reprenons la définition du coefficient de recouplage (3-57a) :

$$
\begin{aligned}
&|\ \alpha\,(j_a j_c)\,j_{ac}\ (j_b j_d)\,j_{bd}\ ; j\,m\,\rangle = \\
&\qquad \sum_{j_{ab}\,j_{cd}} \langle\,(j_a j_b)\,j_{ab}\ (j_c j_d)\,j_{cd}\ ; j\ |\ (j_a j_c)\,j_{ac}\ (j_b j_d)\,j_{bd}\ ; j\,\rangle \\
&\qquad\qquad \times |\ \alpha\,(j_a j_b)\,j_{ab}\ (j_c j_d)\,j_{cd}\ ; j\,m\,\rangle. \qquad \text{(3B-55)}
\end{aligned}
$$

Dans les deux membres de la relation ci-dessus, on exprime l' état propre de $\mathbf{J}^2$ et J_z comme une combinaison linéaire des vecteurs propres des opérateurs $\mathbf{J}_i^2$ et J_{iz} :

$$
\begin{aligned}
&|\ \alpha\,(j_a j_c)\,j_{ac}\ (j_b j_d)\,j_{bd}\ ; j\,m\,\rangle = \\
&\sum_{j_{ab}\,j_{cd}} \langle\,(j_a j_b)\,j_{ab}\ (j_c j_d)\,j_{cd}\ ; j\ |\ (j_a j_c)\,j_{ac}\ (j_b j_d)\,j_{bd}\ ; j\,\rangle \\
&\times \sum_{m_a\,m_b\,m_c\,m_d}\ \sum_{m_{ab}\,m_{cd}} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ |\ j_{ab}\,m_{ab}\rangle\,\langle j_c\,m_c\,j_d\,m_d\ |\ j_{cd}\,m_{cd}\rangle \\
&\times \langle j_{ab}\,m_{ab}\,j_{cd}\,m_{cd}\ |\ j\,m\rangle\ |\ j_a\,m_a\,\rangle\ \ |\ j_b\,m_b\,\rangle\ \ |\ j_c\,m_c\,\rangle\ \ |\ j_d\,m_d\,\rangle \\
&= \sum_{m_a\,m_b\,m_c\,m_d}\ \sum_{m_{ac}\,m_{bd}} \langle j_a\,m_a\,j_c\,m_c\ |\ j_{ac}\,m_{ac}\rangle\,\langle j_b\,m_b\,j_d\,m_d\ |\ j_{bd}\,m_{bd}\rangle \\
&\ \times \langle j_{ac}\,m_{ac}\,j_{bd}\,m_{bd}\ |\ j\,m\rangle\ |\ j_a\,m_a\,\rangle\ \ |\ j_b\,m_b\,\rangle\ \ |\ j_c\,m_c\,\rangle\ \ |\ j_d\,m_d\,\rangle. \qquad \text{(3B-56)}
\end{aligned}
$$

En multipliant par $\langle\,j_a\,m'_a\ \ |\ \ \langle\,j_b\,m'_b\ \ |\ \ \langle\,j_c\,m'_c\ \ |\ \ \langle\,j_d\,m'_d\ \ |$ les deux membres de cette dernière relation, on obtient :

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j_{ab}\,j_{cd}}\ \sum_{m_{ab}\,m_{cd}} \langle\,(j_a j_b)\,j_{ab}\ (j_c j_d)\,j_{cd}\ ; j\ |\ (j_a j_c)\,j_{ac}\ (j_b j_d)\,j_{bd}\ ; j\,\rangle \\
&\times \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ |\ j_{ab}\,m_{ab}\rangle\,\langle j_c\,m_c\,j_d\,m_d\ |\ j_{cd}\,m_{cd}\rangle\langle j_{ab}\,m_{ab}\,j_{cd}\,m_{cd}\ |\ j\,m\rangle = \\
&\sum_{m_{ac}\,m_{bd}} \langle j_a\,m_a\,j_c\,m_c\ |\ j_{ac}\,m_{ac}\rangle\,\langle j_b\,m_b\,j_d\,m_d\ |\ j_{bd}\,m_{bd}\rangle\langle j_{ac}\,m_{ac}\,j_{bd}\,m_{bd}\ |\ j\,m\rangle. \\
&\hfill \text{(3B-57)}
\end{aligned}
$$

En multipliant cette égalité par $\langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ |\ j_{ab}\,m_{ab}\rangle$ et en sommant sur m_a et m_b, on trouve :

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j_{cd}\,m_{cd}} \langle\,(j_a j_b)\,j_{ab}\ (j_c j_d)\,j_{cd}\ ; j\ |\ (j_a j_c)\,j_{ac}\ (j_b j_d)\,j_{bd}\ ; j\,\rangle \\
&\times \langle j_c\,m_c\,j_d\,m_d\ |\ j_{cd}\,m_{cd}\rangle\,\langle j_{ab}\,m_{ab}\,j_{cd}\,m_{cd}\ |\ j\,m\rangle = \\
&\sum_{m_a\,m_b\,m_{ac}\,m_{bd}} \langle j_a\,m_a\,j_b\,m_b\ |\ j_{ab}\,m_{ab}\rangle\,\langle j_a\,m_a\,j_c\,m_c\ |\ j_{ac}\,m_{ac}\rangle \\
&\times \langle j_b\,m_b\,j_d\,m_d\ |\ j_{bd}\,m_{bd}\rangle\,\langle j_{ac}\,m_{ac}\,j_{bd}\,m_{bd}\ |\ j\,m\rangle. \qquad \text{(3B-58)}
\end{aligned}
$$

Par un calcul analogue, on obtient :

$$\begin{aligned}
&\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\ \rangle\ \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_{cd}\, m_{cd}\ \mid\ j\, m\rangle = \\
&\sum_{m_a\, m_b\, m_c\, m_d}\ \sum_{m_{ac}\, m_{bd}} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\ \mid\ j_{ab}\, m_{ab}\rangle\, \langle j_c\, m_c\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{cd}\, m_{cd}\rangle \\
&\times \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c\ \mid\ j_{ac}\, m_{ac}\rangle \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{bd}\, m_{bd}\rangle\, \langle j_{ac}\, m_{ac}\, j_{bd}\, m_{bd}\ \mid\ j\, m\rangle .
\end{aligned} \tag{3B-59}$$

Finalement, en multipliant cette égalité par $\langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_{cd}\, m_{cd}\ \mid\ j\, m\rangle$ et en sommant sur m_{ab} et m_{cd}, on trouve :

$$\begin{aligned}
&\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\ \rangle = \\
&\sum_{m_a\, m_b\, m_c\, m_d}\ \sum_{m_{ac}\, m_{bd}\, m_{ab}\, m_{cd}} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\ \mid\ j_{ab}\, m_{ab}\rangle\, \langle j_c\, m_c\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{cd}\, m_{cd}\rangle \\
&\times \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c\ \mid\ j_{ac}\, m_{ac}\rangle\, \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{bd}\, m_{bd}\rangle \\
&\times \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_{cd}\, m_{cd}\ \mid\ j\, m\rangle\, \langle j_{ac}\, m_{ac}\, j_{bd}\, m_{bd}\ \mid\ j\, m\rangle .
\end{aligned} \tag{3B-60}$$

Cette égalité peut aussi s'écrire en sommant sur tous les indices magnétiques :

$$\begin{aligned}
&\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\ \rangle = \\
&\frac{1}{2j+1} \sum_{m_a\, m_b\, m_c\, m_d}\ \sum_{m_{ac}\, m_{bd}\, m_{ab}\, m_{cd}\, m} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\ \mid\ j_{ab}\, m_{ab}\rangle \\
&\times \langle j_c\, m_c\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{cd}\, m_{cd}\rangle \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c\ \mid\ j_{ac}\, m_{ac}\rangle\, \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{bd}\, m_{bd}\rangle \\
&\times \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_{cd}\, m_{cd}\ \mid\ j\, m\rangle\, \langle j_{ac}\, m_{ac}\, j_{bd}\, m_{bd}\ \mid\ j\, m\rangle .
\end{aligned} \tag{3B-61}$$

Si on multiplie la relation (3B-59) par $\langle j_{ac}\, m'_{ac}\, j_{bd}\, m'_{bd}\ \mid\ j\, m\rangle$, et si on somme sur j et m, en utilisant (3A-26a), on obtient

$$\begin{aligned}
&\sum_{j\, m} \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_{cd}\, m_{cd}\ \mid\ j\, m\rangle\, \langle j_{ac}\, m_{ac}\, j_{bd}\, m_{bd}\ \mid\ j\, m\rangle \\
&\times \langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\ \rangle = \\
&\sum_{m_a\, m_b\, m_c\, m_d} \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\ \mid\ j_{ab}\, m_{ab}\rangle\, \langle j_c\, m_c\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{cd}\, m_{cd}\rangle \\
&\times \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c\ \mid\ j_{ac}\, m_{ac}\rangle\, \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{bd}\, m_{bd}\rangle .
\end{aligned} \tag{3B-62}$$

(B) Relations d'orthogonalité

Par définition, nous avons :

$$\begin{aligned}
&\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\, m\ \mid (j_a j_b)\, j'_{ab}\ (j_c j_d)\, j'_{cd}\ ; j\, m\ \rangle = \\
&\qquad \langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ \mid (j_a j_b)\, j'_{ab}\ (j_c j_d)\, j'_{cd}\ ; j\ \rangle\ =\ \delta_{j'_{ab}\, j_{ab}}\ \delta_{j'_{cd}\, j_{cd}} .
\end{aligned} \tag{3B-63}$$

Si on injecte la relation de fermeture (3-55) :

$$\sum_{j_{ac}\, j_{bd}\, j\, m} |\ \alpha\,(j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\, m\,\rangle\ \langle\,\alpha\,(j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\, m\ | = 1 \tag{3B-64}$$

on a la relation d'orthogonalité :

$$\sum_{j_{ac}\, j_{bd}} \langle\,(j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ |\ (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\,\rangle$$
$$\times\,\langle\,(j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\ |\ (j_a j_b)\, j'_{ab}\ (j_c j_d)\, j'_{cd}\ ; j\,\rangle\ =\ \delta_{j'_{ab}\, j_{ab}}\ \delta_{j'_{cd}\, j_{cd}}. \tag{3B-65}$$

(C) Règle de somme

On utilise la relation de fermeture (3B-64) :

$$\langle\,(j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ |\ (j_a j_d)\, j_{ad}\ (j_b j_c)\, j_{bc}\ ; j\,\rangle =$$
$$\sum_{j_{ac}\, j_{bd}} \langle\,(j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ |\ (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\,\rangle$$
$$\times\,\langle\,(j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\ |\ (j_a j_d)\, j_{ad}\ (j_b j_c)\, j_{bc}\ ; j\,\rangle. \tag{3B-66}$$

(D) Contraction

Nous partons de l'égalité (3B-61) et plus particulièrement du membre de droite. En utilisant (3B-2), on a :

$$\sum_m \langle j_{ab}\, m_{ab}\, j_{cd}\, m_{cd}\ |\ j\, m\rangle\ \langle j_{ac}\, m_{ac}\, j_{bd}\, m_{bd}\ |\ j\, m\rangle =$$
$$\sqrt{\frac{2j+1}{2j_{cd}+1}}\ (-1)^{j_{ac}+j_{bd}+j_{ab}-j_{cd}}\ (-1)^{j_{ab}-m_{ab}}$$
$$\times \sum_m \langle j_{ab}\, -m_{ab}\, j\, m\ |\ j_{cd}\, m_{cd}\rangle\ \langle j_{bd}\, m_{bd}\, j_{ac}\, m_{ac}\ |\ j\, m\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{2j+1}{2j_{cd}+1}}\ (-1)^{j_{ac}+j_{bd}+j_{ab}-j_{cd}}\ \sum_{j''} \langle\,(j_{ab}\, j_{bd})\ j''\ j_{ac}\, ; j_{cd}\ |\ j_{ab}\,(j_{bd}\, j_{ac})\ j\, ; j_{cd}\,\rangle$$
$$\times \sum_{m''} (-1)^{j_{ab}-m_{ab}}\ \langle j_{ab}\, -m_{ab}\, j_{bd}\, m_{bd}\ |\ j''\, m''\rangle\ \langle j''\, m''\, j_{ac}\, m_{ac}\ |\ j_{cd}\, m_{cd}\rangle.$$

D'après (3B-4), on a :

$$\sum_{m_{ab}\, m_b\, m_{bd}} (-1)^{j_{ab}-m_{ab}}\ \langle j_{ab}\, -m_{ab}\, j_{bd}\, m_{bd}\ |\ j''\, m''\rangle$$
$$\times\,\langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\ |\ j_{ab}\, m_{ab}\rangle\ \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d\ |\ j_{bd}\, m_{bd}\rangle =$$
$$\sqrt{\frac{2j_{ab}+1}{2j_a+1}}\ (-1)^{j_{ab}+j_b-m_a}\ \langle\,(j_{ab}\, j_b)\ j_a\, j_d\, ; j''\ |\ j_{ab}\,(j_b\, j_d)\ j_{bd}\, ; j''\,\rangle$$
$$\times\,\langle j_a\, -m_a\, j_d\, m_d\ |\ j''\, m''\rangle$$

puis en utilisant (3B-5b) :

$$\sum_{m''\, m_a\, m_c\, m_d\, m_{ac}\, m_{cd}} \langle j_c\, m_c\, j_d\, m_d \mid j_{cd}\, m_{cd}\rangle \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c \mid j_{ac}\, m_{ac}\rangle (-1)^{-m_a}$$
$$\times \langle j_a\, {-m_a}\, j_d\, m_d \mid j''\, m''\rangle \langle j''\, m''\, j_{ac}\, m_{ac} \mid j_{cd}\, m_{cd}\rangle =$$
$$(-1)^{j_a+j_c+j_d-j_{cd}} \sqrt{\frac{2j''+1}{2j_d+1}} \sum_{m_{cd}} \langle\, (j''\, j_a)\, j_d\, j_c\, ; j_{cd} \mid j''\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j_{cd}\,\rangle$$
$$= (-1)^{j_a+j_c+j_d-j_{cd}} \sqrt{\frac{2j''+1}{2j_d+1}}\, (2j_{cd}+1) \langle\, (j''\, j_a)\, j_d\, j_c\, ; j_{cd} \mid j''\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j_{cd}\,\rangle .$$

Finalement, on trouve :

$$\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\; (j_c j_d)\, j_{cd}\; ; j \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\; (j_b j_d)\, j_{bd}\; ; j\,\rangle =$$
$$(-1)^{j_a+j_b+j_{ab}}\, (-1)^{j_c+j_d+j_{cd}}\, (-1)^{j_{ac}+j_{bd}+j_{ab}+j_{cd}} \sqrt{\frac{(2j_{cd}+1)\,(2j_{ab}+1)}{(2j+1)\,(2j_a+1)\,(2j_d+1)}}$$
$$\times \sum_{j''} \sqrt{2j''+1}\; \langle\, (j_{ab}\, j_{bd})\, j''\, j_{ac}\, ; j_{cd} \mid j_{ab}\, (j_{bd}\, j_{ac})\, j\, ; j_{cd}\,\rangle$$
$$\times \langle\, (j_{ab}\, j_b)\, j_a\, j_d\, ; j'' \mid j_{ab}\, (j_b\, j_d)\, j_{bd}\, ; j''\,\rangle \langle\, (j''\, j_a)\, j_d\, j_c\, ; j_{cd} \mid j''\, (j_a\, j_c)\, j_{ac}\, ; j_{cd}\,\rangle . \tag{3B-67}$$

(E) Relations de symétrie

$$\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\; (j_c j_d)\, j_{cd}\; ; j \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\; (j_b j_d)\, j_{bd}\; ; j\,\rangle =$$
$$\langle\, (j_a j_c)\, j_{ac}\; (j_b j_d)\, j_{bd}\; ; j \mid (j_a j_b)\, j_{ab}\; (j_c j_d)\, j_{cd}\; ; j\,\rangle . \tag{3B-68}$$

D'après les relations de symétrie des C.G, on a aussi :

$$\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\; (j_c j_d)\, j_{cd}\; ; j \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\; (j_b j_d)\, j_{bd}\; ; j\,\rangle =$$
$$(-1)^{j_{ab}+j_{cd}-j}\, (-1)^{j_a+j_c-j_{ac}}\, (-1)^{j_b+j_d-j_{bd}}$$
$$\times \langle\, (j_c j_d)\, j_{cd}\; (j_a j_b)\, j_{ab}\; ; j \mid (j_c j_a)\, j_{ac}\; (j_d j_b)\, j_{bd}\; ; j\,\rangle$$
$$= (-1)^{j_a+j_b+j_c+j_d}\, (-1)^{j_{ab}+j_{cd}+j_{ac}+j_{bd}+j}$$
$$\times \langle\, (j_c j_d)\, j_{cd}\; (j_a j_b)\, j_{ab}\; ; j \mid (j_c j_a)\, j_{ac}\; (j_d j_b)\, j_{bd}\; ; j\,\rangle . \tag{3B-69}$$

(F) Valeurs particulières

Nous partons de l'égalité (3B-60). Lorsque un des moments angulaires est nul, on a les relations :

$$\langle\, (0 j_b)\, j_{ab}\; (j_c j_d)\, j_{cd}\; ; j \mid (0 j_c)\, j_{ac}\; (j_b j_d)\, j_{bd}\; ; j\,\rangle =$$
$$(-1)^{j_c+j_{bd}-j}\, (-1)^{j_d+j_c-j_{cd}}\, \delta_{j_{ab}\, j_b}\, \delta_{j_{ac}\, j_c} \langle\, (j_b\, j_d)\, j_{bd}\, j_c\, ; j \mid j_b\, (j_d\, j_c)\, j_{cd}\, ; j\,\rangle \tag{3B-70}$$

$$\langle\, (j_a 0)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\ (0 j_d)\, j_{bd}\ ; j\,\rangle =$$
$$\langle\, (j_a j_c)\, j_{ac}\ (0 j_d)\, j_d\ ; j\ \mid (j_a 0)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{bd}\ ; j\,\rangle$$
$$= \delta_{j_{ab}\, j_a}\ \delta_{j_{bd}\, j_d}\ \langle\, (j_a\, j_c)\ j_{ac}\, j_d\, ; j\ \mid\ j_a\, (j_c\, j_d)\ j_{cd}\, ; j\,\rangle. \quad \text{(3B-71)}$$

Lorsque les moments cinétiques intermédiaire ou total sont nuls, on a des relations supplémentaires :

$$\langle\, (j_a j_b)\, 0\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\ \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\,\rangle =$$
$$\langle\, (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; j\ \mid (j_a j_b)\, 0\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; j\,\rangle$$
$$= \delta_{j\, j_{cd}}\ \delta_{j_b\, j_a}\ \delta_{j_{bd}\, j_{ad}}\quad (-1)^{j_c - j_d + j_{ad} - j_{ac}}\quad \sqrt{\frac{2j_{ad}+1}{(2j_a+1)\,(2j_d+1)}}$$
$$\times \langle\, (j_c\, j_a)\ j_{ac}\, j_{ad}\, ; j_{cd}\ \mid\ j_c\, (j_c\, j_{ad})\ j_d\, ; j_{cd}\,\rangle \quad \text{(3B-72)}$$

$$\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\ (j_c j_d)\, j_{cd}\ ; 0\ \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\ (j_b j_d)\, j_{bd}\ ; 0\,\rangle =$$
$$\delta_{j_{cd}\, j_{ab}}\ \delta_{j_{bd}\, j_{ac}}\ \sqrt{\frac{1}{(2j_{ab}+1)\,(2j_{ac}+1)}}$$
$$\times \sum_{m_a\, m_b\, m_c\, m_d\, m_{ab}\, m_{ac}} (-1)^{j_{ab}-m_{ab}}\ (-1)^{j_{ac}-m_{ac}}\ \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\ \mid\ j_{ab}\, m_{ab}\rangle$$
$$\times \langle j_c\, m_c\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{ab}\, {-m_{ab}}\rangle \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c\ \mid\ j_{ac}\, m_{ac}\rangle\ \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{ac}\, {-m_{ac}}\rangle.$$

D'après (3B-2) :

$$\sum_{m_{ab}} (-1)^{j_{ab}-m_{ab}}\ \langle j_a\, m_a\, j_b\, m_b\ \mid\ j_{ab}\, m_{ab}\rangle\ \langle j_c\, m_c\, j_d\, m_d\ \mid\ j_{ab}\, {-m_{ab}}\rangle =$$
$$\sqrt{\frac{2j_{ab}+1}{2j_d+1}}\ (-1)^{j_{ab}+j_c+m_d}$$
$$\times \sum_{j'_{ac}\, m'_{ac}} \langle j_c\, m_c\, j_a\, m_a\ \mid\ j'_{ac}\, m'_{ac}\rangle\ \langle j'_{ac}\, m'_{ac}\, j_b\, m_b\ \mid\ j_d\, {-m_d}\rangle$$
$$\times \langle\, (j_c\, j_a)\ j'_{ac}\, j_b\, ; j_d\ \mid\ j_c\, (j_a\, j_b)\ j_{ab}\, ; j_d\,\rangle$$
$$= \sqrt{2j_{ab}+1}\ (-1)^{j_{ab}-j_a+j_b}\ (-1)^{j_b+j_d-j_{ac}}$$
$$\times \sum_{j'_{ac}\, m'_{ac}} \frac{(-1)^{j_{ac}-m'_{ac}}}{\sqrt{2j'_{ac}+1}}\ \langle\, (j_c\, j_a)\ j'_{ac}\, j_b\, ; j_d\ \mid\ j_c\, (j_a\, j_b)\ j_{ab}\, ; j_d\,\rangle$$
$$\times \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c\ \mid\ j'_{ac}\, m'_{ac}\rangle\ \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d\ \mid\ j'_{ac}\, {-m'_{ac}}\rangle$$

d'après (3A-26b) :

$$\sum_{m_a\, m_b\, m_c\, m_d} \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c \mid j'_{ac}\, m'_{ac}\rangle \, \langle j_a\, m_a\, j_c\, m_c \mid j_{ac}\, m_{ac}\rangle \\ \times \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d \mid j'_{ac}\, {-m'_{ac}}\rangle \langle j_b\, m_b\, j_d\, m_d \mid j_{ac}\, {-m_{ac}}\rangle = \delta_{j'_{ac}\, j_{ac}} \delta_{m'_{ac}\, m_{ac}}$$

ce qui donne finalement :

$$\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\, (j_c j_d)\, j_{cd}\, ; 0 \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\, (j_b j_d)\, j_{bd}\, ; 0\, \rangle = \\ \delta_{j_{cd}\, j_{ab}}\, \delta_{j_{bd}\, j_{ac}}\, (-1)^{j_{ab}+j_b-j_a}\, (-1)^{j_b+j_d-j_{ac}}\, \langle\, (j_c\, j_a)\, j_{ac}\, j_b\, ; j_d \mid j_c\, (j_a\, j_b)\, j_{ab}\, ; j_d\, \rangle. \tag{3B-73}$$

Coefficients 9-j

(A) Définition

Ils sont définis à partir des coefficients de recouplage par :

$$\langle\, (j_a j_b)\, j_{ab}\, (j_c j_d)\, j_{cd}\, ; j \mid (j_a j_c)\, j_{ac}\, (j_b j_d)\, j_{bd}\, ; j\, \rangle = \\ \sqrt{(2j_{ab}+1)\,(2j_{cd}+1)\,(2j_{ac}+1)\,(2j_{bd}+1)} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j_d & j_{cd} \\ j_{ac} & j_{bd} & j \end{Bmatrix} \cdot \tag{3B-74}$$

(B) Relations de symétrie

Le coefficient *9-j* est invariant lorsqu'on échange les lignes et les colonnes (symétrie par rapport à une diagonale) ou lorsqu'on effectue une permutation circulaire des lignes ou des colonnes. Ce coefficient est multiplié par $(-1)^s$ où $s = j_a + j_b + j_{ab} + j_c + j_d + j_{cd} + j_{ac} + j_{bd} + j$ lorsqu'on permute deux lignes ou deux colonnes.

(C) Relation d'orthogonalité

$$\sum_{j_{ab}\, j_{cd}} (2j_{ab}+1)\,(2j_{cd}+1) \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j_d & j_{cd} \\ j_{ac} & j_{bd} & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & j_{ab} \\ j_c & j_d & j_{cd} \\ j'_{ac} & j'_{bd} & j \end{Bmatrix} = \\ \frac{\delta_{j'_{ac}\, j_{ac}}\, \delta_{j'_{bd}\, j_{bd}}}{(2j_{ac}+1)\,(2j_{bd}+1)} \cdot \tag{3B-75}$$

(D) Règle de somme

$$\sum_{j\, k} (-1)^{2e+k-f-h}\, (2j+1)\,(2k+1) \begin{Bmatrix} a & b & c \\ e & d & f \\ j & k & i \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} a & e & j \\ d & b & k \\ g & h & i \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{Bmatrix} \cdot \tag{3B-76}$$

(E) Contraction de coefficients de Racah

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{Bmatrix} = \sum_k (2k+1)\, W(aidh;kg)\, W(bfhd;ke)\, W(aibf;kc) \tag{3B-77}$$

$$\sum_c (2c+1)\, W(aibf;kc) \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{Bmatrix} = W(aidh;kg)\, W(bfhd;ke) \tag{3B-78}$$

$$\sum_{c\,e} (2c{+}1)\,(2e{+}1)\, W(aibf;kc)\, W(bfhd;ke) \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{Bmatrix} = W(aidh;kg) \tag{3B-79}$$

$$W(ghjk;il) \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{Bmatrix} = \sum_{s\,t} (2s+1)\,(2t+1)\, W(cfjk;is) \times W(desk;ft)\, W(belk;ht) \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & t & s \\ g & l & j \end{Bmatrix} \cdot \tag{3B-80}$$

(F) Valeur particulière

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & 0 \end{Bmatrix} = \frac{\delta_{c\,f}\, \delta_{g\,h}\, (-1)^{c+g-a-e}}{\sqrt{(2c+1)\,(2g+1)}}\; W(abde;cg). \tag{3B-81}$$

Opérateur tensoriel irréductible

Nous avons introduit dans le chapitre 1 la notion d'opérateur tensoriel irréductible. Ici, nous allons établir certaines propriétés de ces opérateurs qui sont très utiles en particulier dans le calcul de certaines grandeurs physiques dans différents problèmes de mécanique quantique.

1. Opérateurs vectoriels

Nous avons vu dans le chapitre 1 comment se transforment les composantes d'un opérateur vectoriel. Dans ce chapitre nous allons voir comment ces lois de transformation peuvent se traduire par des relations de commutation avec l'opérateur moment cinétique $\mathbf{J}$.

Considérons une rotation infinitésimale $\mathrm{d}\gamma$ autour de l'axe Oz. Par définition, nous avons :

$$\hat{V}_x \rightarrow \hat{R}_\mathrm{p}\, \hat{V}_x\, \hat{R}_\mathrm{p}{}^\dagger = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, J_z}\, \hat{V}_x\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, J_z}. \tag{4-1}$$

Un développement au premier ordre donne :

$$\begin{aligned}\hat{R}_\mathrm{p}\, \hat{V}_x\, \hat{R}_\mathrm{p}{}^\dagger &= \left(1 + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, J_z\right) \hat{V}_x \left(1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, J_z\right)\\ &= \hat{V}_x + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, [\, J_z, \hat{V}_x\,].\end{aligned} \tag{4-2}$$

Mais par définition

$$\hat{V}_n = \hat{\mathbf{V}} \cdot \mathbf{n} \tag{4-3}$$

avec $n_x = 1$, $n_y = n_z = 0$. La loi de transformation des observables vectorielles s'écrit aussi (1-55) :

$$\hat{V}_n \rightarrow \hat{\mathbf{V}} \cdot \mathbf{n}'$$

avec (1B-15a) :

$$\begin{pmatrix} n'_{x'} \\ n'_{y'} \\ n'_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mathrm{d}\gamma & 0 \\ -\mathrm{d}\gamma & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4-4}$$

ce qui donne :

$$\hat{V}_x \rightarrow \hat{V}_x - \mathrm{d}\gamma\, \hat{V}_y. \tag{4-5}$$

En égalant les relations (4-2) et (4-5), on a :

$$[\, J_z, \hat{V}_x \,] \;=\; i\hbar\, \hat{V}_y. \tag{4-6}$$

Dans la même rotation, nous aurons :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}\, \hat{V}_y\, \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger} \;=\; \hat{V}_y + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\; [\, J_z, \hat{V}_y \,] \tag{4-7}$$

et

$$\begin{pmatrix} n'_{x'} \\ n'_{y'} \\ n'_{z'} \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} 1 & \mathrm{d}\gamma & 0 \\ -\mathrm{d}\gamma & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4-8}$$

ce qui donne :

$$\hat{V}_y \;\rightarrow\; \hat{V}_y \;+\; \mathrm{d}\gamma\, \hat{V}_x \tag{4-9}$$

et qui conduit à la relation de commutation :

$$[\, J_z, \hat{V}_y \,] \;=\; -i\hbar\, \hat{V}_x. \tag{4-10}$$

Enfin, on peut montrer de la même façon que l'on a aussi :

$$[\, J_z, \hat{V}_z \,] \;=\; 0. \tag{4-11}$$

On peut généraliser les relations précédentes en considérant une rotation infinitésimale $\mathrm{d}\gamma$ autour de l'axe quelconque $\mathbf{u}$. On a alors ((1B-15a) et (1-13)) :

$$\begin{pmatrix} n'_{x'} \\ n'_{y'} \\ n'_{z'} \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} 1 & u_z\mathrm{d}\gamma & -u_y\mathrm{d}\gamma \\ -u_z\mathrm{d}\gamma & 1 & u_x\mathrm{d}\gamma \\ u_y\mathrm{d}\gamma & -u_x\mathrm{d}\gamma & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} \tag{4-12}$$

et :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n}' = {} & \hat{V}_x\, [\, n_x + \mathrm{d}\gamma\, (u_z n_y - u_y n_z)\,] \\ & +\hat{V}_y\, [\, n_y + \mathrm{d}\gamma\, (u_x n_z - u_z n_x)\,] \\ & +\hat{V}_z\, [\, n_z + \mathrm{d}\gamma\, (u_y n_x - u_x n_y)\,] \end{aligned} \tag{4-13}$$

ou encore sous forme vectorielle :

$$\hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n} \rightarrow\; \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n} \;+\; \mathrm{d}\gamma\, \hat{\mathbf{V}}\cdot(\mathbf{n}\wedge\mathbf{u}). \tag{4-14}$$

D'autre part :

$$\begin{aligned} \hat{R}_{\mathrm{p}}\; \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n}\, \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger} &= \left(1 + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\; \mathbf{J}\cdot\mathbf{u}\right)\; \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n}\; \left(1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\; \mathbf{J}\cdot\mathbf{u}\right) \\ &= \hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n} \;+\; \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, [\, (\mathbf{J}\cdot\mathbf{u}), (\,\hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n})\,] \qquad . \end{aligned} \tag{4-15}$$

Des relations (4-14) et (4-15), on déduit :

$$[\, (\mathbf{J}\cdot\mathbf{u}), (\,\hat{\mathbf{V}}\cdot\mathbf{n})\,] \;=\; i\hbar\, \hat{\mathbf{V}}\cdot(\mathbf{u}\wedge\mathbf{n}) \qquad . \tag{4-16}$$

En particulier, si dans cette dernière relation on remplace $\hat{\mathbf{V}}$ par $\mathbf{J}$, on retrouve les relations de commutation caractéristiques du moment cinétique.

2. Définition de Racah des opérateurs tensoriels irréductibles

Par définition, nous avons :

$$T_m^l \to \hat{R}_\mathrm{p}\, T_m^l\, \hat{R}_\mathrm{p}^{\dagger} = \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid \hat{R}_\mathrm{p} \mid l\, m\,\rangle\, T_{m'}^l \qquad . \tag{4-17}$$

Considérons une rotation infinitésimale $\mathrm{d}\gamma$ autour de l'axe Oz. L'opérateur quantique s'écrit $\hat{R}_\mathrm{p} = 1 + (i/\hbar)\mathrm{d}\gamma\, J_z$ et le membre de gauche de la relation (4-17) devient :

$$\hat{R}_\mathrm{p}\, T_m^l\, \hat{R}_\mathrm{p}^{\dagger} = T_m^l + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, [\, J_z, T_m^l\,] \qquad . \tag{4-18}$$

Le membre de droite s'écrit :

$$\sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid 1 + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, J_z \mid l\, m\,\rangle\, T_{m'}^l = T_m^l + im\mathrm{d}\gamma\, T_m^l$$

d'où :

$$[\, J_z, T_m^l\,] = m\hbar\, T_m^l \qquad . \tag{4-19}$$

Considérons maintenant deux rotations infinitésimales $\mathrm{d}\gamma$ autour de l'axe Ox d'une part et autour de l'axe Oy d'autre part. On aura respectivement les relations :

$$T_m^l + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, [\, J_x, T_m^l\,] = T_m^l + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid J_x \mid l\, m\,\rangle\, T_{m'}^l$$
$$T_m^l + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma\, [\, J_y, T_m^l\,] = T_m^l + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\gamma \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid J_y \mid l\, m\,\rangle\, T_{m'}^l$$

c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} [\, J_x, T_m^l\,] &= \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid J_x \mid l\, m\,\rangle\, T_{m'}^l \\ [\, J_y, T_m^l\,] &= \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid J_y \mid l\, m\,\rangle\, T_{m'}^l \qquad . \end{aligned} \tag{4-20}$$

En posant :

$$\begin{aligned} J_+ &= J_x + i\, J_y \\ J_- &= J_x - i\, J_y \end{aligned} \tag{4-21}$$

on a :

$$\begin{aligned} [\, J_+, T_m^l\,] &= \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid J_+ \mid l\, m\,\rangle\, T_{m'}^l \\ [\, J_-, T_m^l\,] &= \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid J_- \mid l\, m\,\rangle\, T_{m'}^l \qquad . \end{aligned} \tag{4-22}$$

Les opérateurs J_+ et J_- vérifient de plus les relations :

$$\begin{aligned} J_+ \mid l\, m \rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \mid l\, m+1 \rangle \\ J_- \mid l\, m \rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \mid l\, m-1 \rangle \end{aligned} \tag{4-23}$$

ce qui entraîne finalement :

$$\begin{aligned} [\, J_+ \,,\, T^l_m \,] &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\, T^l_{m+1} \\ [\, J_- \,,\, T^l_m \,] &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\, T^l_{m-1} \qquad . \end{aligned} \tag{4-24}$$

Remarque. L'égalité (4-20) s'écrit encore :

$$\begin{aligned} [\, J_x, T^l_m \,] &= \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid J_x \mid l\, m \,\rangle\, T^l_{m'} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid (\, J_+ + J_- \,) \mid l\, m \,\rangle\, T^l_{m'} \\ &= \frac{1}{2} (\, \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\, T^l_{m+1} + \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\, T^l_{m-1} \,) \end{aligned} \tag{4-25a}$$

$$\begin{aligned} [\, J_y, T^l_m \,] &= \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid J_y \mid l\, m \,\rangle\, T^l_{m'} \\ &= \frac{1}{2\,i} \sum_{m'} \langle\, l\, m' \mid (\, J_+ - J_- \,) \mid l\, m \,\rangle\, T^l_{m'} \\ &= \frac{1}{2\,i} \left(\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\, T^l_{m+1} - \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\, T^l_{m-1} \right) . \end{aligned} \tag{4-25b}$$

Si on considère maintenant la rotation autour de l'axe Ox uniquement, la relation (1C-67a) permet d'écrire :

$$\begin{aligned} & T^l_m + \frac{i}{\hbar} \mathrm{d}\gamma\, [\, J_x, T^l_m \,] = (-1)^{2j} \sum_{m'} \mathrm{e}^{\frac{i\pi}{2}\,(m'+3m)}\, \langle\, l\, m' \mid 1 + \frac{i \mathrm{d}\gamma}{\hbar} J_y \mid l\, m \,\rangle\, T^l_{m'} \\ & = (-1)^{2j} \left\{ \mathrm{e}^{i\, 2\pi\, m}\, T^l_m \,+\, \frac{\mathrm{d}\gamma}{2\,\hbar} \sum_{m'} \mathrm{e}^{\frac{i\pi}{2}\,(m'+3m)}\, \langle\, l\, m' \mid (\, J_+ - J_- \,) \mid l\, m \,\rangle\, T^l_{m'} \right\} \\ & = \mathrm{e}^{i\,\pi\,(2m+2j)} \left[T^l_m \,+\, \frac{i\, \mathrm{d}\gamma}{2\,\hbar} \left(\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\, T^l_{m+1} \right.\right. \\ & \quad \left.\left. +\, \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\, T^l_{m-1} \right) \right] \\ & = T^l_m \,+\, \frac{i\, \mathrm{d}\gamma}{2\,\hbar} \left(\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\, T^l_{m+1} + \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\, T^l_{m-1} \right) \end{aligned} \tag{4-26}$$

on retrouve bien la relation (4-25a).

3. Théorème de Wigner-Eckart

Considérons l'action d'un opérateur tensoriel irréductible $\mathbf{T}^k$ de composantes T_q^k sur un état propre de $\mathbf{J}^2$ et J_z :

$$\begin{aligned}
T_q^k \mid \alpha\, j\, m\,\rangle &= \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}\hat{R}_{\mathrm{p}}T_q^k\hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}\hat{R}_{\mathrm{p}} \mid \alpha\, j\, m\,\rangle \\
&= \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}\,(\hat{R}_{\mathrm{p}}T_q^k\hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}\,)\,\hat{R}_{\mathrm{p}} \mid \alpha\, j\, m\,\rangle \\
&= \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}\textstyle\sum_{m'\,q'}\,\mathcal{D}^{(k)}_{q'\,q}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;\;T^k_{q'} \mid \alpha\, j\, m'\,\rangle \\
&= \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}\textstyle\sum_{m'\,q'\,j'',\,\underline{m}',\,m''}\langle k\,q'\,j\,m' \mid j''\,\underline{m}'\rangle\,\langle k\,q\,j\,m \mid j''\,m''\rangle \\
&\qquad\qquad\times\mathcal{D}^{(j'')}_{\underline{m}'\,m''}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;\;T^k_{q'} \mid \alpha\, j\, m'\,\rangle \\
&= \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}\textstyle\sum_{j'',\,\underline{m}',\,m''}\langle k\,q\,j\,m \mid j''\,m''\rangle\,\mathcal{D}^{(j'')}_{\underline{m}'\,m''}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\,[\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle]^{j''}_{\underline{m}'}\rangle
\end{aligned} \tag{4-27}$$

l'avant dernière ligne étant obtenue en utilisant la relation (3-30) et en définissant dans la dernière ligne :

$$[\,\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle\,]^{j''}_{\underline{m}'}\,\rangle \;=\; \sum_{m'\,q'}\langle k\,q'\,j\,m' \mid j''\,\underline{m}'\rangle\;\;T^k_{q'} \mid \alpha\, j\, m'\,\rangle. \tag{4-28a}$$

On peut poser aussi :

$$[\,\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle\,]^{j''}_{\underline{m}'}\,\rangle \;=\mid\alpha''j''\;\underline{m}'\,\rangle \tag{4-28b}$$

ce qui entraîne :

$$\begin{aligned}
\hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}[\,\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle\,]^{j''}_{\underline{m}'}\,\rangle &= \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger}\;\mid\alpha''j''\;\underline{m}'\,\rangle \\
&= \textstyle\sum_{\underline{m}''}\mathcal{D}^{(j'')}_{\underline{m}'\,\underline{m}''}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)^{*}\;\mid\alpha''j''\;\underline{m}''\,\rangle \\
&= \textstyle\sum_{\underline{m}''}\mathcal{D}^{(j'')}_{\underline{m}'\,\underline{m}''}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)^{*}\;[\,\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle\,]^{j''}_{\underline{m}''}\,\rangle
\end{aligned}$$

relation obtenue à l'aide de (1C-52). L'égalité (4-27) devient alors :

$$\begin{aligned}
T_q^k \mid \alpha\, j\, m\,\rangle = &\sum_{j'',\,\underline{m}',\,m''\underline{m}''}\langle k\,q\,j\,m \mid j''\,m''\rangle \\
&\qquad\times\mathcal{D}^{(j'')}_{\underline{m}'\,m''}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;\;\mathcal{D}^{(j'')}_{\underline{m}'\,\underline{m}''}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)^{*}\;[\,\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle\,]^{j''}_{\underline{m}''}\,\rangle.
\end{aligned}$$

La sommation sur $\underline{m}'$ et la relation (1C-53) conduisent à l'expression cherchée :

$$T_q^k \mid \alpha\, j\, m\,\rangle \;=\; \sum_{j''\,m''}\langle k\,q\,j\,m \mid j''\,m''\rangle\;\mid[\,\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle\,]^{j''}_{m''}\,\rangle. \tag{4-29}$$

On peut alors calculer l'élément de matrice :

$$\begin{aligned}
\langle\,\alpha'j'\,m'\mid T_q^k\mid\alpha\,j\,m\,\rangle &= \sum_{j''\,m''}\langle k\,q\,j\,m \mid j''\,m''\rangle\,\langle\,\alpha'j'\,m'\mid[\,\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle\,]^{j''}_{m''}\,\rangle \\
&= \langle k\,q\,j\,m \mid j'\,m'\rangle\,\langle\,\alpha'j'\,m'\mid[\,\mathbf{T}^k\otimes\mid\alpha\,j\,\rangle\,]^{j'}_{m'}\,\rangle \\
&= \langle k\,q\,j\,m \mid j'\,m'\rangle\;A(\alpha',j',k,\alpha\,,j,m').
\end{aligned} \tag{4-30}$$

Nous allons montrer que la fonction $A(\alpha', j', k, \alpha\,, j, m')$ est indépendante de m'. Nous supposons que $m' < j$ et calculons $A(\alpha', j', k, \alpha\,, j, m'+1)$:

$$A(\alpha', j', k, \alpha\,, j, m'+1) \;=\; \langle\, \alpha' j'\, m'+1 \;|\; [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle\,]^{j'}_{m'+1}\,\rangle. \tag{4-31}$$

Mais on a :

$$\begin{aligned} J_+ \;|\; \alpha' j'\, m'\,\rangle &= \hbar\sqrt{j'(j'+1) - m'(m'+1)}\;\;|\; \alpha' j'\, m'+1\,\rangle \\ J_+ \;|\; [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle]^{j'}_{m'}\,\rangle &= \hbar\sqrt{j'(j'+1) - m'(m'+1)}\;\;|\; [\mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha' j\,\rangle]^{j'}_{m'+1}\,\rangle \end{aligned} \tag{4-32a}$$

et :

$$\langle\, \alpha' j'\, m' \;|\; J_- \;=\; \hbar\sqrt{j'(j'+1) - m'(m'+1)}\;\langle\, \alpha' j'\, m'+1 \;| \tag{4-32b}$$

d'où :

$$\begin{aligned} &\langle\, \alpha' j'\, m' \;|\, J_-\, J_+ \,|\; [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle\,]^{j'}_{m'}\,\rangle = \\ &\qquad\qquad \hbar^2\,(\, j'(j'+1) - m'(m'+1)\,)\; A(\alpha', j', k, \alpha\,, j, m'+1). \end{aligned} \tag{4-33}$$

Mais d'après (3-7), on a aussi :

$$\begin{aligned} &\langle\, \alpha' j'\, m' \;|\, J_-\, J_+ \,|\; [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle\,]^{j'}_{m'}\,\rangle = \\ &\qquad\qquad \hbar^2\,(\, j'(j'+1) - m'(m'+1)\,)\; A(\alpha', j', k, \alpha\,, j, m'). \end{aligned} \tag{4-34}$$

L'égalité entre (4-33) et (4-34) donne donc :

$$A(\alpha', j', k, \alpha\,, j, m'+1) \;=\; A(\alpha', j', k, \alpha\,, j, m'). \tag{4-35}$$

Lorsque $m' = j$, on peut calculer $A(\alpha', j', k', \alpha\,, j, m'-1)$ et montrer que

$$A(\alpha', j', k', \alpha\,, j, m'-1) = A(\alpha', j', k', \alpha\,, j, m')$$

ce qui entraîne :

$$\begin{aligned} \langle\, \alpha' j'\, m'+1 \;|\, [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle\,]^{j'}_{m'+1}\,\rangle &= \langle\, \alpha' j'\, m'-1 \;|\, [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle\,]^{j'}_{m'-1}\,\rangle \\ &= \langle\, \alpha' j'\, m' \;|\, [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle\,]^{j'}_{m'}\,\rangle \\ &= \langle\, \alpha' j' \;|\, [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle\,]\, j'\,\rangle. \end{aligned} \tag{4-36a}$$

Finalement, en définissant l'élément de matrice *réduit* par :

$$\langle\, \alpha' j' \;||\; \mathbf{T}^k \;||\; \alpha\, j\,\rangle \equiv \langle\, \alpha' j' \;|\, [\, \mathbf{T}^k \otimes |\; \alpha\, j\,\rangle\,]\, j'\,\rangle \tag{4-36b}$$

le théorème de Wigner-Eckart s'écrit :

$$\langle\, \alpha' j'\, m' \;|\, T^k_q \,|\; \alpha\, j\, m\rangle \;=\; \langle k\, q\, j\, m \;|\; j'\, m'\rangle\,\langle\, \alpha' j' \;||\; \mathbf{T}^k \;||\; \alpha\, j\,\rangle. \tag{4-37}$$

L'élément de matrice réduit a la propriété intéressante d'être indépendant des indices magnétiques et par conséquent sa valeur numérique est indépendante du système d'axes. Elle ne dépend que de la nature intrinsèque des fonctions d'onde et de l'opérateur tensoriel irréductible.

Cette relation (4-37) peut être déduite directement en utilisant l'invariance de l'amplitude de probabilité dans une rotation quelconque :

$$\langle \alpha' j' m' \mid T^k_q \mid \alpha j m \rangle = \langle \alpha' j' m' \mid \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger} \hat{R}_{\mathrm{p}} T^k_q \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger} \hat{R}_{\mathrm{p}} \mid \alpha j m \rangle$$
$$= \sum_{\overline{m}'\,\overline{q}\,\overline{m}} \mathcal{D}^{(j')}_{\overline{m}'\,m'}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)^{*}\, \mathcal{D}^{(k)}_{\overline{q}\,q}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\, \mathcal{D}^{(j)}_{\overline{m}\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\, \langle \alpha' j' \overline{m}' \mid T^k_{\overline{q}} \mid \alpha j \overline{m} \rangle. \quad (4\text{-}38)$$

On peut alors utiliser la propriété (3-30) que nous écrivons ici :

$$\mathcal{D}^{(k)}_{\overline{q}\,q}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\, \mathcal{D}^{(j)}_{\overline{m}\,m}(\mathrm{P}\,;\gamma_i) = \sum_{j''\,\overline{m}''\,m''} \langle k\,\overline{q}\,j\,\overline{m} \mid j''\,\overline{m}'' \rangle\, \langle k\,q\,j\,m \mid j''\,m'' \rangle\, \mathcal{D}^{(j'')}_{\overline{m}''\,m''}(\mathrm{P}\,;\gamma_i). \quad (4\text{-}39)$$

Intégrons sur $d\gamma_i$ les deux membres de (4-38). En utilisant (3-48) et (1C-57), on trouve :

$$\langle \alpha' j' m' \mid T^k_q \mid \alpha j m \rangle = \langle k\,q\,j\,m \mid j'\,m' \rangle \times \left[\frac{1}{2j'+1} \sum_{\overline{m}'\,\overline{q}\,\overline{m}} \langle k\,\overline{q}\,j\,\overline{m} \mid j'\,\overline{m}' \rangle\, \langle \alpha' j' \overline{m}' \mid T^k_{\overline{q}} \mid \alpha j \overline{m} \rangle \right]. \quad (4\text{-}40)$$

Le terme entre crochet ne dépend que de $\alpha'\, j'\, k, \alpha'\, j$. On retrouve le résultat donné par (4-37).

Exemples. Dans les exemples que nous choisirons pour illustrer le théorème de Wigner-Eckart, nous poserons pour simplifier $\hbar = 1$.

Exemple 1. L'opérateur vectoriel $\mathbf{J}$ a la troisième composante cartésienne J_z confondue avec la composante standard J_0. En conséquence, on a :

$$\begin{aligned} \langle j' m' \mid J_0 \mid j m \rangle &= m\, \delta_{j\,j'}\, \delta_{m\,m'} \\ &= \langle 1\,0\,j\,m \mid j'\,m' \rangle \langle j' \mid\mid \mathbf{J} \mid\mid j \rangle. \end{aligned}$$

En général le coefficient de Clebsch-Gordan n'est pas nul si j et j' sont différents. Il faut donc que l'élément de matrice réduit soit proportionnel à $\delta_{j\,j'}$. La valeur particulière du C.G

$$\langle 1\,0\,j\,m \mid j\,m \rangle = \frac{-m}{\sqrt{j(j+1)}} \quad (4\text{-}41)$$

conduit finalement à :

$$\langle \alpha' j' \mid\mid \mathbf{J} \mid\mid \alpha j \rangle = -\delta_{j'\,j}\, \delta_{\alpha'\,\alpha}\, \sqrt{j(j+1)}. \quad (4\text{-}42)$$

Cas particuliers :

$$\langle 1/2 \ || \, \mathbf{S} \, || \ 1/2 \rangle = -\sqrt{3/4} \tag{4-43a}$$

$$\langle 1/2 \ || \, \boldsymbol{\sigma} \, || \ 1/2 \rangle = -\sqrt{3} \tag{4-43b}$$

$$\langle 1 \ || \, \mathbf{S} \, || \ 1 \rangle = -\sqrt{2} \tag{4-43c}$$

la relation (4-43b) étant obtenue en utilisant $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbf{S}$ pour une particule de spin $s = 1/2$.

Exemple 2. On se propose de donner l'élément de matrice réduit de trois harmoniques sphériques de mêmes arguments. Par définition, nous avons :

$$\begin{aligned}
\langle l' \, m' \mid Y_q^k \mid l \, m \rangle &= \int Y_{l'}^{m'}(\vartheta , \varphi)^* \, Y_q^k(\vartheta , \varphi) \, Y_l^m(\vartheta , \varphi) \ \sin\vartheta \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\varphi \\
&= \langle k \, q \, l \, m \mid l' \, m' \rangle \, \langle l' \ || \, \mathbf{Y}^k \, || \ l \rangle \\
&= \langle k \, q \, l \, m \mid l' \, m' \rangle \sqrt{\frac{(2k+1)(2l+1)}{4\pi(2l'+1)}} \, \langle k \, 0 \, l \, 0 \mid l' \, 0 \rangle
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé (3-31). L'élément de matrice réduit est donc donné par :

$$\langle l' \ || \, \mathbf{Y}^k \, || \ l \rangle = \sqrt{\frac{(2k+1)(2l+1)}{4\pi(2l'+1)}} \, \langle k \, 0 \, l \, 0 \mid l' \, 0 \rangle. \tag{4-44}$$

Exemple 3 : Opérateur identité. L'élément de matrice réduit a une expression particulièrement simple :

$$\begin{aligned}
\langle \alpha' \, j' \, m' \mid \mathbf{1} \mid \alpha \, j \, m \rangle &= \delta_{\alpha \, \alpha'} \, \delta_{j \, j'} \, \delta_{m \, m'} \\
&= \langle 0 \, 0 \, j \, m \mid j' \, m' \rangle \, \langle \alpha' \, j' \ || \, \mathbf{1} \, || \ \alpha \, j \rangle
\end{aligned}$$

ce qui entraîne :

$$\langle \alpha' \, j' \ || \, \mathbf{1} \, || \ \alpha \, j \rangle = \delta_{\alpha \, \alpha'} \, \delta_{j \, j'}. \tag{4-45}$$

4. Opérateur adjoint de T^{k}

Par définition des composantes d'un opérateur tensoriel irréductible, on a (1-60a) :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}} \, T_q^k \, \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger} = \sum_{q'=-k}^{k} \mathcal{D}_{q' \, q}^{(k)}(\mathrm{P} \, ; \gamma_i) \, T'^{\,k}_{q'} \quad . \tag{4-46}$$

En prenant l'équation adjointe et utilisant la propriété :

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C})^{\dagger} = \hat{C}^{\dagger}\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$$

il vient :

$$\begin{aligned}\hat{R}_{\mathrm{p}}\, T_q^{k\,\dagger}\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} &= \textstyle\sum_{q'=-k}^{k} \mathcal{D}_{q'\,q}^{(k)}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)^{*}\; T'^{\,k\,\dagger}_{q'} \\ &= \textstyle\sum_{q'=-k}^{k} (-1)^{q-q'}\; \mathcal{D}_{-q'\,-q}^{(k)}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\, T'^{\,k\,\dagger}_{q'}\end{aligned}$$

la dernière égalité étant obtenue à l'aide de (1C-56).

En multipliant les deux membres par $(-1)^{-q}$ on obtient :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}\,\left((-1)^{-q}\, T_q^{k\,\dagger}\right)\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} = \sum_{q'=-k}^{k} \mathcal{D}_{-q'\,-q}^{(k)}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;(-1)^{-q'}\; T'^{\,k\,\dagger}_{q'} \qquad .$$

En changeant q en $-q$ et q' en $-q'$:

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}\,\left((-1)^{q}\, T_{-q}^{k\;\dagger}\right)\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} = \sum_{q'=-k}^{k} \mathcal{D}_{q'\,q}^{(k)}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\,(-1)^{q'}\; T'^{\,k\;\dagger}_{-q'} \tag{4-47a}$$

mais on sait que $k+q$, $k+q'$ sont entiers, d'où :

$$\begin{aligned}(-1)^{2k+2q} &= (-1)^{2k+2q'} \;=\; 1 \\ (-1)^{2q} &= (-1)^{2q'} \\ (-1)^{3q} &= (-1)^{-q} \\ (-1)^{3q'} &= (-1)^{-q'}\end{aligned}$$

et l'égalité (4-47a) peut encore s'écrire :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}\,\left((-1)^{-q}\, T_{-q}^{k\;\dagger}\right)\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} = \sum_{q'=-k}^{k} \mathcal{D}_{q'\,q}^{(k)}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\;(-1)^{-q'}\; T'^{\,k\;\dagger}_{-q'} \qquad . \tag{4-47b}$$

On peut alors définir l'opérateur adjoint de $\mathbf{T}^k$ par $\widetilde{\mathbf{T}}^k$ tout opérateur dont les composantes sont de la forme :

$$\widetilde{T}_q^k \;=\; \varphi(k)\;(-1)^{\epsilon\, q}\; T_{-q}^{k\;\dagger} \tag{4-48}$$

avec $\epsilon \;=\; \pm 1$ et $\varphi(k)$ étant une phase quelconque dépendant de k. Ces composantes se transforment alors suivant la loi :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}\, \widetilde{T}_q^k\, \hat{R}_{\mathrm{p}}^{\;\dagger} \;=\; \sum_{q'=-k}^{k} \mathcal{D}_{q'\,q}^{(k)}(\mathrm{P}\,;\gamma_i)\, \widetilde{T}'^{\,k}_{q'} \qquad . \tag{4-49}$$

Par convention, nous définirons $\widetilde{\mathbf{T}}^k$ par :

$$\widetilde{T}_q^k \;=\; (-1)^{\,k+q}\;\; T_{-q}^{k\;\dagger} \qquad . \tag{4-50}$$

Cet opérateur obéit au théorème de Wigner-Eckart et l'élément de matrice réduit s'exprime en fonction de celui de $\mathbf{T}^k$:

$$\begin{aligned}\langle \alpha' j' m' \mid \widetilde{T}^k_q \mid \alpha j m \rangle &= (-1)^{k+q} \langle \alpha' j' m' \mid T^{k\,\dagger}_{-q} \mid \alpha j m \rangle \\ &= (-1)^{k+q} \langle \alpha j m \mid T^{k}_{-q} \mid \alpha' j' m' \rangle^* \\ &= (-1)^{k+q} \langle k -q\, j' m' \mid j m \rangle \langle \alpha j \parallel \mathbf{T}^k \parallel \alpha' j' \rangle^* \\ &= \langle k\, q\, j\, m \mid j' m' \rangle \\ &\quad \times (-1)^{k+j-j'} \sqrt{\frac{2j+1}{2j'+1}} \langle \alpha j \parallel \mathbf{T}^k \parallel \alpha' j' \rangle^* \\ &= \langle k\, q\, j\, m \mid j' m' \rangle \langle \alpha' j' \parallel \widetilde{\mathbf{T}}^k \parallel \alpha j \rangle \end{aligned} \tag{4-51}$$

ce qui donne la relation suivante :

$$\langle \alpha' j' \parallel \widetilde{\mathbf{T}}^k \parallel \alpha j \rangle = (-1)^{k+j-j'} \sqrt{\frac{2j+1}{2j'+1}} \langle \alpha j \parallel \mathbf{T}^k \parallel \alpha' j' \rangle^* \quad . \tag{4-52}$$

Exemple. La définition (4-50) entraîne :

$$\widetilde{Y}^q_k(\vartheta, \varphi) = (-1)^{k+q}\, Y^{-q\,*}_k(\vartheta, \varphi) = (-1)^k\, Y^q_k(\vartheta, \varphi) \quad . \tag{4-53}$$

D'après (4-44) et (4-53) :

$$\langle l' \parallel \widetilde{\mathbf{Y}}^k \parallel l \rangle = (-1)^k \sqrt{\frac{(2k+1)(2l+1)}{4\pi(2l'+1)}}\, \langle k\, 0\, l\, 0 \mid l'\, 0 \rangle \quad . \tag{4-54}$$

En utilisant (3A-25) et (3A-30), on trouve que ce résultat est en accord avec (4-52) puisque

$$\langle k\, 0\, l\, 0 \mid l'\, 0 \rangle = (-1)^k \sqrt{\frac{2l'+1}{2l+1}}\, \langle k\, 0\, l'\, 0 \mid l\, 0 \rangle$$

et $k + l - l'$ est pair.

5. Produit tensoriel d'opérateurs tensoriels irréductibles

5.1. Définition

De même que l'on peut coupler à un moment angulaire total donné deux kets portant chacun un moment angulaire bien défini, on peut coupler les opérateurs tensoriels irréductibles $\mathbf{T}^{k_t}$ et $\mathbf{U}^{k_u}$ pour donner l'opérateur tensoriel irréductible $\mathbf{V}^k$:

$$\mathbf{V}^k \equiv \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u} \right]^k \tag{4-55}$$

dont les composantes sont données par :

$$V_q^k = \sum_{q_t\, q_u} \langle k_t\, q_t\, k_u\, q_u \mid k\, q\rangle\, T_{q_t}^{k_t}\, U_{q_u}^{k_u} \quad . \tag{4-56}$$

Les opérateurs $\mathbf{T}^{k_t}$ et $\mathbf{U}^{k_u}$ peuvent agir dans le même espace ou dans deux espaces différents. La loi de transformation de $\mathbf{V}^k$ est uniquement donnée par les coefficients de Clebsch-Gordan.

Exemple 1 : Opérateur scalaire. Lorsque $k_t = k_u$, on peut construire l'opérateur d'ordre 0 :

$$\begin{aligned} V_0^0 &= \sum_{q_t\, q_u} \langle k_t\, q_t\, k_u\, q_u \mid 0\, 0\rangle\, T_{q_t}^{k_t}\, U_{q_u}^{k_u} \\ &= \delta_{k_t\, k_u}\, \delta_{k_t\, k} \frac{1}{\sqrt{2k+1}} \sum_q (-1)^{k-q}\, T_q^k\, U_{-q}^k \end{aligned}$$

ou finalement :

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{T}^k \otimes \mathbf{U}^k\right]_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{2k+1}} \sum_q (-1)^{k-q}\, T_q^k\, U_{-q}^k \\ &= \frac{1}{\sqrt{2k+1}} \sum_q (-1)^{k+q}\, T_{-q}^k\, U_q^k \quad . \end{aligned} \tag{4-57}$$

On définit le produit scalaire de deux opérateurs par :

$$\mathbf{T}^k \cdot \mathbf{U}^k = \sum_q (-1)^{-q}\, T_q^k\, U_{-q}^k = \sum_q (-1)^q\, T_{-q}^k\, U_q^k \tag{4-58}$$

ce qui donne :

$$\mathbf{T}^k \cdot \mathbf{U}^k = (-1)^k \sqrt{2k+1}\, \left[\mathbf{T}^k \otimes \mathbf{U}^k\right]_0^0 \quad . \tag{4-59}$$

Lorsque $k = 1$, ce produit scalaire correspond au produit scalaire habituel de 2 opérateurs vectoriels :

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^1 \cdot \mathbf{U}^1 &= T_0^0\, U_0^0 - (T_1^1\, U_{-1}^1 + T_{-1}^1\, U_1^1) \\ &= T_x U_x + T_y U_y + T_z U_z. \end{aligned} \tag{4-60}$$

La construction de tels opérateurs est très importante en mécanique quantique car tout opérateur scalaire est invariant par rotation :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}\, V_0^0\, \hat{R}_{\mathrm{p}}{}^{\dagger} = V_0^0 \tag{4-61}$$

ce qui entraîne :

$$\hat{R}_{\mathrm{p}}\, V_0^0 = V_0^0\, \hat{R}_{\mathrm{p}}. \tag{4-62}$$

En considérant une rotation infinitésimale d'un angle dγ autour d'un axe quelconque, on voit qu'une observable scalaire (ou un opérateur tensoriel d'ordre 0) possède la propriété de commuter avec n'importe laquelle des composantes du moment cinétique :

$$\left(1 + \frac{i}{\hbar} \, \mathrm{d}\gamma \; \mathbf{J} \cdot \mathbf{u} \right) \, V_0^0 \;=\; V_0^0 \, \left(1 + \frac{i}{\hbar} \, \mathrm{d}\gamma \; \mathbf{J} \cdot \mathbf{u} \right)$$

d'où :

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{u} \, V_0^0 \;=\; V_0^0 \, \mathbf{J} \cdot \mathbf{u} \qquad . \tag{4-63}$$

En particulier l'invariance de l'hamiltonien du système garantit que les équations du mouvement sont invariantes par rotation.

Exemple 2 : Harmoniques sphériques de mêmes arguments. Si on couple deux harmoniques sphériques de mêmes arguments $Y_{k'}(\vartheta,\varphi)$ et $Y_{k''}(\vartheta,\varphi)$ à un moment angulaire k et sa projection q, on s'attend à trouver une fonction proportionnelle à $Y_k^q(\vartheta,\varphi)$. D'après la définition (4-56) et les propriétés (3-31) et (3-20), on a :

$$\left[\, Y_{k'}(\vartheta,\varphi) \otimes Y_{k''}(\vartheta,\varphi) \,\right]_q^k \;=\; \sqrt{\frac{(2k'+1)(2k''+1)}{4\pi(2k+1)}} \; \langle k^{'} \, 0 \, k^{''} \, 0 \;|\; k \, 0 \rangle \; Y_k^q(\vartheta,\varphi) \qquad . \tag{4-64}$$

5.2. Élément de matrice réduit

Connaissant les éléments de matrice réduits des opérateurs $\mathbf{T}^{k_t}$ et $\mathbf{U}^{k_u}$, on peut calculer ceux de $\mathbf{V}^k$. Il faut cependant distinguer deux cas selon que les opérateurs agissent dans le même espace de Hilbert ou non.

Les opérateurs agissent dans le même espace

On est amené dans ce cas à calculer une expression du type :

$$\begin{aligned} &\langle \, \alpha'' \, j'' \, m'' \;|\; \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u} \right]_q^k \;|\; \alpha \; j \, m \, \rangle = \\ &\qquad \sum_{q_t \, q_u} \langle k_t \, q_t \, k_u \, q_u \;|\; k \, q \rangle \, \langle \, \alpha'' \, j'' \, m'' \;|\; T_{q_t}^{k_t} \, U_{q_u}^{k_u} \;|\; \alpha \; j \, m \, \rangle \qquad . \end{aligned} \tag{4-65}$$

On injecte la relation de fermeture (3-13) :

$$\sum_{\alpha' \, j' \, m'} \;|\; \alpha' \, j' \, m' \, \rangle \langle \, \alpha' \, j' \, m' \;| = \; 1 \tag{4-66}$$

d'où :

$$\langle \alpha''\, j''\, m'' \mid \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u}\right]^k_q \mid \alpha\, j\, m \rangle = \sum_{q_t\, q_u} \sum_{\alpha'\, j'\, m'} \langle k_t\, q_t\, k_u\, q_u \mid k\, q \rangle$$
$$\times \langle \alpha''\, j''\, m'' \mid T^{k_t}_{q_t} \mid \alpha'\, j'\, m' \rangle \langle \alpha'\, j'\, m' \mid U^{k_u}_{q_u} \mid \alpha\, j\, m \rangle$$
$$= \sum_{q_t\, q_u} \sum_{\alpha'\, j'\, m'} \langle k_t\, q_t\, k_u\, q_u \mid k\, q \rangle \langle k_t\, q_t\, j'\, m' \mid j''\, m'' \rangle \langle k_u\, q_u\, j\, m \mid j'\, m' \rangle$$
$$\times \langle \alpha'' j'' \parallel \mathbf{T}^{k_t} \parallel \alpha'\, j' \rangle \langle \alpha' j' \parallel \mathbf{U}^{k_u} \parallel \alpha\, j \rangle$$
$$= \sum_{\alpha'\, j'} \langle k\, q\, j\, m \mid j''\, m'' \rangle \langle (k_t\, k_u)\, k\, j\,; j'' \mid k_t\, (k_u\, j)\, j'\,; j'' \rangle$$
$$\times \langle \alpha'' j'' \parallel \mathbf{T}^{k_t} \parallel \alpha'\, j' \rangle \langle \alpha' j' \parallel \mathbf{U}^{k_u} \parallel \alpha\, j \rangle \tag{4-67}$$

où nous avons utilisé la relation (3B-4).

On en déduit donc :

$$\langle \alpha''\, j''\, m'' \mid \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u}\right]^k_q \mid \alpha\, j\, m \rangle =$$
$$\langle k\, q\, j\, m \mid j''\, m'' \rangle \langle \alpha''\, j'' \parallel \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u}\right]^k \parallel \alpha\, j \rangle \tag{4-68}$$

avec :

$$\langle \alpha''\, j'' \parallel \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u}\right]^k \parallel \alpha\, j \rangle = \sum_{\alpha'\, j'} \langle (k_t\, k_u)\, k\, j\,; j'' \mid k_t\, (k_u\, j)\, j'\,; j'' \rangle$$
$$\times \langle \alpha'' j'' \parallel \mathbf{T}^{k_t} \parallel \alpha'\, j' \rangle \langle \alpha' j' \parallel \mathbf{U}^{k_u} \parallel \alpha\, j \rangle \tag{4-69a}$$

ou encore :

$$\langle \alpha''\, j'' \parallel \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u}\right]^k \parallel \alpha\, j \rangle = \sum_{\alpha'\, j'} \sqrt{(2k+1)\,(2j'+1)}\; W(k_t\, k_u\, j''\, j\,; k\, j')$$
$$\times \langle \alpha'' j'' \parallel \mathbf{T}^{k_t} \parallel \alpha'\, j' \rangle \langle \alpha' j' \parallel \mathbf{U}^{k_u} \parallel \alpha\, j \rangle \tag{4-69b}$$

$$\langle \alpha''\, j'' \parallel \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u}\right]^k \parallel \alpha\, j \rangle =$$
$$\sum_{\alpha'\, j'} U(k_t\, k_u\, j''\, j\,; k\, j') \langle \alpha'' j'' \parallel \mathbf{T}^{k_t} \parallel \alpha'\, j' \rangle \langle \alpha' j' \parallel \mathbf{U}^{k_u} \parallel \alpha\, j \rangle \tag{4-69c}$$

$$\langle \alpha''\, j'' \parallel \left[\mathbf{T}^{k_t} \otimes \mathbf{U}^{k_u}\right]^k \parallel \alpha\, j \rangle =$$
$$\sum_{\alpha'\, j'} (-1)^{k_t+k_u+j''+j} \sqrt{(2k+1)\,(2j'+1)} \begin{Bmatrix} k_t & k_u & k \\ j & j'' & j' \end{Bmatrix}$$
$$\times \langle \alpha'' j'' \parallel \mathbf{T}^{k_t} \parallel \alpha'\, j' \rangle \langle \alpha' j' \parallel \mathbf{U}^{k_u} \parallel \alpha\, j \rangle \quad . \tag{4-69d}$$

Exemple : Produit de deux harmoniques sphériques de mêmes arguments. Si on applique la relation ci-dessus au produit de deux harmoniques sphériques de mêmes arguments, on obtient :

$$\begin{aligned}
&\langle\, l'' \;||\; \big[\, \mathbf{Y}_{k'}(\vartheta,\varphi) \,\otimes\, \mathbf{Y}_{k''}(\vartheta,\varphi)\,\big]^{k} \;||\; l\,\rangle = \\
&\sum_{l'} \langle\,(k'\,k'')\,k\,l\,;l'' \mid k'\,(k''\,l)\,l'\,;l''\,\rangle \langle\, l'' \;||\; \mathbf{Y}^{k'} \;||\; l'\,\rangle\, \langle\, l' \;||\; \mathbf{Y}^{k''} \;||\; l\,\rangle \\
&= \frac{1}{4\pi}\sqrt{\frac{(2k'+1)(2k''+1)(2l+1)}{(2l''+1)}}\, \sum_{l'} \langle\,(k'\,k'')\,k\,l\,;l'' \mid k'\,(k''\,l)\,l'\,;l''\,\rangle \\
&\quad \times \langle k'\,0\,l'\,0 \mid l''\,0\rangle\, \langle k''\,0\,l\,0 \mid l'\,0\rangle. \qquad (4\text{-}70)
\end{aligned}$$

Si on applique maintenant la relation (3B-8), on trouve :

$$\begin{aligned}
&\langle\, l'' \;||\; \big[\, Y_{k'}(\vartheta,\varphi) \,\otimes\, Y_{k''}(\vartheta,\varphi)\,\big]^{k} \;||\; l\,\rangle \\
&\quad = \frac{1}{4\pi}\sqrt{\frac{(2k'+1)(2k''+1)(2l+1)}{(2l''+1)}}\, \langle k'\,0\,k''\,0 \mid k\,0\rangle\, \langle k\,0\,l\,0 \mid l''\,0\rangle. \qquad (4\text{-}71)
\end{aligned}$$

On aurait obtenu ce même résultat en utilisant la relation (4-64).

Les opérateurs agissent dans des espaces différents

L'élément de matrice que nous avons à calculer s'écrit typiquement :

$$\langle\, \alpha'_a\; \alpha'_b\; (\,j'_a\, j'_b\,)\, j'\, m' \mid \big[\, \mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\,\big]^{k}_{q} \mid \alpha_a\; \alpha_b\; (\,j_a\, j_b\,)\, j\, m\,\rangle.$$

On commence par coupler le produit des deux opérateurs par le ket en une somme de termes ayant un moment angulaire total donné :

$$\begin{aligned}
&\big[\, \mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\,\big]^{k}_{q} \mid \alpha_a\; \alpha_b\; (\,j_a\, j_b\,)\, j\, m\,\rangle = \\
&\qquad \sum_{j''\, m''} \langle k\, q\, j\, m \mid j''\, m''\rangle\, \Big\{\, \big[\, \mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\,\big]^{k} \mid \alpha_a\; \alpha_b\; (\,j_a\, j_b\,)\, j\,\rangle\, \Big\}^{j''}_{m''}. \qquad (4\text{-}72)
\end{aligned}$$

On sait d'après le chapitre 3 que le terme entre accolades peut être couplé différemment :

$$\begin{aligned}
&\Big\{\, \big[\, \mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\,\big]^{k} \mid \alpha_a\; \alpha_b\; (\,j_a\, j_b\,)\, j\,\rangle\, \Big\}^{j''}_{m''} = \\
&\qquad \sum_{j''_a\, j''_b} \langle\,(k_a j_a)\, j''_a\; (k_b j_b)\, j''_b\; ; j'' \mid (k_a k_b)\, k\; (j_a j_b)\, j\; ; j''\,\rangle \\
&\qquad\qquad \times \Big\{\, \big[\, \mathbf{T}^{k_a} \otimes \mid \alpha_a\; j_a\,\rangle\big]^{j''_a} \,\otimes\, \big[\, \mathbf{U}^{k_b} \otimes \mid \alpha_b\; j_b\,\rangle\big]^{j''_b}\Big\}^{j''}_{m''}. \qquad (4\text{-}73)
\end{aligned}$$

Mais :

$$\langle\, \alpha_a'\ \alpha_b'\ (j_a' j_b')\, j'\, m'\ |\ \left\{\, \left[\mathbf{T}^{k_a} \otimes |\ \alpha_a\ j_a\,\rangle\right]^{j_a''} \otimes \left[\mathbf{U}^{k_b} \otimes |\ \alpha_b\ j_b\,\rangle\right]^{j_b''} \right\}^{j''}_{m''} \rangle =$$

$$\delta_{j'\,j''}\ \delta_{m'\,m''} \sum_{m_a'\,m_b'\,m_a''\,m_b''} \langle j_a'\, m_a'\, j_b'\, m_b'\ |\ j'\, m'\rangle\, \langle j_a''\, m_a''\, j_b''\, m_b''\ |\ j'\, m'\rangle$$

$$\times\, \langle\, \alpha_a'\ j_a'\, m_a'\ |\ \left[\mathbf{T}^{k_a} \otimes |\ \alpha_a\ j_a\,\rangle\right]^{j_a''}_{m_a''} \rangle\, \langle\, \alpha_b'\ j_b'\, m_b'\ |\ \left[\mathbf{U}^{k_b} \otimes |\ \alpha_b\ j_b\,\rangle\right]^{j_b''}_{m_b''} \rangle$$

$$= \delta_{j'\,j''}\ \delta_{m'\,m''}\ \delta_{j_a'\,j_a''}\ \delta_{j_b'\,j_b''} \sum_{m_a'\,m_b'} \langle j_a'\, m_a'\, j_b'\, m_b'\ |\ j'\, m'\rangle\, \langle j_a'\, m_a'\, j_b'\, m_b'\ |\ j'\, m'\rangle$$

$$\times\, \langle\, \alpha_a'\ j_a'\ ||\ \mathbf{T}^{k_a}\ ||\ \alpha_a\ j_a\,\rangle\, \langle\, \alpha_b'\ j_b'\ ||\ \mathbf{U}^{k_b}\ ||\ \alpha_b\ j_b\,\rangle$$

$$= \delta_{j'\,j''}\ \delta_{m'\,m''}\ \delta_{j_a'\,j_a''}\ \delta_{j_b'\,j_b''}\ \langle\, \alpha_a'\ j_a'\ ||\ \mathbf{T}^{k_a}\ ||\ \alpha_a\ j_a\,\rangle\, \langle\, \alpha_b'\ j_b'\ ||\ \mathbf{U}^{k_b}\ ||\ \alpha_b\ j_b\,\rangle \tag{4-74}$$

où nous avons utilisé la relation (4-36b). On en déduit alors l'expression finale :

$$\langle\, \alpha_a'\ \alpha_b'\ (j_a' j_b')\, j'\, m'\ |\ \left[\mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\right]^k_q\ |\ \alpha_a\ \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\, m\,\rangle =$$

$$\langle k\, q\, j\, m\ |\ j'\, m'\rangle\, \langle\, \alpha_a'\ \alpha_b'\ (j_a' j_b')\, j'\ ||\ \left[\mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\right]^k\ ||\ \alpha_a\ \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\,\rangle \tag{4-75}$$

avec :

$$\langle\, \alpha_a'\ \alpha_b'\ (j_a' j_b')\, j'\ ||\ \left[\mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\right]^k\ ||\ \alpha_a\ \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\,\rangle =$$

$$\langle\, (k_a j_a)\, j_a'\, (k_b j_b)\, j_b'\, ; j'\ |\ (k_a k_b)\, k\ (j_a j_b)\, j\ ; j'\,\rangle$$

$$\times\, \langle\, \alpha_a'\ j_a'\ ||\ \mathbf{T}^{k_a}\ ||\ \alpha_a\ j_a\,\rangle\, \langle\, \alpha_b'\ j_b'\ ||\ \mathbf{U}^{k_b}\ ||\ \alpha_b\ j_b\,\rangle \tag{4-76a}$$

ou encore :

$$\langle\, \alpha_a'\ \alpha_b'\ (j_a' j_b')\, j'\ ||\ \left[\mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\right]^k\ ||\ \alpha_a\ \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\,\rangle =$$

$$\sqrt{(2j_a'+1)\ (2j_b'+1)\ (2k+1)\ (2j+1)} \qquad \begin{Bmatrix} k_a & j_a & j_a' \\ k_b & j_b & j_b' \\ k & j & j' \end{Bmatrix}$$

$$\times\, \langle\, \alpha_a'\ j_a'\ ||\ \mathbf{T}^{k_a}\ ||\ \alpha_a\ j_a\,\rangle\, \langle\, \alpha_b'\ j_b'\ ||\ \mathbf{U}^{k_b}\ ||\ \alpha_b\ j_b\,\rangle \tag{4-76b}$$

$$\langle\, \alpha_a'\ \alpha_b'\ (j_a' j_b')\, j'\ ||\ \left[\mathbf{T}^{k_a} \otimes \mathbf{U}^{k_b}\right]^k\ ||\ \alpha_a\ \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\,\rangle =$$

$$\sqrt{(2j_a'+1)\ (2j_b'+1)\ (2k+1)\ (2j+1)} \qquad \begin{Bmatrix} j_b' & k_b & j_b \\ j' & k & j \\ j_a' & k_a & j_a \end{Bmatrix}$$

$$\times\, \langle\, \alpha_a'\ j_a'\ ||\ \mathbf{T}^{k_a}\ ||\ \alpha_a\ j_a\,\rangle\, \langle\, \alpha_b'\ j_b'\ ||\ \mathbf{U}^{k_b}\ ||\ \alpha_b\ j_b\,\rangle. \tag{4-76c}$$

Cas particuliers. Cette formule se simplifie lorsque un des deux opérateurs est l'identité. Par exemple, calculons l'élément de matrice

$$\langle\, \alpha_a'\ \alpha_b'\ (j_a' j_b')\, j'\, m'\ |\ T^{k_a}_{q_a}\ |\ \alpha_a\ \alpha_b\ (j_a\, j_b)\, j\, m\rangle.$$

Comme dans le cas général, on couple en une somme de termes ayant un moment angulaire total donné :

$$T^{k_a}_{q_a} \mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle = \sum_{j''\,m''} \langle k_a\,q_a\,j\,m \mid j''\,m''\rangle \left\{\, \mathbf{T}^{k_a} \mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,\rangle \,\right\}^{j''}_{m''} . \quad (4\text{-}77)$$

On utilise alors la définition des coefficients de recouplage :

$$\left\{\, \mathbf{T}^{k_a} \mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,\rangle \,\right\}^{j''}_{m''} = \sum_{j''_a} \langle\,(k_a j_a)\,j''_a\,j_b\,;j'' \mid k_a\ (j_a j_b)\,j\,;j''\,\rangle \times \left\{\, \left[\mathbf{T}^{k_a} \otimes \mid \alpha_a\,j_a\,\rangle\right]^{j''_a} \otimes \mid \alpha_b\,j_b\,\rangle \right\}^{j''}_{m''} . \quad (4\text{-}78)$$

On peut effectuer la suite du calcul comme dans le cas général. On obtient (en utilisant la relation 4-45) :

$$\langle\,\alpha'_a\,\alpha'_b\ (j'_a\,j'_b)\,j'\,m' \mid T^{k_a}_{q_a} \mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle = \langle k_a\,q_a\,j\,m \mid j'\,m'\rangle\,\langle\,\alpha'_a\,\alpha'_b\ (j'_a\,j'_b)\,j' \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,\rangle \quad (4\text{-}79)$$

avec

$$\langle\,\alpha'_a\,\alpha'_b\ (j'_a\,j'_b)\,j' \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,\rangle = \langle\,(k_a j_a)\,j'_a\,j_b\,;j' \mid k_a\ (j_a j_b)\,j\,;j'\,\rangle\,\langle\,\alpha'_a\,j'_a \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,j_a\,\rangle\,\delta_{\alpha'_b\,\alpha_b}\ \delta_{j'_b\,j_b} \quad (4\text{-}80a)$$

$$\langle\,\alpha'_a\,\alpha'_b\ (j'_a\,j'_b)\,j' \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,\rangle = \sqrt{(2j'_a+1)\,(2j+1)}\ W(k_a\,j_a\,j'\,j_b\,;j'_a\,j)\ \langle\,\alpha'_a\,j'_a \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,j_a\,\rangle\,\delta_{\alpha'_b\,\alpha_b}\ \delta_{j'_b\,j_b} \quad (4\text{-}80b)$$

$$\langle\,\alpha'_a\,\alpha'_b\ (j'_a\,j'_b)\,j' \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,\rangle = U(k_a\,j_a\,j'\,j_b\,;j'_a\,j)\ \langle\,\alpha'_a\,j'_a \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,j_a\,\rangle\,\delta_{\alpha'_b\,\alpha_b}\ \delta_{j'_b\,j_b} \quad (4\text{-}80c)$$

$$\langle\,\alpha'_a\,\alpha'_b\ (j'_a\,j'_b)\,j' \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,\rangle = (-1)^{k_a+j_a+j'+j_b}\ \sqrt{(2j'_a+1)\,(2j+1)}\ \begin{Bmatrix} k_a & j_a & j'_a \\ j_b & j' & j \end{Bmatrix} \times \langle\,\alpha'_a\,j'_a \mid\mid \mathbf{T}^{k_a} \mid\mid \alpha_a\,j_a\,\rangle\,\delta_{\alpha'_b\,\alpha_b}\ \delta_{j'_b\,j_b} . \quad (4\text{-}80d)$$

L'autre élément de matrice que nous avons à calculer est le suivant :

$$\langle\,\alpha'_a\,\alpha'_b\ (j'_a\,j'_b)\,j'\,m' \mid U^{k_b}_{q_b} \mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,m\,\rangle = \langle k_b\,q_b\,j\,m \mid j'\,m'\rangle\,\langle\,\alpha'_a\,\alpha'_b\ (j'_a\,j'_b)\,j' \mid\mid \mathbf{U}^{k_b} \mid\mid \alpha_a\,\alpha_b\ (j_a\,j_b)\,j\,\rangle . \quad (4\text{-}81)$$

On utilise alors la relation (3A-23) :

$$\langle\, \alpha'_a\; \alpha'_b\; (\, j'_a\, j'_b\,)\, j'\, m' \mid U^{k_b}_{q_b} \mid \alpha_a\; \alpha_b\; (\, j_a\, j_b\,)\, j\, m\,\rangle = (-1)^{j_a+j_b-j}\, (-1)^{j'_a+j'_b-j'}\, \langle\, \alpha'_b\; \alpha'_a\; (\, j'_b\, j'_a\,)\, j'\, m' \mid U^{k_b}_{q_b} \mid \alpha_b\; \alpha_a\; (\, j_b\, j_a\,)\, j\, m\,\rangle \tag{4-82}$$

et, à une phase près, on revient au cas précédent. Finalement on obtient :

$$\langle\, \alpha'_a\; \alpha'_b\; (\, j'_a\, j'_b\,)\, j' \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_a\; \alpha_b\; (\, j_a\, j_b\,)\, j\,\rangle = (-1)^{j_a+j_b-j}\, (-1)^{j_a+j'_b-j'}\, \langle\, (k_b j_b)\, j'_b\; j_a\, ; j' \mid k_b\, (j_b j_a)\, j\, ; j'\,\rangle \times \langle\, \alpha'_b\; j'_b \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_b\; j_b\,\rangle\, \delta_{\alpha'_a\, \alpha_a}\; \delta_{j'_a\, j_a} \tag{4-83a}$$

$$\langle\, \alpha'_a\; \alpha'_b\; (\, j'_a\, j'_b\,)\, j' \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_a\; \alpha_b\; (\, j_a\, j_b\,)\, j\,\rangle = (-1)^{j-j'+j'_b-j_b}\, \langle\, (k_b j_b)\, j'_b\; j_a\, ; j' \mid k_b\, (j_b j_a)\, j\, ; j'\,\rangle \times \langle\, \alpha'_b\; j'_b \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_b\; j_b\,\rangle\, \delta_{\alpha'_a\, \alpha_a}\; \delta_{j'_a\, j_a} \tag{4-83b}$$

$$\langle\, \alpha'_a\; \alpha'_b\; (\, j'_a\, j'_b\,)\, j' \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_a\; \alpha_b\; (\, j_a\, j_b\,)\, j\,\rangle = (-1)^{j-j'+j'_b-j_b}\, \sqrt{(2j'_b+1)\,(2j+1)}\; W(k_b\, j_b\, j'\, j_a\, ; j'_b\, j) \times \langle\, \alpha'_b\; j'_b \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_b\; j_b\,\rangle\, \delta_{\alpha'_a\, \alpha_a}\; \delta_{j'_a\, j_a} \tag{4-83c}$$

$$\langle\, \alpha'_a\; \alpha'_b\; (\, j'_a\, j'_b\,)\, j' \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_a\; \alpha_b\; (\, j_a\, j_b\,)\, j\,\rangle = (-1)^{j-j'+j'_b-j_b}\, U(k_b\, j_b\, j'\, j_a\, ; j'_b\, j) \times \langle\, \alpha'_b\; j'_b \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_b\; j_b\,\rangle\, \delta_{\alpha'_a\, \alpha_a}\; \delta_{j'_a\, j_a} \tag{4-83d}$$

$$\langle\, \alpha'_a\; \alpha'_b\; (\, j'_a\, j'_b\,)\, j' \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_a\; \alpha_b\; (\, j_a\, j_b\,)\, j\,\rangle = (-1)^{j+j'_b+k_b+j_a}\, \sqrt{(2j'_b+1)\,(2j+1)}\; \begin{Bmatrix} k_b & j_b & j'_b \\ j_a & j' & j \end{Bmatrix} \times \langle\, \alpha'_b\; j'_b \,\|\, \mathbf{U}^{k_b} \,\|\, \alpha_b\; j_b\,\rangle\, \delta_{\alpha'_a\, \alpha_a}\; \delta_{j'_a\, j_a}\,. \tag{4-83e}$$