

Moment angulaire en MQ

Comme en mécanique classique, le moment angulaire orbital $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ est important dans les problèmes à symétrie ou force centrale, par exemple l'atome, ainsi que dans le magnétisme. Dans ces problèmes, l'étude de ses valeurs propres et des états associés est centrale. Mais le moment angulaire possède un statut plus important que celui d'une simple observable : il existe un moment angulaire intrinsèque aux particules, le *spin*, qui possède des propriétés de symétrie et des effets observables sans pendant classique. Le spin a des conséquences majeures sur le comportement de systèmes de particules (nature fermionique ou bosonique).

1. Représentations des rotations

L'étude des symétries est cruciale en mécanique, et il est important de connaître l'action des transformations de symétrie (universelle ou propre, cf. `sym.tm`) sur un système. En particulier, l'isotropie de l'espace implique que les rotations (formant le groupe des rotations $SO(3)$) sont des opérations de symétrie universelles.

Quelle est alors l'action du groupe des rotations sur un système quantique, ie. quels sont les opérateurs, agissant dans l'espace de Hilbert, représentant les rotations ? On pourrait simplement regarder comment se comporte une bonne vieille fonction d'onde de $\mathcal{L}(\mathbb{R}^3)$, comme on le fait ci-dessous (moment angulaire orbital). Mais on peut (et il faut) être plus général et considérer n'importe quel système quantique. Le problème est formalisé en *théorie des représentations*, détaillée un peu plus dans `repr.tm`. En résumé, le théorème de Wigner nous dit que les rotations sont implémentées / (projectivement) représentées par des opérateurs unitaires.

Ensuite, tout ce dont on a besoin est l'ensemble des *générateurs* de la représentation (projective) du groupe des rotations (car les générateurs... génèrent toutes les rotations), et en particulier les relations de commutations respectées.

Notons $SO(3) = \{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}\}_{\vec{u},\theta}$ le groupe des rotations. Notons $G = \{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}\}_{\vec{u},\theta}$ la représentation (éventuellement projective) de $SO(3)$ dans notre espace de Hilbert, $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}$ étant l'**opérateur de rotation** associé à une rotation $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}$. Le théorème de Wigner nous indique que les $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}$ sont des opérateurs unitaires ou anti-unitaires, et comme on peut atteindre de façon continue la rotation nulle $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta=0} = \mathbf{1}$, qui est unitaire, ce sont donc des opérateurs unitaires.

Le groupe des rotations $SO(3)$ est un groupe non-abélien. Toutefois, à direction $\vec{u}$ fixée, $\{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}\}_{\theta}$ est un sous-groupe abélien, et un élément $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}$ s'inverse en $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}^{-1} = \mathcal{R}_{\vec{u},-\theta}$. Bien évidemment, tourner de θ_1 puis de θ_2 autour de $\vec{u}$, c'est tourner de $\theta = \theta_1 + \theta_2$, ce qui se retrouve dans la structure de groupe : $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta_1} \mathcal{R}_{\vec{u},\theta_2} = \mathcal{R}_{\vec{u},\theta=\theta_1+\theta_2}$. Et par conséquent dans la structure de sa représentation projective : $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta=\theta_1+\theta_2} = \mathcal{R}_{\vec{u},\theta_1} \mathcal{R}_{\vec{u},\theta_2}$. Grâce au théorème de Stone¹, on peut alors introduire un générateur hermitien $J_{\vec{u}}$ et écrire

$$\mathcal{R}_{\vec{u},\theta} = e^{\frac{1}{i\hbar}\theta J_{\vec{u}}}$$

(le $\hbar$ n'étant là que pour que J ait la dimension d'un moment angulaire). Retournant à un axe quelconque $\vec{u}$, s'agissant d'une représentation vectorielle, on a même

$$J_{\vec{u}} = \vec{J} \cdot \vec{u} \quad \text{où} \quad \vec{J} = \begin{bmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{bmatrix}$$

1. https://en.wikipedia.org/wiki/Stone%27s_theorem_on_one-parameter_unitary_groups; Le Bellac p.221.

est noté comme un vecteur car il se comporte comme un vecteur. Ainsi,

$$\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} = e^{\frac{1}{i\hbar} \theta \vec{J} \cdot \vec{u}}$$

Passons en coordonnées sphériques (θ, φ) . En explicitant la rotation $\mathcal{R}_{\vec{u}(\varphi), d\theta}$, qui se décompose en $\mathcal{R}_{x, \varphi} \mathcal{R}_{y, d\theta} \mathcal{R}_{x, -\varphi}$ (encore grâce à la représentation vectorielle, cf. schéma ci-contre), on a après développement en $d\theta$:

$$\vec{J} \cdot \vec{u}(\varphi) \equiv \cos \varphi J_y + \sin \varphi J_z = e^{\frac{1}{i\hbar} \varphi J_x} J_y e^{-\frac{1}{i\hbar} \varphi J_x}$$

ce qui donne, après développement en $d\varphi$ ($e^{\frac{1}{i\hbar} d\varphi J_x} = 1 + \frac{d\varphi}{i\hbar} J_x$)

$$1 J_y + d\varphi J_z = J_y + \frac{d\varphi}{i\hbar} J_x J_y - \frac{d\varphi}{i\hbar} J_y J_x + \dots d\varphi^2$$

et donc

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z$$

De même en changeant d'axe, $[J_y, J_z] = i\hbar J_x$ et $[J_z, J_x] = i\hbar J_y$.

Ainsi, introduisant le symbole de Levi-Civita $\mathbb{A}_{ijk}$, on a les relations de commutations des trois générateurs des rotations :

$$\boxed{[J_i, J_j] = i\hbar \mathbb{A}_{ijk} J_k} \quad (\forall i, j, k \in \{x, y, z\})$$

On peut définir le **moment angulaire total** comme étant le *générateur des rotations* du système en question, c'est-à-dire le générateur des opérateurs $\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}$ agissant dans l'espace de Hilbert *complet* du système (en contraste avec $\vec{L}$, cf. plus loin). Il est par convention noté $\vec{J}$. Il est toujours conservé dans un système isolé, en conséquence de l'isotropie de l'espace à travers le théorème de Noether.

Mais dans la suite, le moment angulaire $\vec{J}$ est générique.

2. Quantification et prop. d'un moment angulaire générique

Moment angulaire : opérateur² à 3 composantes $\vec{J} = \begin{bmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{bmatrix}$ vérifiant les relations de commutation

$$\boxed{[J_i, J_j] = i\hbar \mathbb{A}_{ijk} J_k} \quad (\forall i, j, k) \iff \vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$$

D'où ça sort ? Ce sont les relations de commutation du bon vieil opérateur de moment angulaire orbital $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ (cf. plus loin) qu'il est naturel d'utiliser dans les problèmes à symétrie sphérique. Mais de façon bien plus générale, ce sont les relations vérifiées par les générateurs des représentations³ du **groupe des rotation** $SO(3)$ (cf. ci-dessus).

2. En bons physiciens, l'espace de Hilbert n'a pas été défini. Implicitement, ce que l'on veut dire, c'est que l'on considère tous les espaces de Hilbert (avec certainement des contraintes, implicites dans la procédure de quantification) où de tels opérateurs $\{J_i\}_i$ peuvent agir et respectent les relations de commutation. La procédure de quantification devrait nous permettre de trouver tous ces espaces de Hilbert (il s'agit des multiplets $\mathcal{E}_j$), ou si l'on préfère, la somme directe de tous ces espaces.

3. Note : on peut s'amuser à faire apparaître les générateurs infinitésimaux agissant dans l'espace des vecteurs $\mathbb{R}^3$ (et non l'espace de Hilbert). En écrivant qu'un vecteur $\vec{V}$ se transforme en $\mathcal{R}_{\vec{u}, d\theta} \vec{V} = \vec{V} + (\vec{u} \times \vec{V}) d\theta$, et après avoir posé $\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} = \exp(-i\theta \vec{T} \cdot \vec{u})$ grâce au théorème de Stone, on a

$$\vec{T} \cdot \vec{u} = i \begin{bmatrix} 0 & -u_z & u_y \\ u_z & 0 & -u_x \\ -u_y & u_x & 0 \end{bmatrix} \quad \text{puis, avec } T_i = \vec{T} \cdot \vec{u}_i, \quad [T_i, T_j] = i \mathbb{A}_{ijk} T_k$$

C'est amusant et ça donne ce que l'on veut, mais un système quantique n'est pas décrit par un vecteur dans $\mathbb{R}^3$! Pourquoi cela fonctionne-t-il ? Parce que on a regardé des transformations infinitésimales seulement. Au niveau de l'algèbre de Lie, $\mathbb{R}^3$ et l'espace de Hilbert se comportent de la même façon ($\mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(3)$). Mais les T_i 's et J_i 's ne sont pas les mêmes objets.

2.1. Base standard du moment angulaire et quantification

Puisque l'on a $\forall i, [\mathbf{J}_i, \vec{\mathbf{J}}^2] = 0$ il existe des *vecteurs propres communs* au couple $(\vec{\mathbf{J}}^2, J_z)$, qui est un ECOC si l'on ne tient pas compte du reste de l'espace des états. On définit les *opérateurs d'échelle* ou d'incrément/décément

$$\mathbf{J}_{\pm} := \mathbf{J}_x \pm i \mathbf{J}_y$$

Quantification par méthode d'échelle + norme finie

$$\vec{\mathbf{J}}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \quad \text{et} \quad J_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle$$

avec $j \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$ demi-entier ou entier, et le nombre magnétique m prenant toutes les valeurs entre $-j$ et $+j$ par pas entiers (donc m entiers si j entier et demi-entiers si j demi-entier), noté $\{m\} = \llbracket -j, +j \rrbracket$.

Relation utile :

$$\mathbf{J}^2 = J_z^2 + \frac{1}{2} (\mathbf{J}_+ \mathbf{J}_- + \mathbf{J}_- \mathbf{J}_+)$$

Action des opérateurs d'échelle (que l'on peut comprendre grâce à la relation précédente) :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\pm} |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \\ &=: \hbar C_{\pm}(j, m) |j, m \pm 1\rangle \end{aligned}$$

Le multiplet $\mathcal{E}_j := \{|jm\rangle\}_{m \in \llbracket -j, +j \rrbracket}$, si il existe dans $\mathcal{H}$, forme un sous-espace propre de dimension $2j+1$ (donc dégénéré) pour la valeur propre $\hbar^2 j(j+1)$ de $\vec{J}^2$. Si un certain vecteur $|jm\rangle$ existe dans l'espace des états $\mathcal{H}$, la procédure d'incrément/décément montre que le sous-espace $\mathcal{E}_j$ existe tout entier.

2.2. Quelques propriétés

J_x et J_y ont toujours une moyenne nulle dans un état propre $|jm\rangle$ de $(\vec{J}^2, J_z)$. En effet, puisque $\forall j, m, \langle jm | J_{\pm} | jm \rangle \propto \langle j, m | j, m \pm 1 \rangle = 0$, de même les éléments diagonaux de J_x et J_y sont nuls : $\langle jm | J_x | jm \rangle = \langle jm | J_y | jm \rangle = 0$. Ainsi, si z est l'axe de quantification,

$$\forall j, m, \quad \langle \vec{J} \rangle_{|jm\rangle} = \langle J_z \rangle_{|jm\rangle} \hat{z} = \hbar m \hat{z}$$

L'image d'un vecteur $\vec{J}$ dont l'orientation est quantifiée est donc faussée. Par contre, les écarts-types de J_x et J_y ne sont pas nuls en général : puisque $J_x^2 + J_y^2 = \vec{J}^2 - J_z^2$, on a $\text{Var}(J_{x,y}) = \langle J_{x,y}^2 \rangle_{|jm\rangle} = \frac{1}{2} \langle \vec{J}^2 - J_z^2 \rangle_{|jm\rangle} = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - m^2) \geq \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - j^2) = \frac{\hbar^2}{2} j \geq \frac{\hbar^2}{2} |m| = \frac{\hbar}{2} |\langle J_z \rangle|$, d'où l'inégalité

$$\text{Var}(J_x) \text{Var}(J_y) \geq \frac{\hbar^2}{4} \langle J_z \rangle^2$$

qui est d'ailleurs valable quelque soit l'état.

Représentation matricielle :

- Dans le sous-espace $j = 1/2$ de dimension 2, si $\vec{J}$ n'y est pas nul, on a dans la B.O.N. ($|+1/2\rangle, |-1/2\rangle$)

$$\vec{J}|_{\mathcal{E}_{1/2}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \text{avec} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \text{matrices de Pauli}$$

$$\text{ainsi que} \quad J_+|_{\mathcal{E}_{1/2}} = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad J_-|_{\mathcal{E}_{1/2}} = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

On vérifie alors que $\sigma_i^2 - 1 = 0$, donc $\text{Eigv}(\sigma_i) = \text{Roots}(X^2 - 1) = \{+1, -1\}$, comme attendu.

- Dans le sous-espace $j = 1$ de dimension 3, si $\vec{J}$ n'y est pas nul, on a dans la B.O.N. ($|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$)

$$J_z|_{\mathcal{E}_1} = \hbar \begin{bmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{puis} \quad J_+|_{\mathcal{E}_1} = \hbar \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad J_-|_{\mathcal{E}_1} = J_+^\dagger = \hbar \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{donc} \quad J_x|_{\mathcal{E}_1} = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad J_y|_{\mathcal{E}_1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$$

On vérifie alors que, avec $\hbar = 1$, $J_i^3 - J_i = 0$, donc $\text{Eigv}(J_i) = \text{Roots}(X^3 - X) = \{+1, 0, -1\}$, comme attendu.

Parité : Le moment angulaire total $\vec{J}$ (le générateur des rotations) est *invariant par parité*. En particulier, ses états propres sont de parité définie : $\Pi |jm\rangle = \pm |jm\rangle$. Mais on ne connaît pas leur parité a priori!⁴

Preuve : <https://physics.stackexchange.com/a/410898> / Bellac p.311

2.3. Représentations du groupe des rotations

Pour l'instant, nous n'avons exploité que des rotations infinitésimales. Il y a bien plus à dire sur les rotations, notamment sur leur structure globale, c'est-à-dire ce qu'il se passe lorsque l'on applique une rotation de façon continue, de façon progressive. En termes mathématiques, on s'intéresse à un *chemin* dans l'espace des rotations $\text{SO}(3)$.

4. Contrairement à $\vec{L}$. Voir la [parité intrinsèque](#).

À quel groupe appartiennent les opérateurs de rotation $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta} = e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{J}\cdot\vec{u}}$? Plaçons nous dans un sous-espace $\mathcal{E}_j$ à j fixé. Formellement, il s'agit de matrices de $U(j)$, mais les $\{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}\}$ ne forment évidemment pas un groupe aussi gros. Ce groupe $\{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}\}$ est en fait (via un isomorphisme) un sous-groupe de $SU(2)$. Terminologie : on dit que le groupe $\{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}|_{\mathcal{E}_j}\}_{\vec{u},\theta}$ est une *représentation de spin j* de $SO(3)$.

Dans le cas de $j = 1/2$, $\{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}\}$ est même précisément $SU(2)$. Et pour tout j demi-entier, $\{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}\}$ est isomorphe à $SU(2)$. Et pourquoi pas $SO(3)$? Après tout, les rotations vivent dans $SO(3)$... C'est parce que les représentations pour j demi-entier ne sont pas des représentations exactes de $SO(3)$, mais seulement des **représentations projectives**, ie. à une phase près. Cela se voit particulièrement sur le cas bien connu d'une rotation de 2π pour j demi-entier : $\mathcal{R}_{2\pi} = e^{-i\pi} = -1$!⁵ Alors que dans $\mathcal{R}_{2\pi} = \text{id}$ dans $SO(3)$ (une rotation de 360° , c'est ne rien faire). Évidemment, le fait que l'état se prenne une phase de π n'a aucune incidence sur les observables de notre système, le contraire serait embarrassant pour une opération ne faisant rien ! Ça ne veut pas dire que ce fait n'a aucune incidence sur le comportement d'un système à j demi-entier, bien au contraire (structure de l'espace des états des systèmes à plusieurs particules, faisceaux polarisés en spin... cf. spin.tn). Simplement, une rotation globale – en bloc – de 360° de n'importe quel système (penser à une transformation passive) n'a pas de conséquence observable. Cf. <https://physics.stackexchange.com/questions/167469/how-do-you-rotate-spin-of-an-electron/167470>. Les objets comme les états à j demi-entier, qui se comportent ainsi lors de la rotation de l'espace (-1 pour 2π , $+1$ pour 4π) sont appelés des *spineurs*, en contraste avec les scalaires, vecteurs, tenseurs...

Mathématiquement, on a seulement une injection de $SO(3)$ dans $SU(2)$. À chaque élément $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}$ de $SO(3)$ sont associés deux éléments, $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}$ et $-\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}$, de $SU(2)$. $SU(2)$ est une *double cover* de $SO(3)$. Pour comprendre les aspects topologiques :

- <https://en.wikipedia.org/wiki/Spinor>
- L'excellente vidéo https://www.youtube.com/watch?v=ACZC_XEyg9U (Dirac's belt trick, topology, and spin $\frac{1}{2}$ particles) qui montre ce que sont $SU(2)$, $SO(3)$, comment on peut les représenter graphiquement, quelle est leur relation, et pourquoi il n'est pas possible d'avoir une représentation exacte pour $j = 1/2$, à travers l'étude de chemins dans $SO(3)$.

Par contre, pour $j > 0$ entier, $\{\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}\}$ est bien isomorphe à $SO(3)$, et donc les rotations $SO(3)$ sont représentées exactement. Il y a bien évidemment la représentation $j = 0$ qui est triviale.

En conclusion, en toute généralité les rotations sont des représentations *exactes* de $SU(2)$, et seulement des représentations *projectives* de $SO(3)$.

3. Moment angulaire orbital et Rotations spatiales

Considérons un système physique. Il est décrit par des degrés de liberté spatiaux, et possiblement par d'autres degrés de liberté. Comment sont affectés les degrés de liberté uniquement spatiaux ? La réponse est donnée par les rotations (notées ici $\mathcal{R}_{\vec{u},\theta}$) agissant dans le sous-espace des degrés de liberté spatiaux $\mathcal{H}_{\text{espace}}$, dont le générateur est le *moment angulaire orbital* $\vec{L}$, c'est-à-dire qu'effectuer une rotation revient à appliquer

$$\mathcal{R}_{\vec{u},\theta} = e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot\vec{L}}$$

sur la partie spatiale de l'état (les fonctions d'onde). S'agissant d'une grandeur ayant un pendant classique, elle est naturellement soumise aux propriétés de symétrie classiques, en l'occurrence l'invariance par rotation⁶.

5. $\mathcal{R}_{2\pi}|m\rangle = e^{\frac{1}{i\hbar}2\pi J_z}|m\rangle = e^{-i2\pi m}|m\rangle = e^{-i\pi}|m\rangle = -|m\rangle$ car m est un demi-entier lorsque j est demi-entier.

6. Toutefois, c'est sur le moment angulaire total $\vec{J}$, qui peut aussi contenir un moment angulaire intrinsèque, le spin $\vec{S}$, qui est conservé, pas $\vec{L}$! Par exemple, en physique atomique, le couplage spin-orbite permet l'échange de moment angulaire entre le spin et le moment angulaire orbital, tout en conservant $\vec{J}$ constant.

À partir de cette définition, on montre ci-dessous que le moment angulaire orbital est ce que l'on attend :

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Rotations et construction de $\vec{L}$ à partir des rotations

On peut, grâce au théorème de Stone, définir $\vec{L}$ comme les générateurs de la représentation du groupe des rotations $SO(3)$ agissant dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ (cf. cadre ci-dessus), mais ça ne donne pas l'expression explicite de $\vec{L}$, seulement les relations de commutation $[L_i, L_j] = i\hbar \mathbb{A}_{ijk} L_k$.

Détermination de l'action de $\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}$ dans l'espace des fonctions d'onde : la conservation des probabilités lors de la rotation impose (relativité galiléenne) :

$$|\Psi(\vec{x})|^2 = |\Psi'(\vec{x}')|^2 = |\Psi'(\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} \vec{x})|^2 \quad \text{qui entraîne} \quad \Psi'(\vec{x}) = e^{i\alpha_{\vec{u}, \theta}(\vec{x})} \Psi(\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}^{-1} \vec{x})$$

avec une phase $\alpha_{\vec{u}, \theta}(\vec{x})$ indépendante de l'état, que l'on suppose/montre nulle [cf. `rot-phase.tm`, sinon il faut l'absorber dans le générateur des rotations, ce qui le rendrait différent de $\vec{L}$], ce qui revient à avoir $\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} |\vec{x}\rangle = |\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} \vec{x}\rangle$.

On peut faire apparaître le générateur infinitésimal des rotations, par exemple pour $\vec{u} = \vec{u}_z$, ce qui donne alors

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{z, d\theta}^{-1} : \begin{aligned} x &\mapsto x \cos \theta - y \sin \theta \rightarrow x + y d\theta \\ y &\mapsto x \sin \theta + y \cos \theta \rightarrow -x d\theta + y \\ z &\mapsto z \end{aligned} \quad \text{d'où} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{z, d\theta} \Psi(\vec{r}) &= \Psi(\mathcal{R}_{z, d\theta}^{-1} \vec{r}) \\ &= \Psi(x + y d\theta, -x d\theta + y, z) \\ &= \Psi(\vec{r}) + (y \partial_x \Psi(\vec{r}) - x \partial_y \Psi(\vec{r})) d\theta \\ &= \left(1 + \frac{d\theta}{i\hbar} (-y p_x + x p_y)\right) \Psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Or, par définition, $\mathcal{R}_{z, d\theta} |\Psi\rangle = e^{\frac{1}{i\hbar} d\theta L_z} |\Psi\rangle = \left(1 + \frac{d\theta}{i\hbar} L_z\right) |\Psi\rangle$, donc $L_z = x p_y - y p_x$ par identification. En procédant de même pour les autres axes :

$$\boxed{\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \text{générateur des rotations pour } \mathcal{H}_{\text{espace}}}$$

Ou, si l'on préfère sa représentation dans l'espace des positions, $\vec{L} = -i\hbar (\vec{r} \times \vec{\nabla})$.

On vérifie à partir de la relation de commutation fondamentale $[x_i, p_j] = i\hbar \mathbb{1}_{ij}$ et du produit vectoriel en fonction des composantes carthésiennes que, comme tout moment angulaire (par définition), $\vec{L}$ vérifie

$$[L_i, L_j] = i\hbar \mathbb{A}_{ijk} L_k$$

ce qui, avec le fait que les fonctions d'onde doivent être de norme finie, engendre la quantification usuelle ($j \rightarrow \ell, m \rightarrow m_\ell$) des moments angulaires. Au fond, la quantification de $\vec{L}$ vient du fait que les variables angulaires sont *confinées* dans un intervalle fini ($\phi \in [0, 2\pi]$ et $\theta \in [0, \pi]$) tout comme p ($\Leftrightarrow$ nombre d'onde k) lorsqu'une particule est confinée ($x \in [0, a]$) dans un puits de potentiel.

Mais on va voir que le nombre quantique orbital ℓ ne peut être qu'*entier*, et pas demi-entier.

Expression de $\vec{L}$ en q -représentation comme opérateur différentiel, en coordonnées sphériques⁷ :

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar (+\sin \phi \partial_\theta + \cos \phi \cot \theta \partial_\phi) \\ L_y &= i\hbar (-\cos \phi \partial_\theta + \sin \phi \cot \theta \partial_\phi) \end{aligned} \quad \text{et} \quad L_z = -i\hbar \partial_\phi$$

et donc

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left(\partial_\theta^2 + \cot \theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right) \quad \text{et} \quad L_\pm = \pm \hbar e^{\pm i\phi} (\partial_\theta \pm i \cot \theta \partial_\phi)$$

⚠ En q -représentation, $\vec{L}$ n'est hermitique (et $L_\pm^\dagger = L_\mp$) que dans l'espace des fonctions périodiques en θ et ϕ . Par exemple,

⁷ Autre façon d'obtenir $L_z = -i\hbar \partial_\phi$:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{z, d\phi} \Psi(r, \theta, \phi) &= \Psi(r, \theta, \phi - d\phi) \\ &= (\Psi - \partial_\phi \Psi d\phi)(\vec{r}) \quad \text{or} \quad \mathcal{R}_{z, d\phi} = e^{\frac{1}{i\hbar} d\phi L_z} = 1 + \frac{d\phi}{i\hbar} L_z \quad \text{donc} \quad \frac{1}{i\hbar} L_z = -\partial_\phi \\ &= (1 - d\phi \partial_\phi) \Psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

L_z n'est hermitique que si la fonction d'onde est 2π -périodique⁸, tout comme $p_x = -i\hbar \partial_x$ n'est hermitique si la fonction d'onde s'annule au bord du domaine.

Dans l'espace des fonctions d'onde sur la sphère, en q -représentation, les états propres⁹ $|\ell m\rangle$ sont connues sous le nom d'*harmoniques sphériques* $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$. Elles vérifient $L_z |\ell m\rangle = \hbar m |\ell m\rangle$, c'est-à-dire

$$-i \partial_\phi Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = m Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$$

donc sont de la forme

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell,m}(\theta) e^{im\phi}$$

Or une fonction d'onde doit être *monovaluée*¹⁰, donc $Y_{\ell,m}(\theta, 0) = Y_{\ell,m}(\theta, 2\pi^-)$, ce qui n'est le cas que si

$$e^{2\pi im} = 1 \iff m \text{ est entier} \iff \boxed{\ell \text{ est entier}}$$

Ceci est le résultat du fait de pouvoir écrire $\vec{L}$ comme fonction de $\vec{r}$ et $\vec{p}$, et est en contraste avec le moment angulaire intrinsèque de certaines particules, ayant une valeur demi-entière pour les fermions.

Autre démonstration : l'opérateur de rotation de 2π autour de l'axe de quantification dans l'espace $\mathcal{E}_\ell$ vaut¹¹

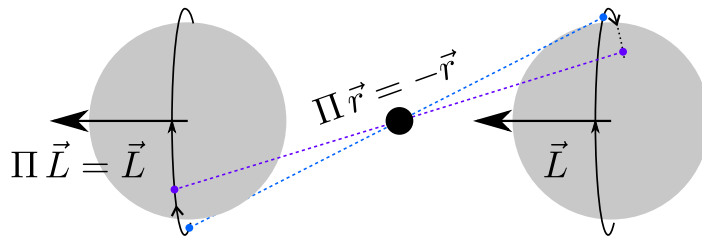
$$\mathcal{R}_{2\pi} | \mathcal{E}_\ell = \begin{cases} +1 & \text{si } \ell \text{ entier} \\ -1 & \text{si } \ell \text{ demi-entier} \end{cases}$$

or on a toujours $\mathcal{R}_{2\pi} \Psi(\vec{r}) = \Psi(\mathcal{R}_{2\pi}^{-1} \vec{r}) = \Psi(\vec{r})$ pour $\Psi \in \mathcal{E}_\ell$ (et pas $-\Psi(\vec{r})$), donc ℓ est nécessairement entier. Ça n'a rien d'évident que le fonction d'onde ne prenne pas un -1 lors d'une rotation de 2π seulement, car ça n'aurait de toute façon pas d'effet observable ($|-1|^2 = 1$). Cf. le cadre ci-dessus pour une justification.

Avec les harmoniques sphériques, on montre qu'il existe une solution pour tout $\ell \in \mathbb{N}$. Finalement, l'espace des fonctions d'onde sur la sphère unité se décompose sur la base des moments angulaires *entiers* :

$$\boxed{L^2(\mathbb{S}^2) = \bigoplus_{\ell \in \mathbb{N}} \mathcal{E}_\ell}$$

Les états propres du moment angulaire sont de **parité définie** : ce sont des vecteurs propres de l'opérateur parité Π , qui agit sur les fonctions d'onde comme $\Pi \Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r})$. En effet, dans une transformation de parité, le moment angulaire orbital est invariant :



8. Soient f, g deux fonctions carré-intégrables sur $[0, 2\pi[$. On a hermiticité de L_z si et seulement si

$$\langle f | L_z g \rangle = \langle L_z f | g \rangle \iff \int_0^{2\pi} f^*(\phi) (-i\hbar \partial_\phi g(\phi)) d\phi = \int_0^{2\pi} (-i\hbar \partial_\phi f(\phi))^* g(\phi) d\phi$$

Après IPP, on voit que ce n'est vrai que si le crochet $[f(\phi) g(\phi)]_0^{2\pi}$ est nul, donc si $f(0) = f(2\pi^-)$ en prenant $g(\phi) \equiv 1$.

9. On rappelle qu'il y a quantification car $\iint |Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta d\phi < +\infty$ ($=1$ en fait).

10. Penser à la fonction d'onde d'une particule dans un potentiel à symétrie cylindrique/sphérique, par exemple un atome. À un point donné, il serait "absurde" que la fonction d'onde, décrite par une équation différentielle, soit multivaluée.

11. Dans $\mathcal{E}_\ell$, on a $\mathcal{R}_{2\pi} |m\rangle = e^{\frac{1}{i\hbar} 2\pi L_z} |m\rangle = e^{-i2\pi m} |m\rangle = \pm 1 |m\rangle$, avec $+1$ si m entier (c'est le cas lorsque ℓ entier), et -1 si m demi-entier (c'est le cas lorsque ℓ demi-entier).

donc $[\mathbf{\Pi}, \vec{L}] = 0$, ce que l'on peut vérifier¹² sur $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ à partir de $\mathbf{\Pi} \vec{r} = -\vec{r} \mathbf{\Pi}$ et $\mathbf{\Pi} \vec{p} = -\vec{p} \mathbf{\Pi}$. Ainsi, on vérifie que $\mathbf{\Pi} Y_{\ell m}$ est encore vecteur propre de $(\vec{L}^2, L_z)$ de valeurs propres (ℓ, m) , donc $(\{Y_{\ell m}\}_{\ell, m})$ base

$$\mathbf{\Pi} Y_{\ell m} \propto Y_{\ell m} \quad \text{donc } Y_{\ell m} \text{ propre de } \mathbf{\Pi}$$

Il reste à trouver pour quelle valeur propre (± 1 car $\mathbf{\Pi}^2 = 1$), c'est à dire quelle parité. En fait, puisque $[\mathbf{\Pi}, L_-] = 0$, tous les états $\{Y_{\ell m}\}_{m \in [-\ell, +\ell]}$ ont la même parité, celle de $Y_{\ell \ell}$:

$$\mathbf{\Pi} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = Y_{\ell m}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Formule des harmoniques sphériques : méthode de résolution 1

On écrit $\vec{J}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 j(j+1) Y_{\ell m}$ avec l'expression de $\vec{L}^2$ en coordonnées sphériques. On a séparation de variables en θ et ϕ , comme on l'a vu. La fonction $\Theta_{\ell m}(\theta)$ vérifie alors (car $\partial_\phi^2 Y_{\ell m} = -m^2 Y_{\ell m}$)

$$\left(\partial_\theta^2 + \cot(\theta) \partial_\theta - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \ell(\ell+1) \right) \Theta_{\ell m}(\theta) = 0$$

qui donne, après changement de variable $\Theta_{\ell m}(\theta) = P_{\ell m}(\cos \theta)$, l'équation de Legendre associée :

$$\left((1-x^2) \partial_x^2 - 2x \partial_x + \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) P_{\ell m}(x) = 0 \quad \text{sur } [-1, 1]$$

dont les solutions sont les *polynômes de Legendre associés* $P_{\ell m}$. Pour $m = 0$, c'est l'équation de Legendre, dont les solutions sont les *polynômes de Legendre* P_ℓ , orthogonaux entre eux :

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

qui vérifient les formules de Bonnet et de Rodrigues :

$$(\ell+1) P_{\ell+1} = (2\ell+1) X P_\ell - \ell P_{\ell-1} \quad \text{et} \quad P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \partial_x^\ell (x^2 - 1)^\ell$$

Pour $m \geq 0$, on obtient alors les « polynômes » de Legendre associés par la formule

$$P_\ell^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \partial_x^m P_\ell(x) \quad \text{d'où} \quad P_\ell^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} \partial_x^{m+\ell} (x^2 - 1)^\ell$$

[Le $(-1)^m$ est la phase de Condon-Shortley : elle est ici (= conv. d'acoustique, $\neq$ conv. de MQ) présente dans P_ℓ^m et non dans $Y_{\ell, m}$. Dans l'autre cas, on écrit plutôt $P_{\ell m} = (-1)^m P_\ell^m$. Cette convention ne change pas l'expression finale de $Y_{\ell, m}$, évidemment; c'est celle de https://en.wikipedia.org/wiki/Associated_Legendre_polynomials. On pourrait l'oublier totalement (conv. de géodésie et de magnétisme), mais ça compliquerait l'expression de $C_\pm(j, m)$]

Relation d'orthogonalité (à $m \geq 0$ fixé, aucune raison qu'ils soient orthogonaux pour des m différents) :

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m(x) dx = \int_0^\pi P_\ell^m(\cos \theta) P_{\ell'}^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \mathbb{1}_{\ell\ell'}$$

Si on impose la normalisation (avec $d^2\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ et pas $d^2\Omega/4\pi$, ce qui enlèverait le $\sqrt{4\pi}$ en préfacteur de $Y_{\ell m}$)

$$\iint_{\mathbb{S}_2} |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 d^2\Omega = 1 \quad \text{alors} \quad Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (1)$$

pour $m \geq 0$. L'équation de Legendre associée est invariante par $m \rightarrow -m$, c'est donc la physique qui fixe

$$Y_{\ell, -m} = (-1)^m Y_{\ell m}^*$$

(soit par application du renversement du temps qui renverse aussi le moment angulaire orbital, soit par application de la deuxième méthode : $(L_-)^{2m} Y_{\ell m}$). Cette formule pour $Y_{\ell m}$ s'étend alors au cas $m \leq 0$, si on impose $P_\ell^{-m} = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m$, ce qui a le bon goût de conserver la validité des formules de récurrence et de Rodrigues.

12. On peut aussi vérifier directement que les expressions en coordonnées sphériques de $\vec{L}, L_\pm, \vec{L}^2$ sont invariantes dans la transformation

$$\begin{aligned} \theta &\mapsto \pi - \theta & \Rightarrow & \sin \theta \mapsto \sin \theta ; \quad \sin \phi \mapsto -\sin \phi ; \quad \partial_\theta \mapsto -\partial_\theta ; \quad e^{\pm i\phi} \mapsto -e^{\pm i\phi} \\ \phi &\mapsto \pi + \phi & & \cot \theta \mapsto -\cot \theta ; \quad \cos \phi \mapsto -\cos \phi ; \quad \partial_\phi \mapsto \partial_\phi \end{aligned}$$

Formule des harmoniques sphériques : méthode de résolution 2

La relation $L_+ Y_{\ell,+} = 0$ donne une équation différentielle dont la solution est

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = C_\ell (\sin \theta)^\ell e^{i\ell\phi} \quad \text{avec} \quad C_\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

par normalisation (qui donne $|C_\ell|$, la phase $(-1)^\ell$ étant choisie pour que $Y_{\ell,0}(\theta=0)$ réelle positive). On applique alors de façon répétée l'opérateur d'échelle $L_- \propto e^{-i\phi} (\partial_\theta - i \cot \theta \partial_\phi)$: puisque $Y_{\ell,m} = \Theta_{\ell,m}(\theta) e^{im\phi}$,

$$Y_{\ell,m-1}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} e^{-i\phi} (-\partial_\theta - m \cot \theta) Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$$

Puisque l'opérateur agissant sur θ , $-m \cot \theta$, est réel, on obtient nécessairement un polynôme en $\cos \theta$ et $\sin \theta$. L'opérateur $-\partial_\theta$ fait apparaître $e^{i(\ell-1)\phi}$, ..., d'où $Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \propto \text{poly}(\cos \theta, \sin \theta) e^{im\phi}$. En fait, après un peu de travail [Cohen-Tannoudji, compl. A_{vi}], on montre que

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} e^{im\phi} \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} (\sin \theta)^{-m} \underbrace{\left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{\ell-m}}_{=\frac{-1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta}} (\sin \theta)^{2\ell}$$

$$= (-1)^m P_\ell^{-m}(x=\cos \theta) \quad \text{avec Rodrigues et } 1-x^2=\sin^2 \theta$$

ce qui redonne bien (1). On vérifie que $Y_{\ell\ell}$ est de parité définie :

$$Y_{\ell\ell}(\pi-\theta, \pi+\phi) = C_\ell \underbrace{(\sin(\pi-\theta))^\ell}_{=\sin \theta} e^{i\ell\phi} \underbrace{(e^{i\pi})^\ell}_{=-1} = (-1)^\ell Y_{\ell\ell}(\theta, \phi)$$

Quelques propriétés des harmoniques sphériques

Par construction, les harmoniques sphériques vérifient la relation d'orthogonalité et de fermeture sur la sphère unité :

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) = \mathbb{1}_{\ell\ell'} \mathbb{1}_{mm'}$$

$$\left(\Leftrightarrow \iint \sin \theta d\theta d\phi |\theta \phi\rangle \langle \theta \phi| = \mathbb{1} \text{ et } \langle \ell m | \ell' m' \rangle = \mathbb{1}_{\ell\ell'} \mathbb{1}_{mm'} \right)$$

$$\sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) Y_{\ell m}^*(\theta', \phi') = \frac{\delta(\theta-\theta')}{\sin \theta} \delta(\phi-\phi')$$

$$\left(\Leftrightarrow \sum_{\ell,m} |\ell m\rangle \langle \ell m| = \mathbb{1} \text{ et } \langle \theta \phi | \theta' \phi' \rangle = \frac{\delta(\theta-\theta')}{\sin \theta} \delta(\phi-\phi') \right)$$

c'est à dire que $(Y_{\ell m})_{\ell,m}$ est une base de $L^2(\mathbb{S}^2)$, fonctions de carré sommable sur la sphère unité.

Quelques harmoniques sphériques :

$\ell=0$	$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$ (isotrope)
$\ell=1$	$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
$\ell=2$	$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$

On les nomme "harmoniques sphériques" car les fonctions $f_{\ell,m}(x,y,z) = r^\ell Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$ sont des polynômes harmoniques de degré ℓ , vérifiant $\nabla^2 f_{\ell,m} = 0$. En fait, le laplacien s'écrit $\nabla^2 = r^{-1} \partial_r^2 r + r^{-2} \vec{L}^2$ avec $\vec{L} = -i(\vec{r} \times \vec{\nabla})$. Une harmonique sphérique est en quelque sorte la composante angulaire d'une solution de l'équation de Laplace :

$\ell=0$	$f_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$\ell=1$	$f_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z \quad f_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x \pm i y)$
$\ell=2$	$f_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3z^2 - r^2) \quad f_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} z (x \pm i y) \quad f_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (x \pm i y)^2$

Utilité pratique : par exemple lorsque z apparaît dans le hamiltonien par perturbation d'un problème à symétrie sphérique, on peut introduire $r Y_{1,0}(\theta, \phi)$ dans le calcul des éléments de matrice. On remarque que seules les harmoniques sphériques pour $\ell=0$ sont réelles, et sont toujours des polynômes en (z, r) de degré ℓ . Pour obtenir les autres coordonnées, il suffit de faire des combinaisons linéaires de $\pm m$:

$$Y_{1,+1} - Y_{1,-1} \propto x/r \quad ; \quad Y_{1,+1} + Y_{1,-1} \propto y/r$$

On peut alors formuler des règles de sélection avec ℓ et m dans ce type de problème à symétrie sphérique brisée.

Puisque les harmoniques sphériques $(Y_{\ell m})_{\ell, m}$ forment une base de $L^2(\mathbb{S}^2)$, une fonction d'onde 3D, élément de $L^2(\mathbb{R}^3) \cong L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{S}^2)$ pourra s'écrire en général

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} R_{\ell m}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Si Ψ est une fonction propre de $\vec{J}^2$ et J_z (par exemple une orbitale), c'est qu'il n'existe qu'un seul coefficient $c_{\ell m}$ non nul, et alors Ψ se factorise en une partie radiale et une harmonique sphérique :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{\ell m}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

4. Moment angulaire intrinsèque : le spin

Cf. fiche sur le spin pour les détails. En résumé, les propriétés de certaines particules ne nous laissent pas d'autre choix que de reconnaître l'existence d'un moment angulaire intrinsèque $\vec{S}$, pouvant prendre des valeurs **semi-entières** et associé à un moment magnétique¹³. Il s'agit d'un degré de liberté interne qui s'ajoute aux degrés de liberté spatiaux ($\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{esp}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$), et les deux moments angulaires s'ajoutent pour donner le moment angulaire total :

$$\vec{J} = \mathbf{1}_{\text{esp}} \otimes \vec{S} + \vec{L} \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}}$$

Dans un contexte relativiste, les deux notions sont unifiées de façon élégante.

Soit.

5. Rotations et opérateurs scalaires/vectoriels/tensoriels

Par défaut, quand on parle d'opérateur scalaire/vectoriel/tensoriel, on le fait vis à vis de $\vec{L}$.

Sur la base des états propres $|\ell m\rangle$, les rotations $\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}$ ne modifient que le nombre magnétique m , pas ℓ :

$$\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} |\ell m\rangle = e^{\frac{1}{i\hbar} \theta \vec{u} \cdot \vec{L}} |\ell m\rangle = \sum_{\ell', m'} |\ell' m'\rangle \underbrace{\langle \ell' m' | e^{\frac{1}{i\hbar} \theta \vec{u} \cdot \vec{L}} | \ell m \rangle}_{= \mathbb{1}_{\ell, \ell'} R_{m, m'}^{(\ell)}} = \sum_{m'} |\ell m'\rangle R_{m, m'}^{(\ell)}$$

puisque $\mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}$ est une combinaison linéaire des composantes de $\vec{L}$ et que celles-ci commutent avec $\vec{L}^2$. Les $R_{m, m'}^{(\ell)}$ sont les composantes d'une matrice carrée $R^{(\ell)} = R_{\vec{u}, \theta}^{(\ell)}$ de taille $2\ell+1$, appelée *matrice de rotation*. La matrice de rotation classique (de taille 3) est $R^{(1)}$.

5.1. Opérateurs scalaires

$$\begin{aligned} \mathcal{A} \text{ est un opérateur scalaire} &\stackrel{\text{def}}{\iff} \mathcal{A} \text{ est invariant par rotation} \\ &\iff \mathcal{A} = \mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} \mathcal{A} \mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}^\dagger \iff [\mathcal{A}, \mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}] = 0 \quad (\forall \vec{u}, \theta) \\ &\iff \boxed{[\mathcal{A}, \vec{L}] = 0} \end{aligned}$$

[pour un autre argument, Le Bellac p.223]. Exemples : le hamiltonien $\mathbf{H}$ d'un système à symétrie propre sphérique ($\mathbf{H}' = \mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}^{-1} \mathbf{A} \mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} = \mathbf{H} \quad \forall \vec{u}, \theta$), $\vec{L}^2$, ou simplement un symbole qui n'est pas un opérateur...

→ Un opérateur scalaire $\mathcal{A}$ est *diagonal par rapport à ℓ et m* : $\langle \alpha \ell m | \mathcal{A} | \alpha' \ell' m' \rangle \propto \mathbb{1}_{\ell \ell'} \mathbb{1}_{m m'}$:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \alpha \ell m | [\mathcal{A}, L_z] | \alpha' \ell' m' \rangle = \langle \alpha \ell m | \mathcal{A} L_z | \alpha' \ell' m' \rangle - \langle \alpha \ell m | L_z \mathcal{A} | \alpha' \ell' m' \rangle \\ &= \hbar m' \langle \alpha \ell m | \mathcal{A} | \alpha' \ell' m' \rangle - (\hbar m)^* \langle \alpha \ell m | \mathcal{A} | \alpha' \ell' m' \rangle \\ &= \hbar (m' - m) \langle \alpha \ell m | \mathcal{A} | \alpha' \ell' m' \rangle \end{aligned}$$

¹³. Il faut bien qu'il soit associé à quelque chose (autre qu'à des propriétés spatiales) si on veut l'observer...

donc $\langle \alpha \ell m | \mathbf{A} | \alpha' \ell' m' \rangle = 0$ sauf si $m = m'$. De même, $[\mathbf{A}, \vec{L}^2] = 0$ d'où $\hbar(\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)) \langle \alpha \ell m | \mathbf{A} | \alpha' \ell' m' \rangle = 0$, donc $\langle \alpha \ell m | \mathbf{A} | \alpha' \ell' m' \rangle = 0$ sauf si $\ell'(\ell'+1) = \ell(\ell+1) \Leftrightarrow (\ell' = \ell) \vee (\ell' = -\ell - 1) \Leftrightarrow \ell' = \ell$ car 2^e cas impossible.

→ Ses valeurs propres *ne dépendent pas de m* = de la valeur de la projection du moment angulaire L_z :

Puisque $\mathbf{A}$ commute avec $\vec{L}$, les états $|\alpha \ell m\rangle$ sont vecteurs propres de $\mathbf{A}$, et on note $A_{\alpha \ell m}$ les valeurs propres associées. En particulier, $\mathbf{A}$ commute avec L_+ , donc $\forall m, m'$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \alpha \ell m' | [\mathbf{A}, L_+] | \alpha \ell m \rangle = \langle \alpha \ell m' | \mathbf{A} L_+ - L_+ \mathbf{A} | \alpha \ell m \rangle \\ &= \hbar C_+(\ell, m) \langle \alpha, \ell, m' | \mathbf{A} | \alpha, \ell, m+1 \rangle - A_{\alpha, \ell, m} \langle \alpha, \ell, m' | L_+ | \alpha, \ell, m \rangle \\ &= \hbar C_+(\ell, m) A_{\alpha, \ell, m+1} \langle \alpha, \ell, m' | \alpha, \ell, m+1 \rangle - A_{\alpha, \ell, m} \hbar C_+(\ell, m) \langle \alpha, \ell, m' | \alpha, \ell, m+1 \rangle \\ &\propto (A_{\alpha, \ell, m+1} - A_{\alpha, \ell, m}) \mathbb{1}_{m', m+1} \mathbb{1}_{m < \ell} \end{aligned}$$

donc $A_{\alpha, \ell, m+1} - A_{\alpha, \ell, m} = 0$ en prenant $m' = m+1$. Alors de proche en proche, $\forall m, A_{\alpha \ell m} = A_{\alpha \ell 0} =: A_{\alpha \ell}$.

En particulier, les énergies $E_{\alpha \ell m}$ d'un système à symétrie propre sphérique ne dépendent pas de m , ce qui crée une **dégénérescence** $g_\ell = 2\ell + 1$ du niveau $E_{\alpha \ell}$.

→ Pour résumer, les éléments de matrice sont de la forme

$$\mathbf{A} \text{ opérateur scalaire } \Rightarrow \langle \alpha \ell m | \mathbf{A} | \alpha' \ell' m' \rangle = \mathbb{1}_{\ell \ell'} \mathbb{1}_{m m'} A_{\alpha \ell}$$

5.2. Opérateurs vectoriels

$$\begin{aligned} \vec{V} = [V_i]_{i=1,2,3} \text{ est un opérateur vectoriel } &\stackrel{\text{def}}{\iff} \text{ les valeurs moyennes de } \vec{V} \text{ se transforment comme} \\ &\text{comme un vecteur géométrique 3D par rotation} \\ \iff [\langle V_i \rangle_{\Psi'}]_i &= \mathcal{R}_{\vec{u}, \theta}^{(1)} [\langle V_i \rangle_{\Psi}]_i \quad (\forall \vec{u}, \theta, \Psi), \quad |\Psi'\rangle = \mathcal{R}_{\vec{u}, \theta} |\Psi\rangle \\ \iff [L_i, V_j] &= i\hbar A_{ijk} V_k \quad (\forall i, j, k) \\ \iff \begin{cases} [L_{\pm}, V_i^{(1)}] = \hbar C_{\pm}(1, i) V_{i \pm 1}^{(1)} \\ [L_z, V_i^{(1)}] = \hbar i V_i^{(1)} \end{cases} \\ \iff &(\mathbf{V}_i^{(1)})' ??? [18.232] \end{aligned}$$

avec $V_1^{(1)} = \frac{-1}{\sqrt{2}} (V_x + i V_y)$ et $V_0^{(1)} = V_z$ et $V_{-1}^{(1)} = \frac{+1}{\sqrt{2}} (V_x - i V_y)$.¹⁴ Un opérateur vectoriel possède 3 composantes, mais la notion n'a a priori rien à voir avec la notation $\vec{\cdot}$. Contre-exemples : les champs externes, car sont inchangés par rotation du système (ce sont des scalaires). Exemples : $\vec{r}$ par définition, $\vec{p}$, donc $\vec{L}$; $\vec{\mu}$ car le moment magnétique est clairement un vecteur classique, donc $\vec{S}$ car $\vec{\mu} \propto \vec{L} + g_e \vec{S}$.

Citer Wigner-Eckart ici

5.3. Opérateurs tensoriels irréductibles

Généralisent ce qu'on a obtenu pour les opérateurs vectoriels :

$$\begin{aligned} \vec{T} = [T_i^{(q)}]_{i=\llbracket 1, 2q+1 \rrbracket} \text{ est un opérateur tensoriel d'ordre } q &\stackrel{\text{def}}{\iff} (\mathbf{T}_i^{(q)})' ??? [18.233] \\ \iff \begin{cases} [L_{\pm}, T_i^{(q)}] = \hbar C_{\pm}(q, i) T_{i \pm 1}^{(q)} \\ [L_z, T_i^{(q)}] = \hbar i T_i^{(q)} \end{cases} \end{aligned}$$

14. Aslangul, p.685. Dernière ligne plus explicitement :

$$\begin{cases} [L_{\pm}, V_x] = \pm \hbar V_z & [L_{\pm}, V_y] = \pm i \hbar V_z & [L_{\pm}, V_z] = \mp \hbar V_{\pm} \\ [L_z, V_x] = \pm i \hbar V_y & [L_z, V_y] = -i \hbar V_x & [L_z, V_z] = 0 \end{cases} \text{ avec } V_{\pm} = V_x \pm i V_y$$

6. Composition de moments angulaires

Genre (particule avec spin) :

$$\vec{J} = \vec{L} \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}} + \mathbf{1}_{\text{orb}} \otimes \vec{S}$$

et (3 particules) :

$$\vec{L} = \vec{L}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \mathbf{1}_3 + \mathbf{1}_1 \otimes \vec{L}_2 \otimes \mathbf{1}_3 + \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \vec{L}_3$$

(18.5.2 + chap 20)

D'où ça sort ? Soit $\vec{L}$ le générateur des rotations $\mathcal{R}$ du système total agissant dans $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Pour faire tourner le système total, il faut faire tourner à la fois le sous-système 1 et le sous-système 2 :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle) &\stackrel{\text{post.}}{=} (\mathcal{R}_1|\phi\rangle) \otimes (\mathcal{R}_2|\psi\rangle) \\ [\vec{L}_i \text{ gen. rotations du sys. } i] &= \left(e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot\vec{L}_1} |\phi\rangle \right) \otimes \left(e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot\vec{L}_2} |\psi\rangle \right) \\ [e^{i\mathbf{A}} \otimes \mathbf{1} = e^{i\mathbf{A} \otimes \mathbf{1}}] &= \left(e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot\vec{L}_1} \otimes \mathbf{1}_2 \right) \left(\mathbf{1}_1 \otimes e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot\vec{L}_2} \right) |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle \\ [\text{car } [\mathbf{L}_{1,i} \otimes \mathbf{1}_2, \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{L}_{2,i}] = 0] &= e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot(\vec{L}_1 \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \vec{L}_2)} |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle =: e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot\vec{L}} |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle \\ \text{donc } e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot\vec{L}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{R} = e^{\frac{1}{i\hbar}\theta\vec{u}\cdot(\vec{L}_1 \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \vec{L}_2)} &\text{ donc } \vec{L} = \vec{L}_1 \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \vec{L}_2. \end{aligned}$$

7. Somme de deux moments angulaires et base $|JM\rangle$

On considère un système possédant deux moments angulaires $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ associés à des degrés de liberté différents (agissent sur des espaces différents), ainsi que la somme des moments angulaires

$$\vec{J} := \vec{J}_1 \otimes \mathbf{1}_2 + \vec{J}_2 \otimes \mathbf{1}_1 \stackrel{\text{simpl.}}{=} \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

Vecteurs propres de l'ECOC $(\vec{J}_1^2, J_{1z}, \vec{J}_2^2, J_{2z})$ ($\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ agissent sur des espaces différents donc commutent)

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle := |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$$

À partir de maintenant, on raisonne exclusivement dans l'espace propre $\mathcal{E}_{j_1, j_2}$ de dimension

$$\dim(\mathcal{E}_{j_1, j_2}) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

Il existe un autre ensemble d'observables qui commutent. En effet, puisque les $\vec{J}_{1,2}^2$ commutent avec $\vec{J}^2$:

$$[\vec{J}_1^2, \vec{J}^2] = [\vec{J}_1^2, \vec{J}_1^2 + 2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 + \vec{J}_2^2] = [\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2] + 2[\vec{J}_1^2, \vec{J}_1] \cdot \vec{J}_2 = 0$$

les opérateurs $(\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, \vec{J}^2, J_z)$ commutent, et on note $|JM j_1 j_2\rangle$ leurs vecteurs propres communs. Cette base est utile dans certains problèmes pour *diagonaliser des termes de couplage* entre les deux moments.

Puisque $\vec{J}$ est un moment angulaire, on a la quantification

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |JM j_1 j_2\rangle &= \hbar^2 J(J+1) |JM j_1 j_2\rangle \\ J_z |JM j_1 j_2\rangle &= \hbar M |JM j_1 j_2\rangle \end{aligned} \quad \text{avec } J \in \frac{1}{2}\mathbb{N} \text{ et } \{M\} = \llbracket -J, +J \rrbracket$$

Les deux bases orthonormées de $\mathcal{E}_{j_1, j_2}$

$$\{|JM j_1 j_2\rangle\}_{-J \leq M \leq J} \text{ (base couplée)} \quad \text{et} \quad \{|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\}_{\substack{-j_1 \leq m_1 \leq j_1 \\ -j_2 \leq m_2 \leq j_2}} \text{ (base non couplée)}$$

sont reliées par les *coefficients de Clebsch-Jordan* $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle := \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM j_1 j_2 \rangle$ où les deux nombres solitaires font toujours référence aux valeurs propres de $(\vec{J}^2, J_z)$. Une phase globale étant insignifiante, on montre que l'on peut choisir les coefficients réels, donc $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = \langle JM | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$.

On rappelle que j_1 et j_2 sont fixées dans $\mathcal{E}_{j_1, j_2}$, mais pas J , comme le montrera le théorème fondamental d'addition des moments angulaires (on a pas de relation $J \leftrightarrow j_1, j_2$ fixe). Le changement de base s'écrit

$$|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = \sum_{2J=0}^{+\infty} \sum_{M=-J}^{+J} |\alpha JM j_1 j_2\rangle \underbrace{\langle JM | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle}_{\text{Clebsch-Jordan}}$$

$$|\alpha JM j_1 j_2\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} |\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \underbrace{\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle}_{\text{Clebsch-Jordan}}$$

où on a rajouté un jeu de nombres quantiques α dans le cas où le système possède un ECOC avec un jeu d'opérateurs supplémentaire à $(\vec{J}_1^2, J_{1z}, \vec{J}_2^2, J_{2z})$. Les coefficients sont alors indépendants de α car les opérateurs de moment angulaire sont représentés par des matrices indépendantes des nombres α .

Puisque d'une part $\mathbf{J}_z |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = (J_{1z} + J_{2z}) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = \hbar (m_1 + m_2) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ et d'autre part $\mathbf{J}_z |JM j_1 j_2\rangle = \hbar M |JM j_1 j_2\rangle$, on a après changement de base

$$(m_1 + m_2 - M) \langle JM | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = 0$$

donc si $M \neq m_1 + m_2$, le coefficient $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$ est nul. Dit autrement, on a l'identité

$$M \leftrightarrow m_1 + m_2$$

On comprend intuitivement pourquoi, dans $\mathcal{E}_{j_1, j_2}$, un M donné est en général dégénéré : il existe plusieurs (m_1, m_2) de façon à avoir $M = m_1 + m_2$, donc plusieurs J .

Puisque les valeurs maximales de m_1 et m_2 sont j_1 et j_2 , la valeur maximale de M est $j_1 + j_2$, donc J doit prendre au moins une fois la valeur $j_1 + j_2$, et on a même que

$$\max_{\mathcal{E}_{j_1, j_2}} \{J\} = j_1 + j_2 \quad \text{et donc} \quad \{J\} \subset \{j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, (0)\}$$

puisque M varie d'une unité [argument comme quoi $J \in \llbracket 0, j_1 + j_2 \rrbracket$ à renforcer...], $0 \in \{J\}$ seulement si $j_1 + j_2$ est entier.

[Démonstration p.751-754 ou p.757]

dire que $\mathbf{J}_+ = \mathbf{J}_{1+} + \mathbf{J}_{2+}$

Théorème fondamental d'addition de deux moments angulaires :

Dans le sous-espace $\mathcal{E}_{j_1, j_2} = \text{Span}\{|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\}_{-j_{1,2} \leq m_{1,2} \leq j_{1,2}}$ de dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$, les états propres $|JM\rangle$ de $(\vec{J}^2, J_z)$ sont tels que

- La valeur propre J de $\vec{J}^2$ prend les valeurs

$$\{J\} = \llbracket |j_1 - j_2|, j_1 + j_2 \rrbracket$$

- Pour chaque valeur de J , il existe un unique *multiplet* de $2J + 1$ états propres avec

$$\{M\}_J = \llbracket -J, +J \rrbracket$$

Ainsi, ce sous-espace s'écrit :

$$\mathcal{E}_{j_1, j_2} = \bigoplus_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \{|JM\rangle\}_{M \in \llbracket -J, +J \rrbracket}$$

Dit autrement, les coefficients $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$ sont non nuls si et seulement si

$$J \in [|j_1 - j_2|, j_1 + j_2] \quad \text{et} \quad M \in [-J, +J]$$

Pour $J = j_1 + j_2$ et $M = \pm J$, il n'y a qu'une seule possibilité pour la relation $M = m_1 + m_2$:

$$(m_1 = \pm j_1, m_2 = \pm j_2) \quad \text{d'où} \quad \langle j_1, j_2, \pm j_1, \pm j_2 | J = j_1 + j_2, \pm J \rangle = 1$$

Les coefficients de Clebsch-Jordan satisfont les relations de récurrence (à J, j_1, j_2 fixés)

$$C_{\pm}(J, M) \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J, M \pm 1 \rangle = C_{\mp}(j_1, m_1) \langle j_1, j_2, m_1 \mp 1, m_2 | JM \rangle + C_{\mp}(j_2, m_2) \langle j_1, j_2, m_1, m_2 \mp 1 | JM \rangle$$

On peut utiliser ces relations et la non-nullité des coefficients pour donner une démonstration alternative du théorème d'addition des moments angulaires.

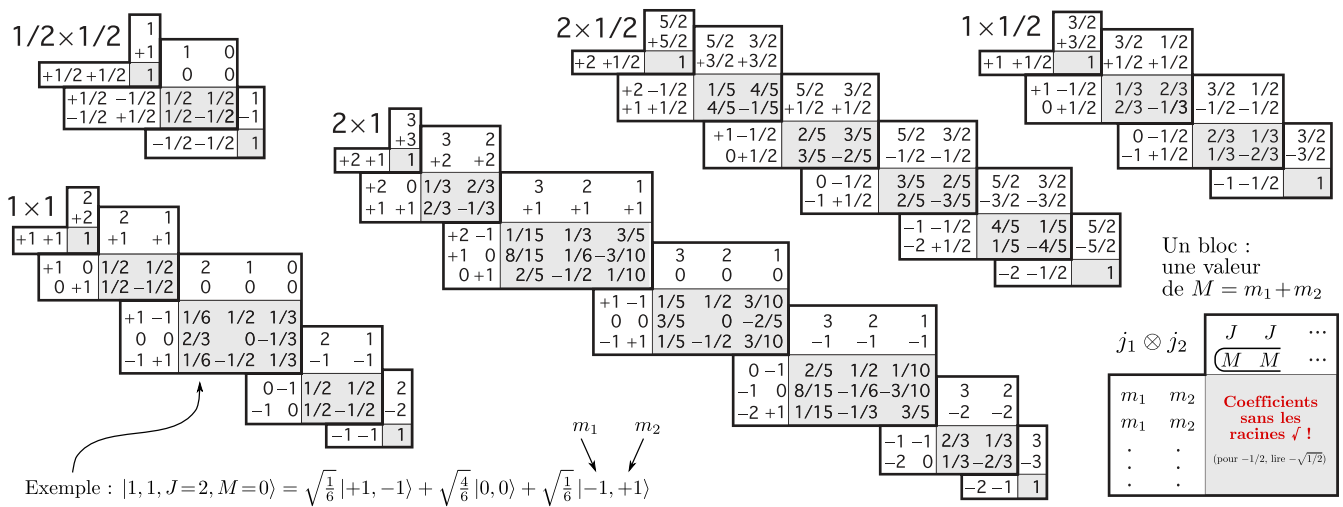


Figure 1. Quelques tables représentant les coefficients de Clebsch-Jordan dans $\mathcal{E}_{j_1, j_2}$. Dans chaque bloc (vérifiant $M = m_1 + m_2$), les lignes et colonnes se somment à 1 en valeur absolue (changement de B.O.N.). Plus de tables : https://en.wikipedia.org/wiki/Table_of_Clebsch-Gordan_coefficients. Conventions de signe de Condon–Shortley et de Wigner, en particulier $\langle j_1, j_1, j_2, J - j_1 | J, J \rangle \in \mathbb{R}_+$ réel positif. Avec cette convention, tous les coefficients sont réels, donc on a bien $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = \langle JM | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$. On a aussi la non-symétrie d'échange (artificielle) $\langle j_1, j_2, -m_2, -m_1 | J, -M \rangle = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1, j_2, m_2, m_1 | J, M \rangle$.

Il existe une façon de résoudre le problème d'addition de deux moments angulaire avec des coefficients plus symétriques que ceux de Clebsch-Jordan : les **symboles 3-j de Wigner**.

État singulet $J = 0$, possible que si $j_1 = j_2 =: j$:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | 0, 0 \rangle \propto \mathbb{1}_{j_1, j_2} \quad \text{et} \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_{m=-j}^{+j} (-1)^{j-m} |j, j, +m, -m\rangle$$

7.1. Addition de deux spins $1/2$

On note $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ les deux moments de spin, et $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ le moment angulaire total. Comme $s_1 = s_2 = 1/2$ sont fixés pour des spins, on est exclusivement dans l'espace $\mathcal{E}_{1/2, 1/2}$ de dimension $(2s_1 + 1) \times (2s_2 + 1) = 4$.

Le théorème général d'addition de moments angulaire affirme que les états propres $|SM\rangle$ de $(\vec{S}^2, S_z)$ sont

- $\{S\} = [|s_1 - s_2|, s_1 + s_2] = \{0, 1\}$
- pour $S = 0$, unique multiplet de $2S + 1 = 1$ états : *état singulet*
- pour $S = 1$, unique multiplet de $2S + 1 = 3$ états : *états triplet*

7.1.1. Diagonalisation à la main

Preuve du théorème d'addition de moments angulaire dans ce cas particulier. On remarque que ($\hbar \equiv 1$)

$$\begin{aligned}\vec{S}^2 &= (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2^2 = S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \\ &= \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + 2S_{1z}S_{2z} + 2S_{1x}S_{2x} + 2S_{1y}S_{2y}\end{aligned}$$

On calcule alors les éléments de matrice $\langle m_1 m_2 | \vec{S}^2 | m'_1 m'_2 \rangle$ dans la base découplée. Pour le deuxième terme : $S_{1z}S_{2z} |\pm\pm\rangle = +\frac{1}{4} |\pm\pm\rangle$ et $S_{1z}S_{2z} |\pm\mp\rangle = -\frac{1}{4} |\pm\mp\rangle$. Pour le troisième terme, on utilise que $S_{i\pm} |\pm\rangle = 0$ et $S_{i\pm} |\mp\rangle = \sqrt{1} |\pm\rangle$ (flip). Ainsi, dans la base $ncpl = (|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle)$, on a

$$\begin{aligned}S_{1+}S_{2-} &=_{ncpl} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad S_{1-}S_{2+} =_{ncpl} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad 2S_{1z}S_{2z} =_{ncpl} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \\ \vec{S}^2 =_{ncpl} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{matrix} |++\rangle \\ |+-\rangle \\ |-+\rangle \\ |--\rangle \end{matrix} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{Eigv}_{\vec{S}^2} = \{0, 2, 2, 2\} \\ =: \{S(S+1)\} \end{array} \right. \quad \begin{aligned} \text{Eigs}_{\vec{S}^2}(0) &= \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} \right\}_{ncpl} \\ \text{Span} &= \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\}_{ncpl} \end{aligned} \\ \text{Eigs}_{\vec{S}^2}(2) &= \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\}_{ncpl} \end{aligned}$$

En posant $\mathcal{E}_{S=1} = \text{Eigs}_{\vec{S}^2}(2)$ et $\mathcal{E}_{S=0} = \text{Eigs}_{\vec{S}^2}(0)$, on a bien $\dim(\mathcal{E}_{S=0} \oplus \mathcal{E}_{S=1}) = 4 = 2 \times 2$, donc $(\vec{S}_1^2, S_2^2, \vec{S}^2, S_z)$ est bien un ensemble *complet* d'observables qui commutent pour $\mathcal{E}_{1/2} \otimes \mathcal{E}_{1/2}$.

7.1.2. Obtention des états à la main

1. On commence par $S = 1$. Puisque $m_1, m_2 \in \{\pm 1/2\}$, la *seule* façon d'obtenir $+1 = M = m_1 + m_2$ est de prendre $m_1 = m_2 = +1/2$. Il n'existe donc qu'un seul coefficient $\langle 1/2, 1/2, m_1 m_2 | 1, 1 \rangle$ non nul :

$$\langle 1/2, 1/2, +1/2, +1/2 | 1, 1 \rangle = 1 \quad \text{donc} \quad \boxed{|1, +1\rangle = |++\rangle}$$

De la même façon, la *seule* façon d'obtenir $-1 = M = m_1 + m_2$ est de prendre $m_1 = m_2 = -1/2$:

$$\langle 1/2, 1/2, -1/2, -1/2 | 1, 1 \rangle = 1 \quad \text{donc} \quad \boxed{|1, -1\rangle = |--\rangle}$$

2. On peut alors utiliser les *opérateurs d'échelle* ($\hbar \equiv 1$) pour obtenir $|1, 0\rangle$:

$$\begin{aligned}S_- |1, +1\rangle &= \sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle \\ [\text{prec.}] &= (S_{1-} + S_{2-}) |++\rangle = S_{1-} |++\rangle + S_{2-} |++\rangle \\ &= \sqrt{1/2(1/2+1) - 1/2(1/2-1)} (|-+\rangle + |+-\rangle)\end{aligned}$$

donc

$$\boxed{|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-+\rangle + |+-\rangle)}$$

3. Enfin, il reste $|0, 0\rangle$. Puisque l'on a déterminé tous les autres états, on peut faire jouer l'*orthogonalité* de la base couplée. Posons $|0, 0\rangle = a |++\rangle + b |--\rangle + c |+-\rangle + d |-+\rangle$. Les orthogonalités $\langle 1, +1 | 0, 0 \rangle = \langle 1, -1 | 0, 0 \rangle = 0$ imposent $a = b = 0$. L'orthogonalité $0 = \langle 1, 0 | 0, 0 \rangle \propto (\langle -+ | + \rangle + \langle +- | - \rangle) (c |+-\rangle + d |-+\rangle) = c + d$ (car $\langle -+ | -+ \rangle = \langle +- | +- \rangle = 1$ et $\langle -+ | +- \rangle = \langle +- | -+ \rangle = 0$) impose $d = -c$. Enfin, la normalisation $\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle = 1$ impose $|c|^2 = 1/\sqrt{2}$, et la convention « Clebsch-Jordan $\in \mathbb{R}$ » donne

$$\boxed{|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)}$$

On obtient alors la base couplée de $\mathcal{E}_{1/2, 1/2} = \mathcal{E}_{S=1} \oplus \mathcal{E}_{S=0}$:

$$\left. \begin{aligned} |1, +1\rangle &= |++\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1, -1\rangle &= |--\rangle \\ |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{états triplets, engendrant } \mathcal{E}_1 \\ \text{état singulet, engendrant } \mathcal{E}_0 \end{array}$$

On remarque que les états triplets sont **symétriques** par permutation $1 \leftrightarrow 2$, alors que l'état singulet est **antisymétrique** par permutation et *invariant par rotations*. Ceci a des implications sur la construction des spin-orbitales d'un couple de fermions.

8. Théorème de Wigner-Eckart

Aslangul p762-765

Le théorème de Wigner-Eckart est utile pour déterminer des règles de sélection par exemple, mais lorsque l'on cherche à évaluer des termes du type $\langle \alpha' j m' | \vec{V} | \alpha j m \rangle$ avec $\vec{V}$ **vectoriel**, il faut déterminer cet élément de matrice, et le Wigner-Eckart ne nous aide pas. On a pour cela le **théorème de projection** :

$$\langle \alpha' j m' | \vec{V} | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha' j m' | (\vec{V} \cdot \vec{J}) \vec{J} | \alpha j m \rangle}{\langle \alpha' j m' | J^2 | \alpha j m \rangle}$$

Physiquement, lorsque $\vec{J}$ est conservé mais que $\vec{V}$ ne l'est pas, on comprend cet élément de matrice comme la valeur moyenne dans le temps de $\vec{V}$, précessant (puisque c'est un opérateur vectoriel) autour de $\vec{J}$ fixé d'axe $\vec{u}$. Cette valeur moyenne est alors la projection sur l'axe $\vec{u}$:

$$\vec{V}_{\text{avg}} = (\vec{V} \cdot \vec{u}) \vec{u} = \frac{1}{\|\vec{J}\|^2} (\vec{V} \cdot \vec{J}) \vec{J}$$

Preuve

Puisque $\vec{V}$ est un opérateur vectoriel, on a l'identité de Pauli [todo] :

$$[J^2, [J^2, \vec{V}]] = 2\hbar^2 ([J^2, \vec{V}]_+ - 2(\vec{V} \cdot \vec{J}) \vec{J})$$

Or $\langle j m' | [J^2, \underbrace{[J^2, \vec{V}]}_X] | j m \rangle = \langle j m' | J^2 X - X J^2 | j m \rangle = \hbar^2 j(j+1) \langle j m' | X - X | j m \rangle = 0$ (car $j' = j$!). Donc

$$\begin{aligned} 0 &= \langle j m' | [J^2, [J^2, \vec{V}]] | j m \rangle \\ &\propto \langle j m' | [J^2, \vec{V}]_+ | j m \rangle - 2 \langle j m' | (\vec{V} \cdot \vec{J}) \vec{J} | j m \rangle \end{aligned}$$

donc $\langle j m' | (\vec{V} \cdot \vec{J}) \vec{J} | j m \rangle = \frac{1}{2} \langle j m' | J^2 \vec{V} + \vec{V} J^2 | j m \rangle = \hbar^2 j(j+1) \langle j m' | \vec{V} | j m \rangle$.

[todo] Autre preuve, basée sur le théorème de Wigner lui-même. Éléments diagonaux :

$$\begin{aligned} \langle j m | \vec{V} \cdot \vec{J} | j m \rangle &= \langle j m | V_0 J_0 - J_{+1} V_{+1} - J_{-1} V_{-1} | j m \rangle \\ [J_0 = J_z, \sqrt{2} J_{\pm 1} = \mp J_{\pm}] &= \hbar m \langle j m | V_0 | j m \rangle + \dots \end{aligned}$$

§3.36 https://www.uni-kassel.de/fb10/fileadmin/datas/fb10/physik/nanopartikel/vorlesung/QMII_WS17_18_Pastor.pdf

Une application : déterminer $J_{1z} |JM j_1 j_2\rangle$ dans un couplage $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ (par exemple pour l'effet Zeeman). A priori, un vecteur de la base couplée n'est pas propre de J_{1z} . Mais puisque J_{1z} est un opérateur vectoriel pour $\vec{J}$, grâce au théorème de projection,

$$\langle JM j_1 j_2 | J_{1z} | JM j_1 j_2 \rangle = \frac{\langle JM j_1 j_2 | (\vec{J}_1 \cdot \vec{J}) J_z | JM j_1 j_2 \rangle}{\langle JM j_1 j_2 | J^2 | JM j_1 j_2 \rangle} = \frac{\hbar M}{\hbar^2 J(J+1)} \langle JM j_1 j_2 | \vec{J}_1 \cdot \vec{J} | JM j_1 j_2 \rangle$$

or $\vec{J}_2^2 = (\vec{J} - \vec{J}_1)^2 = \vec{J}^2 - 2\vec{J}_1 \cdot \vec{J} + \vec{J}_1^2$ donc $\vec{J}_1 \cdot \vec{J} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 + \vec{J}_1^2 - \vec{J}_2^2)$ donc on obtient la projection du moment angulaire total multiplié par une sorte de facteur de Landé :

$$\langle JM j_1 j_2 | J_{1z} | JM j_1 j_2 \rangle = \frac{J(J+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{2J(J+1)} M$$

9. Matrices de rotations

Le Bellac, https://en.wikipedia.org/wiki/Wigner_D-matrix

10. Règles de sélection

Il est bien connu que les scalaires et les vecteurs sont les premiers éléments apparaissant lors d'un développement multipolaire. Par exemple, le potentiel électrostatique

créé en son extérieur par une certaine distribution $\rho(\vec{r})$ de charge d'extension *finie* commence par un terme où apparaît la charge totale (scalaire), suivi par un autre où figure le moment dipolaire (vecteur). Les termes suivants font ressortir des quantités de type tensoriel impliquant des combinaisons de plus en plus complexes, résultant de la moyenne spatiale avec $\rho(\vec{r})$ de monômes des coordonnées dont le degré croît avec le rang du terme considéré. Ce type de développement survient aussi en Mécanique quantique, le rôle de la densité étant joué d'une façon générale par une quantité du genre $\psi_a^*(\vec{r})\psi_b(\vec{r})$, représentant un certain élément de matrice $\langle\psi_a|\bullet|\psi_b\rangle$; c'est par exemple le cas dans la description semi-classique de l'interaction entre un atome et un champ électromagnétique (voir chapitre 24, sous-section 24.5.1). Pour ce type de question, les arguments de symétrie, tout particulièrement celle liée à la rotation, jouent un rôle essentiel en tant qu'indicateurs des transitions permises ou interdites – éventuellement dans le cadre d'une approximation donnée. Ils débouchent tout naturellement sur la notion de *règle de sélection*, dont un premier exemple sera cité p. 763.

11. TODO

Revenant à l'expression (17.123) de l'opérateur d'une rotation de 2π , on voit que si m est entier, alors $\mathcal{R}_{\vec{u}, 2\pi} = 1$, et si m est demi-entier, $\mathcal{R}_{\vec{u}, 2\pi} = -1$. Pour un système donné, pour une rotation de 2π , c'est *l'ensemble* des états qui peut au plus acquérir une phase unique ; ceci confirme que c'est bien l'ensemble des valeurs de m qui est composé soit d'entiers, soit de demi-entiers. Le mélange de ces deux types de nombres n'est pas possible et constitue une *règle de supersélection* interdisant toute communication entre des espaces d'événements associés chacun au caractère entier ou demi-entier de j . Physiquement, ceci signifie, par exemple, que partant d'un ensemble de particules toutes de moment cinétique entier (*bosons*), la théorie quantique standard interdit tout processus conduisant à un ensemble de spins demi-entiers (*fermions*) en nombre impair. Il existe toutefois des scénarios permettant l'émergence de fermions (spins demi-entiers) dans une théorie ne contenant que des champs de bosons [26]. ♦

définir un moment cinétique total $\vec{J}$ par la relation :

$$\vec{J} \stackrel{\text{def}}{=} \vec{L} + \vec{S} . \quad (18.166)$$

Cette relation est naturelle mais, telle quelle, n'a pas vraiment de contenu physique et, au fond, n'a rien d'évident ; on verra au chapitre 20 pourquoi elle s'impose comme une nécessité. Quoi qu'il en soit, une fois admise (18.166), la description quantique d'une

Pour la somme d'un nombre *quelconque* de moments cinétiques, $\vec{J} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^N \vec{J}_i$, le théorème fondamental permet d'affirmer que la valeur *maximale* de J , $J_{\max}$, est égale à $\sum_{i=1}^N J_i$. Il en résulte en particulier que pour N moments cinétiques identiques $J_i = 1/2$, $J_{\max} = N/2$: ainsi, la réunion des $\vec{J}_i$ est une particule (composite) de moment cinétique *entier* (boson) si N est pair, *demi-entier* (fermion) si N est impair.