

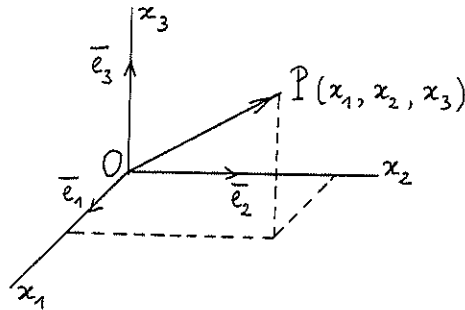
#### IV PROPRIETES DE TRANSFORMATION PAR ROTATION

---

##### 1. Paramétrisations des rotations

Puisque le moment cinétique d'un système est intimement lié à ses propriétés de transformation par rotation, il convient d'étudier celles-ci de manière détaillée. Nous commençons par quelques rappels élémentaires sur la définition des rotations et leurs paramétrisations possibles.

Rapportons l'espace à trois dimensions à un trièdre cartésien dextrogyre  $O x y z \equiv O x_1 x_2 x_3$ . Désignons par  $\bar{e}_1$ ,  $\bar{e}_2$  et  $\bar{e}_3$  les vecteurs unité dirigés suivant les trois axes.



Un point  $P$  de coordonnées  $x_1, x_2, x_3$  est repéré par le vecteur

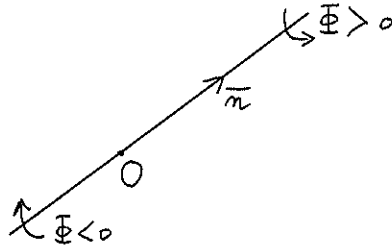
$$\bar{x} \equiv \overline{OP} = \sum_{i=1}^3 x_i \bar{e}_i \quad (1.1)$$

$$\text{ou } \bar{x} = \bar{e} \cdot x, \quad (1.2)$$

en utilisant la notation matricielle  $\bar{e} = (\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3)$  et  $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ .

Une rotation du système de coordonnées est caractérisée par la donnée de l'axe et de l'angle de rotation. Soient  $\bar{n}$  le vecteur unité dirigé suivant l'axe de rotation et  $\bar{\Phi}$  la valeur algébrique de l'angle de rotation (par convention,  $\bar{\Phi}$  est positif si la rotation fait

progresser une vis à droite dans le sens de  $\vec{n}$ ).  $\Phi$  varie dans le domaine  $-\pi \leq \Phi \leq \pi$ .



Nous désignerons la rotation par  $R(\vec{n}, \Phi)$ .

Les rotations d'un système de coordonnées satisfont les postulats d'existence d'un groupe :

- (i) l'application successive d'une rotation  $R_1$  et d'une rotation  $R_2$  donne lieu à une rotation  $R_3$ ,

$$R_3 = R_2 R_1 ; \quad (1.3)$$

- (ii) la loi de composition des rotations est associative, c'est-à-dire que

$$(R_1 R_2) R_3 = R_1 (R_2 R_3) ; \quad (1.4)$$

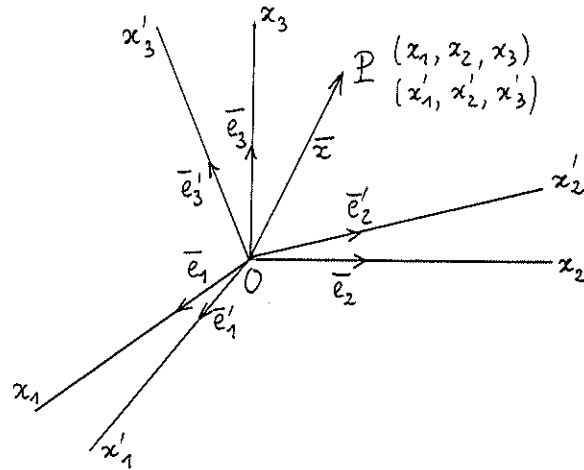
- (iii) le neutre est la transformation identique  $\mathbb{1}$  ou rotation d'angle nul,

$$R \mathbb{1} = \mathbb{1} R = R ; \quad (1.5)$$

- (iv) toute rotation possède un inverse, la rotation de même axe et d'angle opposé,

$$R^{-1}(\vec{n}, \Phi) = R(\vec{n}, -\Phi). \quad (1.6)$$

Soient  $Ox'_1 \ x'_2 \ x'_3$  le nouveau trièdre de référence,  $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2$  et  $\vec{e}'_3$  les vecteurs unité dirigés suivant les nouveaux axes et  $x'_1, x'_2, x'_3$  les coordonnées de  $P$  dans le nouveau trièdre.



Tout changement de base se faisant au moyen d'une matrice  $3 \times 3$   $a$ , réelle et non singulière ( $\det a \neq 0$ ), on a

$$\bar{e}_i = \sum_j \bar{e}'_j a_{ji} \quad (1.7)$$

ou

$$\bar{e} = \bar{e}' \cdot a, \quad (1.8)$$

$$\bar{e}' = \bar{e} \cdot a^{-1}. \quad (1.9)$$

Dans la nouvelle base, le vecteur  $\bar{x}$  s'écrit sous la forme

$$\bar{x} = \bar{e}' \cdot x' \quad (1.10)$$

et ses nouvelles coordonnées sont données par

$$x' = a \cdot x. \quad (1.11)$$

Le changement de base induit par une rotation du système de coordonnées a pour propriétés de conserver la longueur des vecteurs et de transformer un trièdre dextrogyre en un autre trièdre dextrogyre. Examinons quelles restrictions imposent ces conditions à la matrice  $a$ . La longueur  $|\bar{x}|$  du vecteur  $\bar{x}$  est définie par

$$|\bar{x}|^2 = \sum_{i=1}^3 (x_i)^2 = \tilde{x} \cdot x, \quad (1.12)$$

où  $\sim$  désigne l'opération de transposition. Son invariance, exprimée par

$$\tilde{x}' \cdot x' = \tilde{x} \cdot x, \quad (1.13)$$

entraîne en vertu de (1.11) que

$$\tilde{a} \cdot a = a \cdot \tilde{a} = \mathbb{1}. \quad (1.14)$$

Les matrices qui jouissent de la propriété (1.14) sont dites orthogonales. Comme pour ces matrices  $(\det a)^2 = 1$ , elles se séparent en deux catégories suivant que  $\det a = +1$  ou  $-1$ . Les rotations correspondent à la première classe. En effet, on peut passer d'une manière continue du trièdre  $O x_1 x_2 x_3$  au trièdre  $O x'_1 x'_2 x'_3$  par une succession de rotations infinitésimales, ce qui revient à dire que l'on peut passer de manière continue de la transformation identique à n'importe quelle rotation. Or la transformation identique correspond à  $a = \mathbb{1}$  et à partir d'elle on ne peut aboutir qu'à des transformations pour lesquelles  $\det a = +1$ . Les transformations pour lesquelles  $\det a = -1$  sont les rotations-réflexions, qui combinent les rotations avec l'opération d'inversion  $x' = -x$  et qui font passer d'un trièdre dextrogyre à un trièdre lévogyre. Nous avons donc établi que les rotations d'un système de coordonnées correspondent aux matrices orthogonales à déterminant  $+1$ , appelées aussi matrices orthogonales unimodulaires. La matrice associée à une rotation est définie de façon unique. Réciproquement, à toute matrice réelle, orthogonale, unimodulaire correspond une et une seule rotation. De plus, au produit (1.3) de deux rotations est associé le produit des matrices correspondantes

$$a_3 = a_2 a_1. \quad (1.15)$$

Les matrices 3 x 3 orthogonales dépendent de neuf paramètres qui doivent satisfaire les relations (1.14), c'est-à-dire

$$\sum_{j=1}^3 a_{ji} a_{jk} = \sum_{j=1}^3 a_{ij} a_{kj} = \delta_{ik} . \quad (1.16)$$

Le nombre de relations indépendantes est égal à 6, de telle sorte que les matrices orthogonales ne dépendent en fait que de trois paramètres indépendants. On peut prendre pour ceux-ci deux des composantes  $n_1, n_2, n_3$  de  $\bar{n}$  ( $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$ ) et l'angle de rotation  $\bar{\Phi}$ . Nous désignerons la matrice  $a$  correspondant à une rotation  $R(\bar{n}, \bar{\Phi})$  par  $a(\bar{n}, \bar{\Phi})$ . Notons que

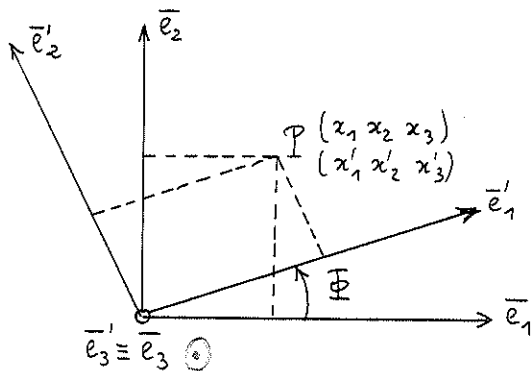
$$a^{-1}(\bar{n}, \bar{\Phi}) = a(\bar{n}, -\bar{\Phi}) = \tilde{a}(n, \Phi) . \quad (1.17)$$

Ecrivons les matrices  $a$  correspondant aux rotations autour des axes de coordonnées. Pour une rotation d'angle  $\bar{\Phi}$  autour de l'axe  $\bar{e}_3$ , représentée dans la figure ci-dessous, on a

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos \bar{\Phi} + x_2 \sin \bar{\Phi} , \\ x'_2 &= -x_1 \sin \bar{\Phi} + x_2 \cos \bar{\Phi} , \\ x'_3 &= x_3 , \end{aligned} \quad (1.18)$$

d'où

$$a(\bar{e}_3, \bar{\Phi}) = \begin{pmatrix} \cos \bar{\Phi} & \sin \bar{\Phi} & 0 \\ -\sin \bar{\Phi} & \cos \bar{\Phi} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \quad (1.19)$$



Pour des rotations d'angle  $\bar{\Phi}$  autour de  $\bar{e}_1$  ou  $\bar{e}_2$ , on trouve d'une manière analogue que

$$a(\bar{e}_1, \bar{\Phi}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \bar{\Phi} & \sin \bar{\Phi} \\ 0 & -\sin \bar{\Phi} & \cos \bar{\Phi} \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

$$\text{et } a(\bar{e}_2, \bar{\Phi}) = \begin{pmatrix} \cos \bar{\Phi} & 0 & -\sin \bar{\Phi} \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \bar{\Phi} & 0 & \cos \bar{\Phi} \end{pmatrix}. \quad (1.21)$$

Pour une rotation infinitésimale autour de l'axe  $\bar{e}_3$ , c'est-à-dire pour une rotation d'angle  $d\bar{\Phi}$  infiniment petit autour de  $\bar{e}_3$ , la matrice (1.19) devient

$$a(\bar{e}_3, d\bar{\Phi}) = \begin{pmatrix} 1 & d\bar{\Phi} & 0 \\ -d\bar{\Phi} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

et la transformation (1.11) se récrit

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \left[ \mathbb{1} - d\bar{\Phi} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

D'une manière générale, une rotation infinitésimale d'angle  $d\bar{\Phi}$  autour de  $\bar{n}$  donne lieu à la matrice

$$a(\bar{n}, d\bar{\Phi}) = \begin{pmatrix} 1 & n_3 d\bar{\Phi} & -n_2 d\bar{\Phi} \\ -n_3 d\bar{\Phi} & 1 & n_1 d\bar{\Phi} \\ n_2 d\bar{\Phi} & -n_1 d\bar{\Phi} & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.24)$$

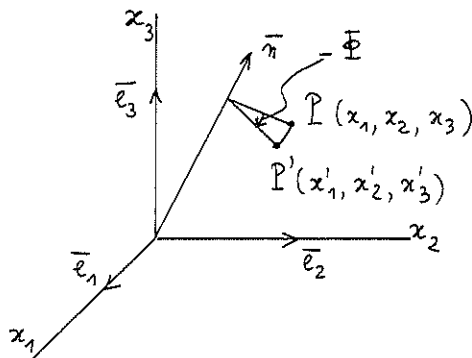
correspondant à la transformation

$$x'_i = x_i - d\Phi (\bar{n} \wedge \bar{x})_i . \quad (1.25)$$

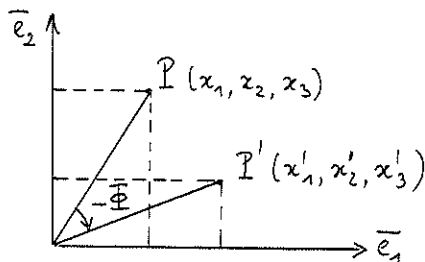
Dans ce qui précède, nous avons étudié les rotations du système de coordonnées tout en maintenant les points fixes. Il est évident qu'il existe une autre manière, complètement équivalente, d'envisager les rotations, qui consiste à faire tourner les points autour du même axe, mais en sens opposé tout en maintenant fixe le trièdre de référence. Si au point  $P$  de coordonnées  $x_1, x_2, x_3$  dans le trièdre  $O x_1 x_2 x_3$ , nous faisons correspondre le point  $P'$ , qui s'obtient à partir de  $P$  par une rotation d'angle  $-\Phi$  autour de  $\bar{n}$ , les coordonnées  $x'$  de  $P'$  dans le même trièdre s'obtiennent à partir de  $x$  par l'application d'une matrice  $b(\bar{n}_3, -\Phi)$ , identique à  $a(\bar{n}_3, \Phi)$  :

$$x' = b(\bar{n}, -\Phi) x , \quad (1.26)$$

$$b(\bar{n}, -\Phi) = a(\bar{n}, \Phi) . \quad (1.27)$$



A titre d'exemple, considérons le cas d'une rotation des points autour de l'axe  $\bar{e}_3$ , représentée dans la figure ci-dessous.



Les coordonnées de  $P'$  sont liées à celles de  $P$  par des relations identiques à (1.18) et par conséquent

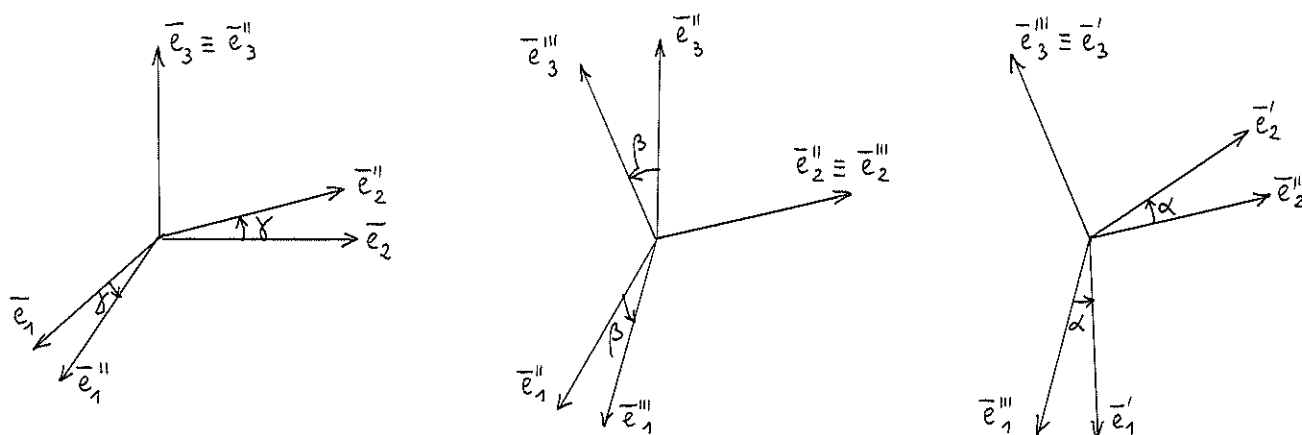
$$b(\bar{e}_3, -\Phi) = a(\bar{e}_3, \Phi) = \begin{pmatrix} \cos \Phi & \sin \Phi & 0 \\ -\sin \Phi & \cos \Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

Une rotation donnée  $R(\bar{n}, \Phi)$  peut donc être concrétisée de deux manières complètement équivalentes : soit par une rotation du trièdre d'angle  $\Phi$  autour de  $\bar{n}$ , les points restant fixes, soit par une rotation des points d'angle  $-\Phi$  autour de  $\bar{n}$ , le trièdre restant fixe. Dans le premier cas, lui est associée la matrice  $a(\bar{n}, \Phi)$ , dans le second cas la matrice  $b(\bar{n}, -\Phi)$ . Il est donc clair que lorsque l'on donne un axe et un angle de rotation, il y a toujours lieu de préciser si l'on envisage la rotation du trièdre ou celle des points.

Au lieu d'utiliser comme paramètres des rotations deux des composantes de  $\bar{n}$  et l'angle de rotation, on peut choisir également les trois angles d'Euler  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ . Il existe diverses conventions pour définir ces angles. Nous adopterons ici celle utilisée par Wigner. Considérons une rotation du trièdre  $x_1 x_2 x_3$  conduisant au nouveau trièdre  $x_1^i x_2^i x_3^i$ . Cette rotation peut être effectuée en trois étapes :

- (i) une rotation de  $x_1 x_2 x_3$  d'angle  $\gamma$  autour de  $\bar{e}_3$  conduisant au trièdre  $x_1'' x_2'' x_3''$  ;
- (ii) une rotation de  $x_1'' x_2'' x_3''$  d'angle  $\beta$  autour de  $\bar{e}_2''$  conduisant au trièdre  $x_1''' x_2''' x_3'''$  ;
- (iii) une rotation de  $x_1''' x_2''' x_3'''$  d'angle  $\alpha$  autour de  $\bar{e}_3'''$  conduisant au trièdre  $x_1^i x_2^i x_3^i$ .





Les angles  $\alpha, \beta, \gamma$  varient entre les bornes  $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ ,  $0 \leq \beta \leq \pi$  et  $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ .

Par la rotation  $R(\bar{e}_3, \gamma)$ , les coordonnées  $x$  d'un point  $P$  se transforment en

$$x'' = a(\bar{e}_3, \gamma) x, \quad (1.29)$$

où

$$a(\bar{e}_3, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.30)$$

en vertu de (1.19). Par la rotation  $R(\bar{e}_2'', \beta)$ ,  $x''$  se transforme en

$$x''' = a(\bar{e}_2'', \beta) x'', \quad (1.31)$$

où

$$a(\bar{e}_2'', \beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

en vertu de (1.21). Finalement, par la rotation  $R(\bar{e}_3''', \alpha)$ ,  $x'''$  se

transforme en

$$x' = a(\bar{e}_3''', \alpha) x'' , \quad (1.33)$$

où

$$a(\bar{e}_3''', \alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \quad (1.34)$$

Par conséquent, par la rotation résultante

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R(\bar{e}_3''', \alpha) R(\bar{e}_2'', \beta) R(\bar{e}_3, \gamma) , \quad (1.35)$$

les coordonnées  $x$  de  $P$  se transforment en

$$x' = a(\alpha, \beta, \gamma) x , \quad (1.36)$$

où

$$\begin{aligned} a(\alpha, \beta, \gamma) &= a(\bar{e}_3''', \alpha) a(\bar{e}_2'', \beta) a(\bar{e}_3, \gamma) \\ &= \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma & \cos \alpha \cos \beta \sin \gamma + \sin \alpha \cos \gamma & -\cos \alpha \sin \beta \\ -\sin \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \alpha \cos \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \alpha \sin \beta \\ \sin \beta \cos \gamma & \sin \beta \sin \gamma & \cos \beta \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (1.37)$$

La composition de deux rotations d'angles respectifs  $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ ,  $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$  conduit à une rotation d'angles  $\alpha_3, \beta_3, \gamma_3$  :

$$R(\alpha_3, \beta_3, \gamma_3) = R(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) R(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1) . \quad (1.38)$$

Les relations entre les angles ne sont pas faciles à écrire. Par contre la matrice associée à la rotation résultante est facile à obtenir : c'est le produit des matrices associées aux rotations composantes :

$$a(\alpha_3, \beta_3, \gamma_3) = a(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) a(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1) . \quad (1.39)$$

Les relations (1.35) et (1.37) fournissent un exemple de composition de rotations puisqu'elles peuvent se récrire sous la forme

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R(\alpha, 0, 0) R(0, \beta, 0) R(0, 0, \gamma) \quad (1.40)$$

et

$$a(\alpha, \beta, \gamma) = a(\alpha, 0, 0) a(0, \beta, 0) a(0, 0, \gamma). \quad (1.41)$$

Un autre exemple de composition de rotations est

$$R(0, 0, 0) = R(-\gamma, -\beta, -\alpha) R(\alpha, \beta, \gamma) = R(\alpha, \beta, \gamma) R(-\gamma, -\beta, -\alpha), \quad (1.42)$$

qui exprime le fait que la rotation inverse de la rotation d'angles  $(\alpha, \beta, \gamma)$  est la rotation d'angles  $(-\gamma, -\beta, -\alpha)$  :

$$R^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = R(-\gamma, -\beta, -\alpha) = R(-\gamma, 0, 0) R(0, -\beta, 0) R(0, 0, -\alpha). \quad (1.43)$$

## 2. Effet d'une rotation sur un système physique

Considérons une rotation  $R(\bar{n}, \Phi)$  et visualisons-la par une rotation du système de coordonnées d'angle  $\Phi$  autour de  $\bar{n}$ , les points du système restant fixes. Toutes les grandeurs physiques attachées aux points du système le restent au cours de la rotation.

Considérons d'abord le cas le plus simple qui est celui d'un système physique constitué d'une seule particule dont l'état est représenté par la fonction d'onde  $\psi(x)$  dépendant seulement des variables d'espace  $x$  ( $\psi(x)$  est appelé champ scalaire). Après la rotation, la particule est dans un autre état représenté par la fonction d'onde  $\psi'(x)$  qui se déduit de  $\psi(x)$  par l'application d'un certain opérateur  $P_R$  :

$$\psi'(x) = P_R \psi(x). \quad (2.1)$$

La valeur numérique de la fonction d'onde en un point donné reste constante au cours de la rotation, ce qui signifie que la valeur de  $\psi$  en  $P$  dans le premier système de coordonnées est égale à celle de  $\psi'$  au même point  $P$  dans le second système de coordonnées :

$$\psi'(x') = \psi(x) \quad , \quad (2.2)$$

où

$$x' = a(\bar{n}, \bar{\Phi}) x \quad . \quad (2.3)$$

En remplaçant dans (2.2) et (2.3)  $x$  par  $R^{-1} x$  et en combinant avec (2.1), on obtient

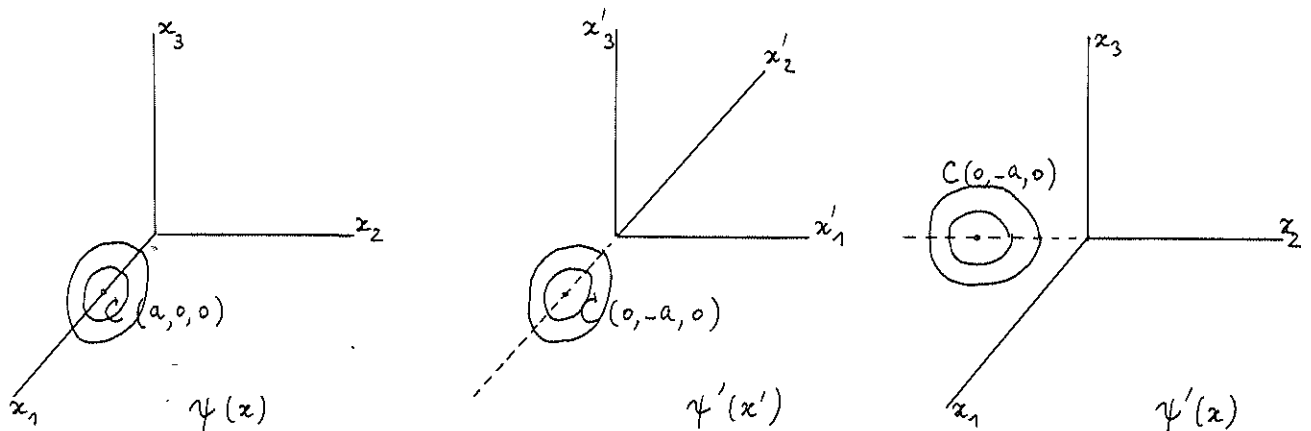
$$\psi'(x) = \mathbb{P}_R \psi(x) = \psi(R^{-1} x) \quad . \quad (2.4)$$

Comme exemple, supposons que

$$\psi(x) = N e^{-\left[ (x_1 - a)^2 + x_2^2 + x_3^2 \right]} \quad , \quad (2.5)$$

où  $a$  est un paramètre et  $N$  la constante de normalisation, et que  $R(\bar{n}, \bar{\Phi}) = R(\bar{e}_3, \frac{\pi}{2})$ . Un point de coordonnées  $x$  avant la rotation  $a$ , après la rotation, les coordonnées

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_2 \quad , \\ x'_2 &= -x_1 \quad , \\ x'_3 &= x_3 \quad . \end{aligned} \quad (2.6)$$



En vertu de (2.2), (2.5) et (2.6), on a

$$\psi'(x') = \psi(x) = N e^{-\left[ (-x'_2 - a)^2 + x'^2_1 + x'^2_3 \right]} \quad (2.7)$$

et par conséquent

$$\psi'(x) = N e^{-[x_1^2 + (x_2+a)^2 + x_3^2]} \quad (2.8)$$

Les surfaces à  $\psi$  constante sont des sphères centrées au point C (a,0,0), celles à  $\psi'$  constante sont des sphères centrées au point C (0,-a,0).

L'opérateur de rotation  $P_R$  est un opérateur linéaire :

$$\begin{aligned} P_R [a_1 \psi_1(x) + a_2 \psi_2(x)] &= a_1 \psi_1(R^{-1}x) + a_2 \psi_2(R^{-1}x) \\ &= a_1 P_R \psi_1(x) + a_2 P_R \psi_2(x). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Il est de plus unitaire :

$$P_R P_R^+ = P_R^+ P_R = 1, \quad (2.10)$$

car les fonctions d'onde  $\psi(x)$  et  $\psi'(x)$  sont normées.

Si l'on effectue successivement deux rotations  $R_1$  et  $R_2$  et que

$$\psi'(x) = P_{R_1} \psi(x), \quad (2.11)$$

$$\psi''(x) = P_{R_2} \psi'(x),$$

alors à la rotation résultante

$$R_3 = R_2 R_1 \quad (2.12)$$

correspond la transformation

$$\psi''(x) = P_{R_3} \psi(x) = P_{R_2} P_{R_1} \psi(x) \quad (2.13)$$

et par conséquent le produit des opérateurs de rotation

$$P_{R_3} = P_{R_2} P_{R_1}. \quad (2.14)$$

Tout ceci se généralise sans difficulté à un système de n particules, la fonction d'onde  $\psi(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)})$  se transformant dans la rotation R en

$$\psi'(x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) = \mathbb{P}_R \psi(x^{(1)}, \dots, x^{(n)}) = \psi(R^{-1}x^{(1)}, \dots, R^{-1}x^{(n)}). \quad (2.15)$$

L'opérateur de rotation  $\mathbb{P}_R$  jouit comme plus haut des propriétés (2.9), (2.10) et (2.14).

Il nous reste maintenant à déterminer la loi de transformation des observables. Soit  $Q$  une observable et  $Q'$  sa transformée dans la rotation  $R$ . Physiquement, l'observable  $Q$  représente une opération de mesure et la transformation de  $Q$  en  $Q'$  correspond à la rotation des axes de coordonnées, le système physique et l'instrument de mesure restant fixes. Par conséquent, la valeur moyenne des mesures de  $Q$  effectuées sur le système dans l'état représenté par la fonction d'onde  $\psi(x)$  est égale à celle des mesures de  $Q'$  effectuées sur le système dans l'état représenté par la fonction d'onde  $\psi'(x)$ , soit

$$\int \psi^*(x) Q \psi(x) dx = \int \psi'^*(x) Q' \psi'(x) dx. \quad (2.16)$$

En vertu de (2.1), cette relation s'écrit

$$\int \psi^*(x) Q \psi(x) dx = \int \psi^*(x) (\mathbb{P}_R^+ Q' \mathbb{P}_R) \psi(x) dx. \quad (2.17)$$

Comme elle doit être vérifiée quelle que soit  $\psi(x)$ , on a

$$Q = \mathbb{P}_R^+ Q' \mathbb{P}_R, \quad (2.18)$$

c'est-à-dire

$$Q' = \mathbb{P}_R Q \mathbb{P}_R^+. \quad (2.19)$$

En particulier si une observable  $S$  représente une grandeur scalaire, c'est-à-dire une grandeur invariante par rotation, elle possède la propriété

$$S' = \mathbb{P}_R S \mathbb{P}_R^+ = S \quad (2.20)$$

quel que soit  $R$ . Puisque  $\mathbb{P}_R$  est unitaire, cette relation se réécrit

$$[\mathbb{P}_R, S] = 0. \quad (2.21)$$

Donc une observable invariante par rotation commute avec tous les opérateurs de rotation. C'est le cas notamment pour le hamiltonien d'un système de particules indépendantes dans un potentiel à symétrie sphérique.

Un autre cas intéressant est celui des opérateurs vectoriels. Commençons par étudier la loi de transformation de l'opérateur  $\bar{x}_{op}$  de composantes  $(x_{op})_i$   $i = 1, 2, 3$ . Pour chaque valeur de  $i$ , l'opérateur  $(x'_{op})_i$  est le transformé par rotation de l'opérateur  $(x_{op})_i$  et l'on a donc en vertu de (2.19)

$$(x'_{op})_i = \mathbb{P}_R (x_{op})_i \mathbb{P}_R^+ . \quad (2.22)$$

Pour que la théorie soit consistante, il faut que l'opérateur  $\bar{x}_{op}$  se transforme par rotation de la même manière que les états sur lesquels il agit ; par conséquent  $\bar{x}'_{op}$  doit être équivalent à  $R^{-1}\bar{x}_{op}$  et dès lors

$$(x'_{op})_i = \sum_j (a^{-1})_{ij} (x_{op})_j = \sum_j a_{ji} (x_{op})_j . \quad (2.23)$$

Nous sommes donc arrivés au résultat assez paradoxal suivant lequel l'opérateur de position  $\bar{x}_{op}$  se transforme au moyen de la matrice  $a^{-1}$  alors que la coordonnée d'un point  $x$  se transforme au moyen de la matrice  $a$ . En exprimant ceci autrement, cela signifie que les composantes de  $\bar{x}_{op}$  se transforment comme des vecteurs dirigés suivant les trois axes de coordonnées (cf. (1.9) ).

Par définition, on dira que trois opérateurs  $V_i$   $i = 1, 2, 3$  constituent les composantes d'un opérateur vectoriel  $\bar{V}$  si les opérateurs transformés  $V'_i$  satisfont à une loi analogue à (2.23), c'est-à-dire si

$$V'_i = \mathbb{P}_R V_i \mathbb{P}_R^+ = \sum_j a^{-1}_{ij} V_j = \sum_j a_{ji} V_j . \quad (2.24)$$

A titre d'illustration, considérons la transformation de l'opérateur gradient  $\bar{\nabla}$ . Posons

$$\phi_i(x) = \nabla_i \psi(x) \quad (2.25)$$

et appliquons à cette relation l'opérateur  $P_R$ . On obtient

$$P_R \phi_i(x) = \left( P_R \nabla_i P_R^+ \right) \left( P_R \psi(x) \right) \quad (2.26)$$

ou

$$\phi_i(R^{-1}x) = \nabla'_i \psi(R^{-1}x). \quad (2.27)$$

Mais en vertu de (2.25)

$$\phi_i(R^{-1}x) = \nabla_{(R^{-1}x)_i} \psi(R^{-1}x), \quad (2.28)$$

d'où l'on conclut que

$$\nabla'_i = \nabla_{(R^{-1}x)_i} = \sum_j \frac{\partial x_j}{\partial (R^{-1}x)_i} \nabla_j = \sum_j a_{ji} \nabla_j \quad (2.29)$$

en accord avec la relation (2.24). Dans la dernière étape, on a utilisé la propriété

$$x_j = \sum_i a_{ji} (R^{-1}x)_i. \quad (2.30)$$

Il est important de noter que

$$\nabla'_i \neq \frac{\partial}{\partial x'_i} = \frac{\partial}{\partial (Rx)_i}. \quad (2.31)$$

### 3. Opérateur de rotation infinitésimale

Une rotation quelconque peut s'obtenir par l'application d'une succession de rotations infinitésimales, c'est-à-dire de rotations pour lesquelles l'angle  $\Phi$  est un infiniment petit. Pour cette raison, nous allons d'abord chercher la forme explicite de l'opérateur de rotation pour une rotation infinitésimale.

Considérons le cas d'une seule particule envisagé dans le § 2. Suivant la loi (2.4), la rotation  $R(\bar{e}_3, \Phi)$  d'angle  $\Phi$  autour de  $\bar{e}_3$  transforme la fonction d'onde  $\psi(x)$  en

$$P_R \psi(x) = \psi(a(e_3, -\Phi).x), \quad (3.1)$$



c'est-à-dire

$$\mathbb{P}_R \psi(x_1, x_2, x_3) = \psi(x_1 \cos \Phi - x_2 \sin \Phi, x_1 \sin \Phi + x_2 \cos \Phi, x_3). \quad (3.2)$$

En particulier, la rotation infinitésimale  $R(\bar{e}_3, d\Phi)$  donne, si l'on s'en tient aux termes du premier ordre en  $d\Phi$  dans le développement de Taylor du second membre autour du point  $(x_1, x_2, x_3)$  :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_R \psi(x_1, x_2, x_3) &\simeq \psi(x_1 - x_2 d\Phi, x_1 d\Phi + x_2, x_3) \\ &\simeq \psi(x_1, x_2, x_3) - d\Phi \left( x_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \right) \\ &\simeq (1 + i d\Phi l_3) \psi(x_1, x_2, x_3), \end{aligned} \quad (3.3)$$

où  $l_3$  est la composante suivant  $x_3$  du moment cinétique orbital de la particule. L'opérateur de rotation infinitésimale se met donc sous la forme

$$\mathbb{P}_{R(\bar{e}_3, d\Phi)} = 1 + i d\Phi l_3. \quad (3.4)$$

Le même argument appliqué à la rotation infinitésimale autour de  $\bar{n}$  donne

$$\mathbb{P}_{R(\bar{n}, d\Phi)} = 1 + i d\Phi \bar{n} \cdot \bar{l}. \quad (3.5)$$

On trouve le même résultat pour un système de  $n$  particules. Il suffit de faire sur la loi (2.15), la même manipulation que celle qui vient d'être faite sur la loi (2.4). On trouve

$$\mathbb{P}_{R(\bar{e}_3, d\Phi)} = 1 + i d\Phi L_3 \quad (3.6)$$

et plus généralement

$$\mathbb{P}_{R(\bar{n}, d\Phi)} = 1 + i d\Phi \bar{n} \cdot \bar{L}, \quad (3.7)$$

expressions dans lesquelles  $\bar{L}$  est le moment cinétique orbital total du système.

Lorsque le système physique possède d'autres moments cinétiques que des moments cinétiques orbitaux, c'est-à-dire des moments cinétiques de spin, l'analogie de la relation (3.7) est

$$\mathcal{P}_{R(\bar{n}, d\Phi)} = 1 + id\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}. \quad (3.8)$$

Cette relation sert de définition au moment cinétique total  $\bar{J}$  du système. Pour montrer qu'il n'y a pas d'inconsistance dans cette définition, il faut prouver que l'opérateur vectoriel  $\bar{J}$  satisfait à la définition d'un moment cinétique donnée antérieurement, c'est-à-dire que ses composantes sont hermitiques et satisfont aux relations de commutation (I 8.1).

L'hermiticité de  $J_1$ ,  $J_2$  et  $J_3$  résulte directement de l'unitarité de l'opérateur de rotation, exprimée dans la relation (2.10). On a en effet

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{R(\bar{n}, d\Phi)} \mathcal{P}_{R(\bar{n}, d\Phi)}^+ &= (1 + id\Phi \bar{n} \cdot \bar{J})(1 - id\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}^+) \\ &= 1 + id\Phi \bar{n} \cdot (\bar{J} - \bar{J}^+) \\ &= 1, \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\text{d'où} \quad \bar{J} = \bar{J}^+. \quad (3.10)$$

La démonstration des relations de commutation est reportée à la fin du paragraphe où elles apparaîtront comme cas particulier de relations plus générales.

Pour une observable invariante par rotation, la relation (2.21) se réécrit pour une rotation infinitésimale

$$\left[ 1 + id\Phi \bar{n} \cdot \bar{J} \right] S - S \left[ 1 + id\Phi \bar{n} \cdot \bar{J} \right] = 0, \quad (3.11)$$

d'où l'on déduit que

$$\left[ J_i, S \right] = 0 \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.12)$$

Par conséquent toute observable invariante par rotation commute avec les composantes du moment cinétique total du système. Il en est ainsi entre autres pour le hamiltonien d'un système de particules indépendantes dans un potentiel à symétrie sphérique.

La loi de transformation (2.24) d'un opérateur vectoriel  $\bar{V}$  se réécrit pour une rotation infinitésimale sous la forme

$$V'_i = [1 + i d\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}] V_i [1 - i d\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}] = \sum_j (a(\bar{n}, -d\Phi))_{ij} V_j \quad (3.13)$$

ou en tenant compte de la relation (1.25)

$$V'_i = V_i + i d\Phi [\bar{n} \cdot \bar{J}, V_i] = V_i + d\Phi (\bar{n} \wedge \bar{V})_i . \quad (3.14)$$

Par conséquent

$$[\bar{n} \cdot \bar{J}, V_i] = -i (\bar{n} \wedge \bar{V})_i = -i (\bar{n} \wedge \bar{V}) \cdot \bar{e}_i = i (\bar{n} \wedge \bar{e}_i) \cdot \bar{V}. \quad (3.15)$$

En particulierisant aux rotations autour des axes du trièdre, on obtient

$$[J_i, V_j] = i (\bar{e}_i \wedge \bar{e}_j) \cdot \bar{V} = i V_k , \quad (3.16)$$

où  $(i j k)$  désigne une permutation circulaire quelconque de (123).

L'opérateur  $\bar{J}$  étant lui-même un opérateur vectoriel, les relations de commutation (3.16) deviennent en y remplaçant  $\bar{V}$  par  $\bar{J}$

$$[J_i, J_j] = i J_k . \quad (3.17)$$

Ceci démontre que l'opérateur  $\bar{J}$  de la relation (3.8) satisfait aux relations de commutation usuelles d'un moment cinétique.

#### 4. Opérateur de rotation finie

Toute rotation finie peut être considérée comme une succession de rotations infinitésimales. En vertu de la propriété (2.14), l'opérateur de rotation correspondant à une rotation finie est égal au produit des opérateurs de rotation infinitésimale correspondants.

Considérons la rotation  $R(\bar{n}, \Phi)$ . C'est une succession de rotations infinitésimales autour de l'axe  $\bar{n}$ . On a :

$$R(\bar{n}, \Phi + d\Phi) = R(\bar{n}, d\Phi) R(\bar{n}, \Phi) , \quad (4.1)$$

d'où par application de (2.14) et (3.8)

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{R(\bar{n}, \Phi + d\Phi)} &= \mathbb{P}_{R(\bar{n}, d\Phi)} \mathbb{P}_{R(\bar{n}, \Phi)} \\ &= (1 + i d\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}) \mathbb{P}_{R(\bar{n}, \Phi)}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

ce qui donne l'équation différentielle

$$\frac{d}{d\Phi} \mathbb{P}_{R(\bar{n}, \Phi)} = i \bar{n} \cdot \bar{J} \mathbb{P}_{R(\bar{n}, \Phi)}. \quad (4.3)$$

La condition initiale est

$$\mathbb{P}_{R(\bar{n}, 0)} = 1, \quad (4.4)$$

ce qui traduit le fait que toute rotation d'angle nul laisse inchangées les fonctions d'onde. L'équation (4.3), complétée par la condition (4.4), s'intègre aisément et donne

$$\mathbb{P}_{R(\bar{n}, \Phi)} = e^{i\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}}. \quad (4.5)$$

Notons que l'opérateur  $e^A$  est défini par

$$e^A \equiv \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} A^m \quad (4.6)$$

$$\text{et } A^m \equiv A \cdot A \dots A \quad (\text{m fois}). \quad (4.7)$$

Lorsque la rotation est paramétrisée par les angles d'Euler  $(\alpha, \beta, \gamma)$ , l'opérateur de rotation correspondant est donné par

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} &= \mathbb{P}_{R(\alpha, 0, 0)} \mathbb{P}_{R(0, \beta, 0)} \mathbb{P}_{R(0, 0, \gamma)} \\ &= \mathbb{P}_{R(\bar{e}_3, \alpha)} \mathbb{P}_{R(\bar{e}_2, \beta)} \mathbb{P}_{R(\bar{e}_3, \gamma)} \\ &= e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

## 5. Matrices de rotation

Examinons l'effet de l'opérateur de rotation (4.5) sur les vec-

teurs propres  $|JM\rangle$  du moment cinétique total. Après rotation, les nouveaux vecteurs sont en vertu de (2.1)

$$|JM\rangle' = \mathbb{P}_{R(\bar{n}, \Phi)} |JM\rangle = e^{i\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}} |JM\rangle. \quad (5.1)$$

L'action de l'opérateur  $\bar{J}^2$  sur ceux-ci est donnée par

$$\begin{aligned} \bar{J}^2 e^{i\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}} |JM\rangle &= \bar{J}^2 \left[ \sum_n \frac{(i\Phi \bar{n} \cdot \bar{J})^n}{n!} \right] |JM\rangle \\ &= \left( \sum_n \frac{(i\Phi \bar{n} \cdot \bar{J})^n}{n!} \right) \bar{J}^2 |JM\rangle = J(J+1) e^{i\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}} |JM\rangle, \end{aligned} \quad (5.2)$$

car  $\bar{J}^2$  commute avec n'importe quelle composante de  $\bar{J}$ . Par conséquent les vecteurs transformés sont vecteurs propres de  $\bar{J}^2$  correspondant à la valeur propre avant rotation  $J(J+1)$ . Par contre, excepté quand la rotation se fait autour de  $\bar{e}_3$ , ils ne diagonalisent pas  $J_0$  car cet opérateur ne commute pas en général avec  $\bar{n} \cdot \bar{J}$ . Les vecteurs (5.1) sont donc une superposition des vecteurs propres  $|JM'\rangle$  avec différentes valeurs du nombre quantique  $M'$  mais la même valeur du moment cinétique total  $J$  :

$$\mathbb{P}_{R(\bar{n}, \Phi)} |JM\rangle = \sum_{M'} |JM'\rangle \langle JM'| e^{i\Phi \bar{n} \cdot \bar{J}} |JM\rangle. \quad (5.3)$$

Lorsque la rotation est paramétrisée par les angles d'Euler  $(\alpha, \beta, \gamma)$ , la relation (5.3) se réécrit en vertu de (4.8)

$$\mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} |JM\rangle = \sum_{M'} \mathcal{D}_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma) |JM'\rangle, \quad (5.4)$$

où

$$\mathcal{D}_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma) \equiv \langle JM'| e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3} |JM\rangle \quad (5.5)$$

sont les éléments de la matrice de rotation  $\mathcal{D}^J(\alpha, \beta, \gamma)$  de dimen-

sion  $2J + 1$ , suivant la notation de Wigner. Les  $\mathcal{D}^J$  sont des matrices numériques et les  $\mathcal{D}_{M'M}^J$  sont des nombres, indépendants des coordonnées dont dépendent les fonctions d'onde. Comme les opérateurs  $P_R$  sont unitaires, les matrices  $\mathcal{D}^J$  sont des matrices unitaires et satisfont donc aux relations

$$\sum_{M'} \mathcal{D}_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{M''M'}^{J*}(\alpha, \beta, \gamma) = \delta_{MM''} \quad (5.6 a)$$

$$\sum_{M'} \mathcal{D}_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{M'M''}^{J*}(\alpha, \beta, \gamma) = \delta_{MM''} \quad (5.6 b)$$

Pour un  $J$  donné, les éléments de matrice  $\mathcal{D}_{M'M}^J$  sont des fonctions de  $\alpha, \beta, \gamma$  qui peuvent être évaluées explicitement. La dépendance en  $\alpha, \beta, \gamma$  se factorise car

$$e^{i\gamma J_3} |JM\rangle = e^{iM\gamma} |JM\rangle \quad (5.7)$$

et

$$\langle JM'| e^{i\alpha J_3} = \left( e^{-i\alpha J_3} |JM\rangle \right)^+ = \left( e^{-iM'\alpha} |JM'\rangle \right)^+ = e^{iM'\alpha} \langle JM'|, \quad (5.8)$$

d'où

$$\mathcal{D}_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma) = e^{iM'\alpha} d_{M'M}^J(\beta) e^{iM\gamma}, \quad (5.9)$$

en posant

$$d_{M'M}^J(\beta) \equiv \langle JM'| e^{i\beta J_2} |JM\rangle. \quad (5.10)$$

L'évaluation de  $\mathcal{D}_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma)$  se réduit donc à celle de  $d_{M'M}^J(\beta)$ . Par des méthodes de théorie des groupes, Wigner a montré que

$$d_{M'M}^J(\beta) = \left[ (J+M)! (J-M)! (J+M')! (J-M')! \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \sum_k \frac{(-1)^k}{(J-M'-k)! (J+M-k)! k! (k+M'-M)!} \left( \cos \frac{\beta}{2} \right)^{2J+M-M'-2k} \left( \sin \frac{\beta}{2} \right)^{2k+M'-M}, \quad (5.11)$$

où la sommation se fait sur toutes les valeurs de  $k$  pour lesquelles les arguments des factorielles sont non négatifs. Nous ne démontrons pas cette formule ici. Une preuve à posteriori de sa validité sera donnée dans la théorie du rotateur. Dans le paragraphe suivant, nous traitons à titre d'exemples, les cas où  $J = \frac{1}{2}$  et  $J = 1$ , dans lesquels la matrice  $d^J(\beta)$  peut être évaluée par une méthode directe.

### 6. Matrices de rotation pour $J = \frac{1}{2}$ et $J = 1$

Quand  $J = \frac{1}{2}$ , l'opérateur  $J_2$  est égal à  $s_2 = \frac{1}{2} \sigma_2$ , où  $\sigma_2$  a pour représentation matricielle la matrice de Pauli  $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  et jouit de la propriété  $\sigma_2^2 = \mathbb{1}$ . Nous devons donc évaluer

$$d_{M'M}^{\frac{1}{2}}(\beta) = \left\langle \frac{1}{2} M' \right| e^{\frac{1}{2} i \beta \sigma_2} \left| \frac{1}{2} M \right\rangle. \quad (6.1)$$

On a

$$\begin{aligned} e^{\frac{1}{2} i \beta \sigma_2} &= 1 + \frac{1}{2} i \beta \sigma_2 + \frac{1}{2} \left( \frac{i \beta}{2} \right)^2 \sigma_2^2 + \dots + \frac{1}{(2n)!} \left( \frac{i \beta}{2} \right)^{2n} \sigma_2^{2n} \\ &\quad + \frac{1}{(2n+1)!} \left( \frac{i \beta}{2} \right)^{2n+1} \sigma_2^{2n+1} + \dots \\ &= \left[ 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{\beta}{2} \right)^2 + \dots + \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left( \frac{\beta}{2} \right)^{2n} + \dots \right] \\ &\quad + i \sigma_2 \left[ \frac{\beta}{2} - \frac{1}{3!} \left( \frac{\beta}{2} \right)^3 + \dots + \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left( \frac{\beta}{2} \right)^{2n+1} + \dots \right] \\ &= \cos \frac{\beta}{2} + i \sigma_2 \sin \frac{\beta}{2}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

La représentation matricielle de cet opérateur est donc

$$d^{\frac{1}{2}}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & \sin \frac{\beta}{2} \\ -\sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

dans laquelle la première ligne (ou colonne) correspond à la projection  $+\frac{1}{2}$  et la deuxième ligne (ou colonne) à la projection  $-\frac{1}{2}$ .

Quand  $J = 1$ , il est commode de déterminer la matrice  $d^1(\beta)$  en étudiant les propriétés de transformation par rotation des harmoniques sphériques d'ordre 1,  $Y_{1m}(\theta, \varphi)$ , qui sont les fonctions propres du moment cinétique orbital pour  $l = 1$ . En vertu de la définition des  $Y_{lm}$ , on trouve que

$$Y_{1m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \times \begin{cases} -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} & m = 1 \\ \cos \theta & m = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} & m = -1 \end{cases} \quad (6.4)$$

ou encore

$$Y_{1m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x_m}{r}, \quad (6.5)$$

où

$$x_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + i x_2),$$

$$x_0 = x_3, \quad (6.5a)$$

$$x_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 - i x_2).$$

Ici  $x_1, x_2, x_3$  sont les composantes cartésiennes et  $x_{+1}, x_0, x_{-1}$  les composantes sphériques du vecteur  $\vec{r} = \vec{x}$  repéré par les coordonnées sphériques  $r, \theta, \varphi$ . Le facteur  $\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{r}$  est invariant dans une rotation quelconque, par conséquent les propriétés de transformation de  $Y_{1m}(\theta, \varphi)$  sont directement déterminées par celles de  $x_m$ . Comme les propriétés de transformation des coordonnées cartésiennes d'un point sont bien connues, il est aisé d'en déduire celles de  $Y_{1m}(\theta, \varphi)$ .

Considérons une rotation  $R(\alpha, \beta, \gamma)$  du système de coordonnées et soient  $(x'_1, x'_2, x'_3), (r, \theta', \varphi')$  les coordonnées cartésiennes et sphériques après la rotation d'un point de coordonnées  $(x_1, x_2, x_3)$



et  $(\alpha, \beta, \gamma)$  avant la rotation. La définition (5.4) des matrices de rotation donne

$$\mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{\ell m'}(\theta, \varphi), \quad (6.6)$$

pour un moment cinétique orbital  $\ell$  arbitraire. Comme les arguments  $\theta, \varphi$  sont arbitraires, on a aussi

$$\mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} Y_{\ell m}(\theta', \varphi') = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{\ell m'}(\theta', \varphi'). \quad (6.7)$$

Mais en vertu de (2.1) et (2.2),

$$\mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} Y_{\ell m}(\theta', \varphi') = Y'_{\ell m}(\theta', \varphi') = Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (6.8)$$

d'où

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{\ell m'}(\theta', \varphi'). \quad (6.9)$$

Utilisant la propriété d'unitarité (5.6a) de  $\mathcal{D}^{\ell}$ , on obtient la relation inverse de (6.9) :

$$Y_{\ell m'}(\theta', \varphi') = \sum_m \mathcal{D}_{m'm}^{\ell *}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (6.10)$$

Désignons par  $x_s$  le vecteur colonne dont les composantes sont  $x_m$   $m = +1, 0, -1$ , soit

$$x_s = \mu x, \quad (6.11)$$

où

$$\mu = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

est une matrice unitaire ( $u u^\dagger = \mathbb{1}$ ). Le transformé de  $x_s$  par rotation est

$$x'_s = u x' , \quad (6.13)$$

dans lequel

$$x' = a(\alpha, \beta, \gamma) x \quad (6.14)$$

et  $a(\alpha, \beta, \gamma)$  est la matrice (1.37). Par conséquent

$$x'_s = u x' = u a(\alpha, \beta, \gamma) x = u a(\alpha, \beta, \gamma) u^\dagger x_s \quad (6.15)$$

et le vecteur  $x_s$  se transforme donc par rotation au moyen de la matrice  $u a(\alpha, \beta, \gamma) u^\dagger$ . Mais d'autre part, la proportionnalité de  $x_m$  et  $Y_{1m}(\theta, \varphi)$  et la loi de transformation (6.10) indiquent que

$$(x'_s)_{m'} = \sum_m \mathcal{D}_{m'm}^{1*}(\alpha, \beta, \gamma) (x_s)_m , \quad (6.16)$$

c'est-à-dire 
$$x'_s = \mathcal{D}^{1*}(\alpha, \beta, \gamma) \cdot x_s . \quad (6.17)$$

La comparaison de (6.15) et (6.17) montre que

$$\mathcal{D}^{1*}(\alpha, \beta, \gamma) = u a(\alpha, \beta, \gamma) u^\dagger . \quad (6.18)$$

Effectuant les multiplications matricielles, on obtient

$$\mathcal{D}^{1*}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \frac{1+\cos\beta}{2} e^{-i\gamma} & e^{-i\alpha} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta & e^{-i\alpha} \frac{1-\cos\beta}{2} e^{i\gamma} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta e^{-i\gamma} & \cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta e^{i\gamma} \\ e^{i\alpha} \frac{1-\cos\beta}{2} e^{-i\gamma} & -e^{i\alpha} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta & e^{i\alpha} \frac{1+\cos\beta}{2} e^{i\gamma} \end{pmatrix} , \quad (6.19)$$

d'où en vertu de (5.9)

$$d^1(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1+\cos\beta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta & \frac{1-\cos\beta}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta & \cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta \\ \frac{1-\cos\beta}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta & \frac{1+\cos\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (6.20)$$

On vérifie aisément que les expressions (6.3) et (6.20) de  $d^{\frac{1}{2}}(\beta)$  et  $d^1(\beta)$  sont en accord avec la formule générale (5.11).

### 7. Propriétés de symétrie des matrices de rotation

Les matrices de rotation  $\mathcal{D}^J(\alpha, \beta, \gamma)$  étant des matrices unitaires satisfont à la relation

$$\mathcal{D}^{J-1}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathcal{D}^{J+}(\alpha, \beta, \gamma). \quad (7.1)$$

Mais  $\mathcal{D}^{J-1}(\alpha, \beta, \gamma)$  est la matrice de l'opérateur

$$\mathbb{P}^{-1} R(\alpha, \beta, \gamma) = \mathbb{P} R^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathbb{P} R(-\gamma, -\beta, -\alpha) \quad (7.2)$$

en vertu de (2.14) et (1.43). Par conséquent

$$\mathcal{D}^{J+}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathcal{D}^J(-\gamma, -\beta, -\alpha) \quad (7.3)$$

ou

$$\mathcal{D}_{MM'}^{J*}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathcal{D}_{M'M}^J(-\gamma, -\beta, -\alpha). \quad (7.4)$$

Cette relation entraîne pour la matrice réelle  $d^J(\beta)$  la propriété

$$d_{MM'}^J(\beta) = d_{M'M}^J(-\beta). \quad (7.5)$$

Lorsqu'on change  $\beta$  en  $-\beta$  dans l'expression (5.11) de

$d_{M'M}^J(\beta)$ , chaque terme de la somme sur  $\kappa$  est multiplié par  $(-1)^{2\kappa+M'-M} = (-1)^{M'-M}$ . Par conséquent

$$d_{M'M}^J(-\beta) = (-1)^{M'-M} d_{M'M}^J(\beta). \quad (7.6)$$

En combinant (7.5) et (7.6), on obtient

$$d_{MM'}^J(\beta) = (-1)^{M'-M} d_{M'M}^J(\beta). \quad (7.7)$$

L'inspection de (5.11) montre également que  $d_{M'M}^J(\beta)$  est invariant pour la permutation de  $M$  et  $M'$  accompagnée d'un changement de signe de ceux-ci, c'est-à-dire

$$d_{M'M}^J(\beta) = d_{-M, -M'}^J(\beta). \quad (7.8)$$

La combinaison de (7.7) et (7.8) conduit à

$$d_{M'M}^J(\beta) = (-1)^{M'-M} d_{-M', -M}^J(\beta). \quad (7.9)$$

La généralisation de cette relation à  $\mathcal{D}_{M'M}^J$  est obtenue de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{M'M}^{J*}(\alpha, \beta, \gamma) &= e^{-iM'\alpha} d_{M'M}^J(\beta) e^{-iM\gamma} \\ &= (-1)^{M'-M} e^{-iM'\alpha} d_{-M', -M}^J(\beta) e^{-iM\gamma}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Par conséquent

$$\mathcal{D}_{M'M}^{J*}(\alpha, \beta, \gamma) = (-1)^{M'-M} \mathcal{D}_{-M', -M}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (7.11)$$

La matrice  $d^J(\beta)$  possède une forme particulièrement simple pour  $\beta = \pi$ . Pour la déterminer, il est plus commode d'effectuer auparavant un changement d'indice de sommation dans (5.11). Posons  $2J-M'-2\kappa = M' + 2t$  ou  $\kappa = J-M'-t$ . On obtient

$$d_{M'M}^J(\beta) = \left[ (J+M)! (J-M)! (J+M')! (J-M')! \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \sum_t \frac{(-1)^{J-M-t}}{t! (M+M'+t)! (J-M'-t)! (J-M-t)!} \left( \cos \frac{\beta}{2} \right)^{M+M'+2t} \left( \sin \frac{\beta}{2} \right)^{2J-M-M'-2t}, \quad (7.12)$$

où  $t$  prend seulement les valeurs entières pour lesquelles les arguments des factorielles sont non négatifs. Pour  $\beta = \pi$ ,  $\cos \frac{\beta}{2} = 0$  et seul le terme pour lequel  $M+M'+2t = 0$  contribue dans (7.12). Mais comme par ailleurs  $M+M'+t \geq 0$  et  $t \geq 0$ , la seule possibilité d'obtenir un résultat non nul est que  $t = 0$  et  $M' = -M$ . Par conséquent

$$d_{M'M}^J(\pi) = (-1)^{J-M'} \delta_{M', -M} \quad d_{M'M}^J(-\pi) = (-1)^{J-M} \delta_{M', -M} \quad (7.13)$$

Cette relation permet d'écrire une autre propriété des matrices  $d^J(\beta)$ . On a en effet

$$d^J(\pi - \beta) = d^J(\pi) \cdot d^J(-\beta), \quad (7.14)$$

qui est la représentation matricielle de l'égalité

$$e^{i(\pi - \beta) J_2} = e^{i\pi J_2} \times e^{-i\beta J_2}. \quad (7.15)$$

On en déduit que

$$d_{M'M}^J(\pi - \beta) = \sum_{M''} d_{M'M''}^J(\pi) d_{M''M}^J(-\beta) \\ = \sum_{M''} (-1)^{J-M'} \delta_{M', -M''} d_{M''M}^J(-\beta) \\ = (-1)^{J-M'} d_{-M', M}^J(-\beta) = (-1)^{J-2M-M'} d_{-M', M}^J(\beta) \quad (7.16)$$

A titre d'exemple, on vérifie aisément sur la matrice (6.20) que

$$d_{10}^1(\beta) = d_{01}^1(-\beta) = -d_{01}^1(\beta) = d_{0-1}^1(\beta) = -d_{-10}^1(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta,$$

$$d_{10}^1(\pi) = 0$$

$$d_{10}^1(\pi-\beta) = d_{-1,0}^1(-\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\pi-\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta.$$
(7.17)

### 8. Propriétés de couplage des matrices de rotation

On peut obtenir une règle pour le couplage de deux matrices de rotation  $\mathcal{D}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma)$  et  $\mathcal{D}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma)$  à partir de celle qui régit le couplage des fonctions propres de deux moments cinétiques  $\underline{j}_1$  et  $\underline{j}_2$  pour former les fonctions propres du moment cinétique résultant  $\underline{J}$ . On a en vertu de (II 2.10)

$$|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = \sum_{JM} |JM\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM\rangle. \quad (8.1)$$

Si l'on effectue une rotation  $R(\alpha, \beta, \gamma)$  du système de coordonnées, chaque fonction propre d'un moment cinétique se transforme au moyen de la matrice de rotation appropriée suivant l'équation (5.4), de telle sorte que la relation (8.1) se transforme en

$$\sum_{\mu_1 \mu_2} \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1} \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{j_2} |j_1 \mu_1\rangle |j_2 \mu_2\rangle = \sum_{\mu} \sum_{JM} \mathcal{D}_{\mu M}^J |J\mu\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM\rangle. \quad (8.2)$$

Toutes les matrices de rotation dépendent des mêmes arguments  $\alpha, \beta, \gamma$ , que nous n'avons pas écrits pour simplifier l'écriture. Nous pouvons exprimer  $|J\mu\rangle$  dans la base non couplée en utilisant la relation inverse de (8.1), de telle sorte que l'équation (8.2) devient

$$\sum_{\mu_1 \mu_2} \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1} \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{j_2} |j_1 \mu_1\rangle |j_2 \mu_2\rangle$$

$$= \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu} \sum_{JM} \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu_2 | J \mu \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \mathcal{D}_{\mu M}^J | j_1 \mu_1 \rangle | j_2 \mu_2 \rangle. \quad (8.3)$$

En égalant les coefficients de  $| j_1 \mu_1 \rangle | j_2 \mu_2 \rangle$  dans les deux membres, on obtient

$$\mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1} \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{j_2} = \sum_{JM \mu} \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu_2 | J \mu \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \mathcal{D}_{\mu M}^J. \quad (8.4)$$

Les règles de sélection (II 2.4) et (II 2.5) des coefficients de Clebsch-Gordan réduisent cette relation à

$$\mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1} \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{j_2} = \sum_J \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu_2 | J \mu_1 + \mu_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J m_1 + m_2 \rangle \mathcal{D}_{\mu_1 + \mu_2, m_1 + m_2}^J, \quad (8.5)$$

où la sommation se fait sur les valeurs de  $J$  qui satisfont les inégalités triangulaires  $\delta(j_1 j_2 J)$ . La relation (8.5) est la règle de couplage des matrices de rotation, connue aussi sous le nom de série de Clebsch-Gordan.

L'inverse de la série de Clebsch-Gordan, qui exprime une matrice de rotation en fonction de produits de matrices de rotation, peut s'obtenir soit en partant de la relation inverse de (8.1), soit en transformant (8.5) au moyen des relations d'orthogonalité des coefficients de Clebsch-Gordan. Nous allons utiliser cette deuxième voie. Multiplions (8.5) par  $\langle j_1 \mu_1 j_2 \mu - \mu_1 | \lambda \mu \rangle$  et sommons sur  $\mu_1$  en laissant fixe la somme  $\mu = \mu_1 + \mu_2$ . On obtient en vertu de (II 2.8) :

$$\begin{aligned} & \sum_{\mu_1} \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu - \mu_1 | \lambda \mu \rangle \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1} \mathcal{D}_{\mu - \mu_1, m_2}^{j_2} \\ &= \sum_J \left[ \sum_{\mu_1} \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu - \mu_1 | \lambda \mu \rangle \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu - \mu_1 | J \mu \rangle \right] \\ & \quad \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J m_1 + m_2 \rangle \mathcal{D}_{\mu, m_1 + m_2}^J \end{aligned}$$

$$= \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | \lambda m_1 + m_2 \rangle \mathcal{D}_{\mu, m_1 + m_2}^{\lambda} \quad (8.6)$$

Remplaçons dans (8.6)  $\lambda$  par  $J$ , multiplions par  $\langle j_1 m_1 j_2 M - m_1 | J M \rangle$  et sommions sur  $m_1$  en laissant fixe la somme  $M = m_1 + m_2$ . On obtient

$$\begin{aligned} & \sum_{\mu_1 m_1} \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu - \mu_1 | J \mu \rangle \langle j_1 m_1 j_2 M - m_1 | J M \rangle \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1} \mathcal{D}_{\mu - \mu_1, M - m_1}^{j_2} \\ &= \left[ \sum_{m_1} \langle j_1 m_1 j_2 M - m_1 | J M \rangle^2 \right] \mathcal{D}_{\mu M}^J, \end{aligned} \quad (8.7)$$

d'où le résultat final

$$\mathcal{D}_{\mu M}^J = \sum_{\mu_1 m_1} \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu - \mu_1 | J \mu \rangle \langle j_1 m_1 j_2 M - m_1 | J M \rangle \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1} \mathcal{D}_{\mu - \mu_1, M - m_1}^{j_2} \quad (8.8)$$

Si, dans les relations (8.5) et (8.8), on remplace les matrices  $\mathcal{D}$  par leur expression (5.9) factorisée par rapport à  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , on trouve les règles de couplage des matrices  $d(\beta)$ ,

$$d_{\mu_1 m_1}^{j_1} d_{\mu_2 m_2}^{j_2} = \sum_J \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu_2 | J \mu_1 + \mu_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J m_1 + m_2 \rangle d_{\mu_1 + \mu_2, m_1 + m_2}^J \quad (8.9)$$

et

$$d_{\mu M}^J = \sum_{\mu_1 m_1} \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu - \mu_1 | J \mu \rangle \langle j_1 m_1 j_2 M - m_1 | J M \rangle d_{\mu_1 m_1}^{j_1} d_{\mu - \mu_1, M - m_1}^{j_2} \quad (8.10)$$

La relation (8.10) permet en principe la construction de la matrice  $d(\beta)$  pour un moment cinétique arbitraire  $J$  à partir des matrices correspondant à deux moments cinétiques quelconques  $j_1$  et  $j_2$  tels que  $\delta(j_1 j_2 J)$  soit satisfait. Partant de la connaissance de  $d^{j_2}$ , que nous avons déterminée en (6.3), toutes les autres matrices  $d^J$  peuvent être obtenues par applications successives de (8.10). A titre



d'exemple, calculons  $d_{10}^1$  par couplage de deux matrices  $d_{\frac{1}{2}}$ . En vertu de (8.10), on a :

$$d_{10}^1 = \sum_{\mu_1, m_1} \langle \frac{1}{2} \mu_1 \frac{1}{2} 1-\mu_1 | 11 \rangle \langle \frac{1}{2} m_1 \frac{1}{2} -m_1 | 10 \rangle d_{\mu_1, m_1}^{\frac{1}{2}} d_{1-\mu_1, -m_1}^{\frac{1}{2}} \quad (8.11)$$

Les valeurs possibles de  $\mu_1$  et  $m_1$  sont  $\mu_1 = \frac{1}{2}$  et  $m_1 = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ . Par conséquent

$$d_{10}^1 = \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} | 11 \rangle \left[ \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2} | 10 \rangle d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} d_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} + \langle \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} | 10 \rangle d_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \right] \quad (8.12)$$

Les valeurs des coefficients de Clebsch-Gordan sont (cf. table dans chap. II § 7.1) :

$$\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} | 11 \rangle = 1,$$

$$\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2} | 10 \rangle = \langle \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} | 10 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (8.13)$$

celles des éléments de matrice de  $d_{\frac{1}{2}}$  (cf. (6.3)) :

$$d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = \cos \frac{\beta}{2}, \quad (8.14)$$

$$d_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = \sin \frac{\beta}{2}.$$

$$\text{Donc } d_{10}^1 = 2 \times \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta, \quad (8.15)$$

en accord avec (6.20).

## 9. Matrices de rotation et harmoniques sphériques

Pour les valeurs entières du moment cinétique, il existe un lien entre les matrices de rotation et les harmoniques sphériques, fonctions propres du moment cinétique orbital, que nous avons étudiées dans le chapitre I.

Nous allons d'abord établir une relation très utile, connue sous le nom de théorème d'addition des harmoniques sphériques. Considérons l'expression

$$K = \sum_m Y_{lm}^* (\theta_1, \varphi_1) Y_{lm} (\theta_2, \varphi_2), \quad (9.1)$$

où  $(\theta_1, \varphi_1)$  et  $(\theta_2, \varphi_2)$  sont les coordonnées sphériques de deux points  $P_1$  et  $P_2$  sur la sphère unité. Montrons que cette expression peut être évaluée dans n'importe quel système de coordonnées, c'est-à-dire est invariante dans les rotations du système de coordonnées.

Dans un nouveau système de coordonnées obtenu par la rotation  $R(\alpha, \beta, \gamma)$ , les points  $P_1$  et  $P_2$  ont les coordonnées sphériques  $(\theta'_1, \varphi'_1)$  et  $(\theta'_2, \varphi'_2)$  respectivement. On a montré en (6.9) que

$$Y_{lm} (\theta_1, \varphi_1) = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^l (\alpha, \beta, \gamma) Y_{lm'} (\theta'_1, \varphi'_1) \quad (9.2)$$

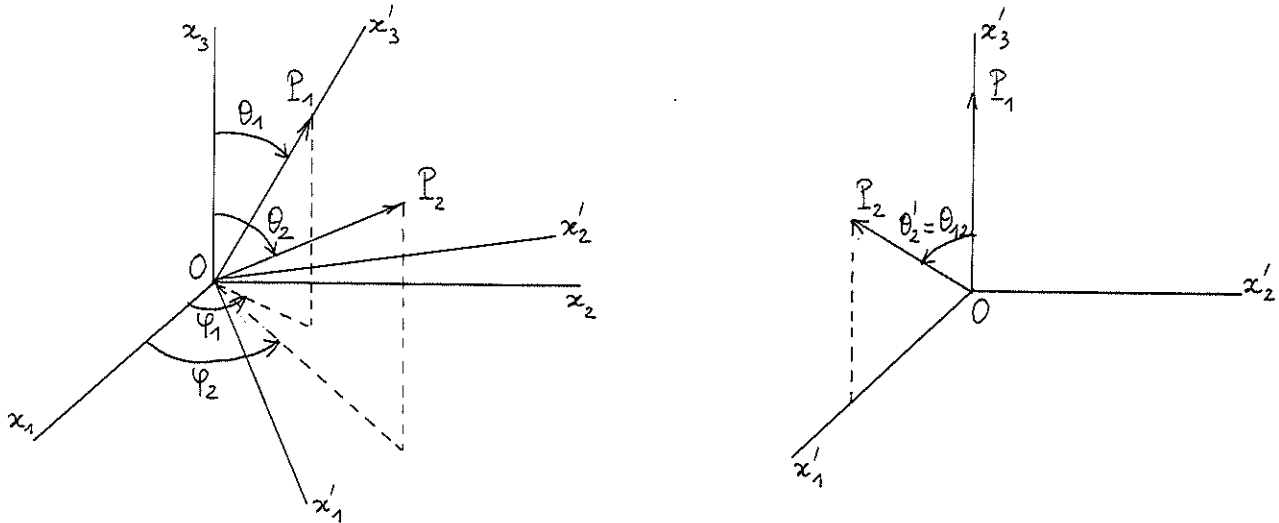
et une relation analogue pour  $Y_{lm} (\theta_2, \varphi_2)$ . Par conséquent

$$\begin{aligned} K &= \sum_m \left[ \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^l (\alpha, \beta, \gamma) Y_{lm'} (\theta'_1, \varphi'_1) \right]^* \left[ \sum_{m''} \mathcal{D}_{m''m}^l (\alpha, \beta, \gamma) Y_{lm''} (\theta'_2, \varphi'_2) \right] \\ &= \sum_{m'm''} \left[ \sum_m \mathcal{D}_{m'm}^{l*} (\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{m''m}^l (\alpha, \beta, \gamma) \right] Y_{lm'}^* (\theta'_1, \varphi'_1) Y_{lm''} (\theta'_2, \varphi'_2) \\ &= \sum_{m'} Y_{lm'}^* (\theta'_1, \varphi'_1) Y_{lm'} (\theta'_2, \varphi'_2) \end{aligned} \quad (9.3)$$

en vertu de la propriété d'unitarité (5.6a) de la matrice  $\mathcal{D}^l$ , ce qui démontre l'invariance de  $K$ .

Pour l'évaluation de  $K$ , choisissons le nouveau système de

coordonnées de telle manière que  $P_1$  soit sur l'axe  $x'_3$  et  $P_2$  dans le plan  $x'_1x'_3$ .



Dans ces conditions,  $\theta'_1 = 0$ ,  $\varphi'_1$  est arbitraire,  $\varphi'_2 = 0$  et  $\theta'_2 = \theta_{12}$  est l'angle entre les vecteurs  $\overline{OP}_1$  et  $\overline{OP}_2$ . Par conséquent

$$K = \sum_m Y_{lm}^* (0, \varphi'_1) Y_{lm} (\theta_{12}, 0). \quad (9.4)$$

Dans cette expression, la première harmonique sphérique est donnée par

$$Y_{lm} (0, \varphi'_1) = (-1)^m \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(1) e^{im\varphi'_1}, \quad (9.5)$$

$$\text{où } P_l^m(1) = \delta_{m0}, \quad (9.6)$$

résultat que l'on peut montrer aisément en faisant  $t = 1$  dans la relation (I 3.41). On en déduit que

$$\sum_m Y_{lm}^* (\theta_1, \varphi_1) Y_{lm} (\theta_2, \varphi_2) = \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} Y_{l0} (\theta_{12}, 0). \quad (9.7)$$

Il est plus fréquent d'utiliser à la place de  $Y_{l0}$ , le polynôme de Legendre  $P_l(\cos \theta_{12})$  qui lui est lié par la relation (cf. (I 3.43) et (I 3.47))

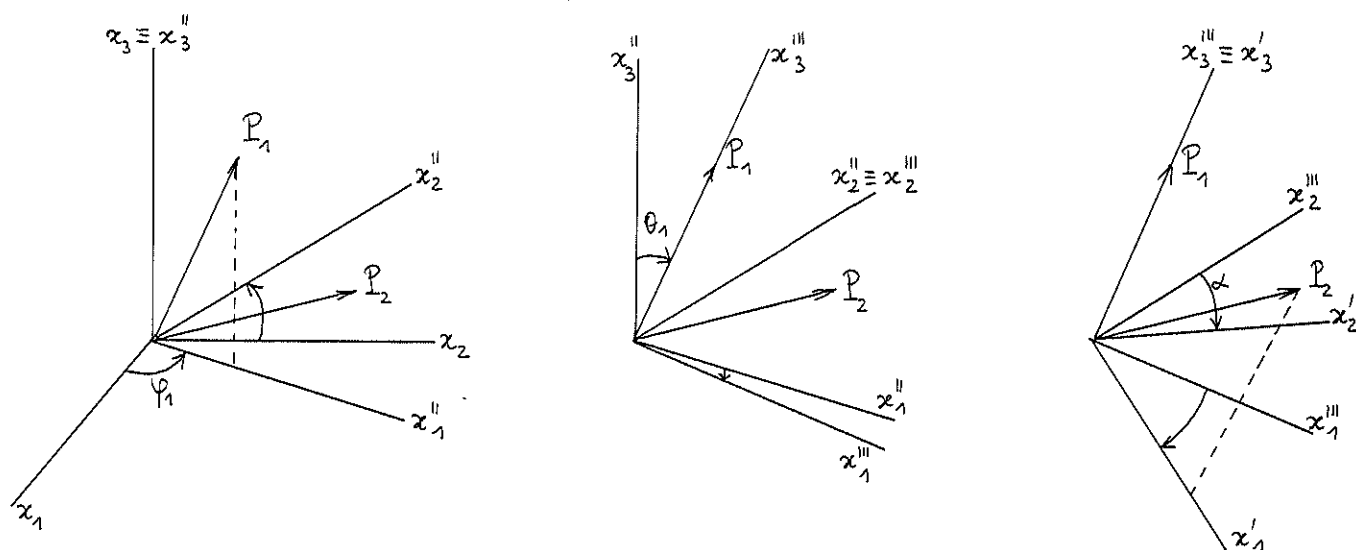
$$Y_{l_0}(\theta_{12}, 0) = \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} P_l(\cos \theta_{12}). \quad (9.8)$$

On aboutit ainsi au théorème d'addition des harmoniques sphériques

$$P_l(\cos \theta_{12}) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2), \quad (9.9)$$

dans lequel  $\theta_{12}$  représente l'angle que font entre elles les directions d'angles polaires  $(\theta_1, \varphi_1)$  et  $(\theta_2, \varphi_2)$ .

Nous allons maintenant utiliser l'expression (9.9) pour déduire le lien existant entre les matrices de rotation et les harmoniques sphériques. Déterminons d'abord les angles d'Euler de la rotation qui transforme le trièdre  $x_1 x_2 x_3$  en  $x'_1 x'_2 x'_3$ . L'examen des figures ci-dessous montre que ces angles sont  $\gamma = \varphi_1$ ,  $\beta = \theta_1$  et  $\alpha$  une fonction compliquée de  $(\theta_1, \varphi_1)$  et  $(\theta_2, \varphi_2)$ . Par les deux rotations d'angle  $\varphi_1$  et  $\theta_1$ , l'axe  $x_3$  est amené en coïncidence avec  $x'_3$ , tandis que la rotation d'angle  $\alpha$  amène le plan  $x''_1 x''_3$  en coïncidence avec le plan  $x'_1 x'_3$  ou  $P_1 \cap P_2$ .



La relation (6.10) prise au point  $P_2$  devient

$$Y_{lm}(\theta_{12}, 0) = \sum_m D_{m'm}^{l*}(\alpha, \theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2). \quad (9.10)$$

Pour  $m' = 0$ ,  $\mathcal{D}_{m'm}^{l*}(\alpha, \theta_1, \varphi_1)$  ne dépend pas de  $\alpha$  que l'on peut donc tout aussi bien annuler. Dans ce cas

$$Y_{l_0}(\theta_{12}, 0) = \sum_m \mathcal{D}_{0m}^{l*}(0, \theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2). \quad (9.11)$$

La comparaison des relations (9.7) et (9.11), qui doivent être vérifiées quels que soient  $\theta_1, \varphi_1, \theta_2$  et  $\varphi_2$ , indique que

$$\mathcal{D}_{0m}^l(0, \theta_1, \varphi_1) = \left[ \frac{4\pi}{2l+1} \right]^{\frac{1}{2}} Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1), \quad (9.12)$$

qui est la relation cherchée entre les éléments de matrice de  $\mathcal{D}^l$  et les harmoniques sphériques  $Y_{lm}$ .

Une relation équivalente peut être déduite de (9.12) en utilisant les propriétés de symétrie de la matrice  $\mathcal{D}^l$ . En vertu de (7.4), on a

$$\mathcal{D}_{m_0}^l(-\varphi_1, -\theta_1, 0) = \mathcal{D}_{0m}^{l*}(0, \theta_1, \varphi_1), \quad (9.13)$$

d'où

$$\mathcal{D}_{m_0}^l(-\varphi_1, -\theta_1, 0) = \left[ \frac{4\pi}{2l+1} \right]^{\frac{1}{2}} Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) = \left[ \frac{4\pi}{2l+1} \right]^{\frac{1}{2}} (-1)^m Y_{l-m}(\theta_1, \varphi_1), \quad (9.14)$$

en utilisant les relations (9.12) et (I 3.49). Mais d'autre part

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m_0}^l(-\varphi_1, -\theta_1, 0) &= e^{-im\varphi_1} d_{m_0}^l(-\theta_1) \\ &= (-1)^m e^{-im\varphi_1} d_{m_0}^l(\theta_1) \\ &= e^{-im\varphi_1} d_{-m,0}^l(\theta_1) \\ &= \mathcal{D}_{-m,0}^l(\varphi_1, \theta_1, 0) \end{aligned} \quad (9.15)$$

en vertu de (5.9), (7.6), (7.9) et (5.9) respectivement. En conclusion,

$$\mathcal{D}_{m_0}^{\ell}(\varphi_1, \theta_1, 0) = (-1)^m \left[ \frac{4\pi}{2\ell+1} \right]^{\frac{1}{2}} Y_{\ell m}(\theta_1, \varphi_1). \quad (9.16)$$

A titre d'exemple, notons que d'après (6.4) et (6.19)

$$Y_{11}(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi}, \quad (9.17)$$

$$\mathcal{D}_{01}^1(\alpha, \beta, \gamma) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta e^{i\gamma}, \quad (9.18)$$

$$\mathcal{D}_{10}^1(\alpha, \beta, \gamma) = e^{i\alpha} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta, \quad (9.19)$$

$$\text{d'où } \mathcal{D}_{01}^1(0, \theta, \varphi) = -\mathcal{D}_{10}^1(\varphi, \theta, 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{11}(\theta, \varphi). \quad (9.20)$$

## 10. Propriétés d'orthogonalité des matrices de rotation

Nous avons vu dans (5.6) que les matrices  $\mathcal{D}$  pour des angles d'Euler fixes sont unitaires. Nous allons maintenant calculer des intégrales sur les angles d'Euler de produits d'éléments de matrice de  $\mathcal{D}$ .

Considérons l'intégrale suivante de deux matrices de rotation

$$\mathcal{J} = \int d\Omega \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{\mathcal{J}_1}(\alpha, \beta, \gamma)^* \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{\mathcal{J}_2}(\alpha, \beta, \gamma). \quad (10.1)$$

Le symbole  $\int d\Omega$  représente une intégration sur le domaine complet des trois angles d'Euler, c'est-à-dire

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma. \quad (10.2)$$

La relation de symétrie (7.11) permet de récrire l'intégrale sous la forme

$$\mathcal{J} = (-1)^{\mu_1 - m_1} \int d\Omega \mathcal{D}_{-\mu_1, -m_1}^{\mathcal{J}_1}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{\mathcal{J}_2}(\alpha, \beta, \gamma). \quad (10.3)$$

L'utilisation de la série de Clebsch-Gordan (8.5) conduit à l'expression

$$\mathbb{Y} = \sum_J (-1)^{\mu_1 - m_1} \langle j_1 - \mu_1 \ j_2 \ \mu_2 \mid J \ -\mu_1 + \mu_2 \rangle \langle j_1 - m_1 \ j_2 \ m_2 \mid J \ -m_1 + m_2 \rangle$$

$$\int d\Omega \mathcal{D}_{-\mu_1 + \mu_2, -m_1 + m_2}^J(\alpha, \beta, \gamma), \quad (10.4)$$

dans laquelle on s'est ramené au calcul de l'intégrale d'une seule matrice de rotation.

Dans (10.4), l'intégration sur  $\alpha$  et  $\gamma$  est immédiate et conduit à

$$\int d\Omega \mathcal{D}_{-\mu_1 + \mu_2, -m_1 + m_2}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \int_0^{2\pi} d\alpha e^{i(-\mu_1 + \mu_2)\alpha} \int_0^{2\pi} d\gamma e^{i(-m_1 + m_2)\gamma}$$

$$\times \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{-\mu_1 + \mu_2, -m_1 + m_2}^J(\beta)$$

$$= (2\pi)^2 \delta_{\mu_1, \mu_2} \delta_{m_1, m_2} \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{0,0}^J(\beta), \quad (10.5)$$

où, en vertu de (9.12) et (9.8),

$$d_{0,0}^J(\beta) = \mathcal{D}_{0,0}^J(0, \beta, 0) = \left[ \frac{4\pi}{2\ell+1} \right]^{\frac{1}{2}} Y_{J_0}(\beta, 0) = P_J(\cos\beta). \quad (10.6)$$

Par conséquent

$$\int d\Omega \mathcal{D}_{-\mu_1 + \mu_2, -m_1 + m_2}^J(\alpha, \beta, \gamma) = (2\pi)^2 \delta_{\mu_1, \mu_2} \delta_{m_1, m_2} \int_{-1}^{+1} dt P_J(t)$$

$$= (2\pi)^2 \delta_{\mu_1, \mu_2} \delta_{m_1, m_2} \times 2 \delta_{J_0}, \quad (10.7)$$

où l'on a utilisé la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre (cf. (I 3.46))

$$\int_{-1}^{+1} dt P_\ell(t) P_{\ell'}(t) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \quad (10.8)$$

et le fait que  $P_0(t) = 1$ .

Introduisant la relation (10.7) dans (10.4), on obtient

$$Y = 2(2\pi)^2 \sum_{\mu_1 \mu_2} \sum_{m_1 m_2} (-1)^{\mu_1 - m_1} \langle j_1 - \mu_1 j_2 \mu_2 | 00 \rangle \langle j_1 - m_1 j_2 m_2 | 00 \rangle. \quad (10.9)$$

Les coefficients de Clebsch-Gordan qui apparaissent dans cette expression ont une valeur très simple, donnée par la relation (II 5.27) :

$$\langle j_1 - \mu_1 j_2 \mu_2 | 00 \rangle = \frac{(-1)^{j_1 + \mu_1}}{\sqrt{2j_1 + 1}} \delta_{j_1 j_2}. \quad (10.10)$$

En remplaçant dans l'expression (10.9), on a

$$Y = 8\pi^2 \frac{(-1)^{\mu_1 - m_1 + j_1 + \mu_1 + j_1 + m_1}}{2j_1 + 1} \sum_{\mu_1 \mu_2} \sum_{m_1 m_2} \delta_{j_1 j_2}. \quad (10.11)$$

Le facteur de phase vaut  $(-1)^{2j_1 + 2\mu_1} = +1$ . On a donc démontré que

$$\int d\Omega \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1*}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{8\pi^2}{2j_1 + 1} \delta_{\mu_1 \mu_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{j_1 j_2}, \quad (10.12)$$

de telle sorte que les matrices  $\mathcal{D}$  sont orthogonales sur la sphère unité. La normalisation  $8\pi^2/(2j_1+1)$  possède une signification simple: le facteur  $8\pi^2$  est le volume de la région d'intégration et le facteur  $2j_1+1$  est la dimension de la matrice  $\mathcal{D}^{j_1}$ . On peut montrer également que les matrices  $\mathcal{D}$  constituent un système complet de fonctions définies sur la sphère unité.

A titre d'exemple, considérons le cas  $j_1 = j_2 = 1$ ,  $\mu_1 = \mu_2 = 1$ ,  $m_1 = m_2 = 0$ . On a en vertu de (6.20)

$$\int d\Omega \mathcal{D}_{10}^{1*}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{10}^1(\alpha, \beta, \gamma)$$



$$\begin{aligned}
&= \int_0^{2\pi} d\alpha e^{-i\alpha} e^{i\alpha} \int_0^\pi d\beta \sin\beta \left[ d_{10}^1(\beta) \right]^2 \int_0^{2\pi} d\gamma \\
&= (2\pi)^2 \int_0^\pi d\beta \sin\beta \left( \frac{1}{2} \sin^2\beta \right) \\
&= (2\pi)^2 \int_{-1}^{+1} d(\cos\beta) \frac{1-\cos^2\beta}{2} = (2\pi)^2 \left[ \frac{1}{2} \cos\beta - \frac{1}{6} \cos^3\beta \right]_{-1}^{+1} \\
&= (2\pi)^2 \left[ 1 - \frac{1}{3} \right] = \frac{8\pi^2}{3} ,
\end{aligned} \tag{10.13}$$

en accord avec (10.12).

La relation (10.12) entraîne comme cas particulier la propriété d'orthonormalité des harmoniques sphériques. En effet pour

$\mu_1 = \mu_2 = 0$ , elle devient

$$\begin{aligned}
&\int d\Omega \mathcal{D}_{0m_1}^{l_1*}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{0m_2}^{l_2}(\alpha, \beta, \gamma) \\
&= \left[ \frac{(4\pi)^2}{(2l_1+1)(2l_2+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^\pi d\gamma Y_{l_1 m_1}^*(\beta, \gamma) Y_{l_2 m_2}(\beta, \gamma) \\
&= \frac{8\pi^2}{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}} \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma Y_{l_1 m_1}^*(\beta, \gamma) Y_{l_2 m_2}(\beta, \gamma) \\
&= \frac{8\pi^2}{2l_1+1} \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2}
\end{aligned} \tag{10.14}$$

d'où

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l_1 m_1}^*(\theta, \varphi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \varphi) = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2} , \tag{10.15}$$

en accord avec (I 3.48) .

Avec l'aide de la propriété d'orthogonalité (10.12) et de la

série de Clebsch-Gordan (8.5), on peut évaluer l'intégrale de trois matrices  $\mathcal{D}$  :

$$\begin{aligned}
 & \int d\Omega \mathcal{D}_{\mu_3 m_3}^{j_3*}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) \\
 &= \sum_J \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu_2 | J \mu_1 + \mu_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J m_1 + m_2 \rangle \\
 & \quad \times \int d\Omega \mathcal{D}_{\mu_3 m_3}^{j_3*}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{\mu_1 + \mu_2, m_1 + m_2}^J(\alpha, \beta, \gamma) \\
 &= \sum_J \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu_2 | J \mu_1 + \mu_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J m_1 + m_2 \rangle \\
 & \quad \times \frac{8\pi^2}{2j_3 + 1} \delta_{\mu_1 + \mu_2, \mu_3} \delta_{m_1 + m_2, m_3} \delta_{J, j_3} . \tag{10.16}
 \end{aligned}$$

Par conséquent

$$\begin{aligned}
 & \int d\Omega \mathcal{D}_{\mu_3 m_3}^{j_3*}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{\mu_1 m_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{\mu_2 m_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) \\
 &= \frac{8\pi^2}{2j_3 + 1} \delta_{\mu_1 + \mu_2, \mu_3} \delta_{m_1 + m_2, m_3} \langle j_1 \mu_1 j_2 \mu_2 | j_3 \mu_1 + \mu_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_1 + m_2 \rangle . \tag{10.17}
 \end{aligned}$$

Un cas spécial est celui de l'intégrale de trois harmoniques sphériques. Pour  $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = 0$ , l'intégrale dans la relation (10.17) devient

$$\begin{aligned}
 & \int d\Omega \mathcal{D}_{0 m_3}^{l_3*}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{0 m_1}^{l_1}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{D}_{0 m_2}^{l_2}(\alpha, \beta, \gamma) \\
 &= \left[ \frac{(4\pi)^3}{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \int d\Omega Y_{l_3 m_3}^*(\beta, \gamma) Y_{l_1 m_1}(\beta, \gamma) Y_{l_2 m_2}(\beta, \gamma) \\
 &= \left[ \frac{(4\pi)^3}{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} 2\pi \int_0^\pi d\beta \sin \beta \int_0^{2\pi} d\gamma Y_{l_3 m_3}^*(\beta, \gamma) Y_{l_1 m_1}(\beta, \gamma) Y_{l_2 m_2}(\beta, \gamma) , \tag{10.18}
 \end{aligned}$$

d'où

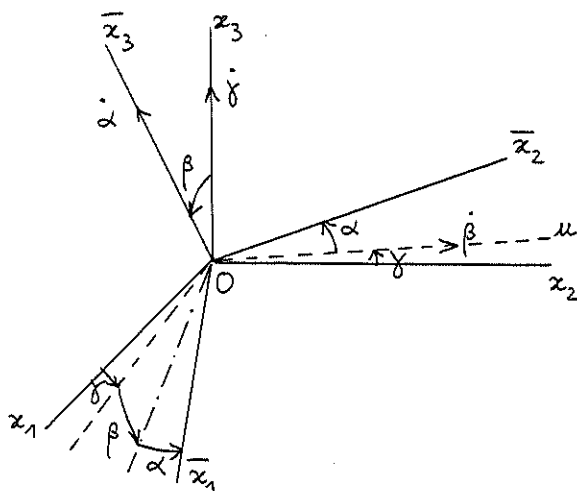
$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l_3 m_3}^*(\theta, \varphi) Y_{l_1 m_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \varphi)$$

$$= \left[ \frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_3+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \delta_{m_1+m_2, m_3} \langle l_1 0 l_2 0 | l_3 0 \rangle \langle l_1 m_1 l_2 m_2 | l_3 m_1+m_2 \rangle. \quad (10.19)$$

## 11. Application : rotation d'un corps rigide

### 11.1. Hamiltonien classique du rotateur

Considérons un corps rigide, fixé en son centre de masse  $O$ , en l'absence de force et de moment extérieurs. Soient  $Ox_1x_2x_3$  un système de coordonnées fixe par rapport au laboratoire (nous supposons qu'il constitue un système de référence d'inertie) et  $O\bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3$  un système de coordonnées fixe par rapport au corps (nous supposons qu'il s'agit du trièdre principal d'inertie). La position instantanée du trièdre  $O\bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3$  par rapport au trièdre  $Ox_1x_2x_3$  peut être décrite par les angles d'Euler  $\alpha, \beta, \gamma$  de la rotation qui amène les axes  $x_1, x_2, x_3$  en coïncidence avec  $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$ . Notons que physiquement la rotation d'angles  $\alpha, \beta, \gamma$  correspond ici à une rotation des points du système par rapport au trièdre  $Ox_1x_2x_3$  supposé fixe.



Le mouvement du corps rigide est décrit classiquement par son lagrangien, qui se réduit à l'énergie cinétique de rotation

$$L = T = \frac{1}{2} \left( \mathcal{J}_1 \omega_1^2 + \mathcal{J}_2 \omega_2^2 + \mathcal{J}_3 \omega_3^2 \right), \quad (11.1)$$

où  $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3$  sont les moments d'inertie du corps par rapport aux axes  $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$  et  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  sont les composantes de la vitesse angulaire sur ces axes.

La vitesse angulaire  $\bar{\omega}$  résulte de la composition des vitesses angulaires correspondant aux trois rotations successives d'angles  $\gamma, \beta$  et  $\alpha$  respectivement : la vitesse  $\dot{\gamma}$  dirigée suivant  $x_3$ , la vitesse  $\dot{\beta}$  dirigée suivant  $u$  (la ligne des noeuds) et la vitesse  $\dot{\alpha}$  dirigée suivant  $\bar{x}_3$ . Ses composantes sur les axes intrinsèques  $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$  se déduisent aisément par application de la transformation (1.37):

$$\begin{aligned} \omega_1 &= -\dot{\gamma} \cos \alpha \sin \beta + \dot{\beta} \sin \alpha, \\ \omega_2 &= \dot{\gamma} \sin \alpha \sin \beta + \dot{\beta} \cos \alpha, \\ \omega_3 &= \dot{\gamma} \cos \beta + \dot{\alpha}. \end{aligned} \quad (11.2)$$

Le moment cinétique de rotation du corps rigide a pour composantes sur les axes intrinsèques

$$L_i = \mathcal{J}_i \omega_i \quad i = 1, 2, 3, \quad (11.3)$$

de telle sorte que le lagrangien(11.1) se réécrit en fonction du moment cinétique sous la forme

$$L = \frac{L_1^2}{2\mathcal{J}_1} + \frac{L_2^2}{2\mathcal{J}_2} + \frac{L_3^2}{2\mathcal{J}_3}. \quad (11.4)$$

Les moments conjugués de Lagrange sont donnés par

$$\begin{aligned} p_\alpha &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\alpha}} = \mathcal{J}_1 \omega_1 \frac{\partial \omega_1}{\partial \dot{\alpha}} + \mathcal{J}_2 \omega_2 \frac{\partial \omega_2}{\partial \dot{\alpha}} + \mathcal{J}_3 \omega_3 \frac{\partial \omega_3}{\partial \dot{\alpha}} \\ &= \mathcal{J}_3 \omega_3, \end{aligned} \quad (11.5a)$$

$$\begin{aligned}
 p_\beta &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\beta}} = \mathcal{J}_1 \omega_1 \frac{\partial \omega_1}{\partial \dot{\beta}} + \mathcal{J}_2 \omega_2 \frac{\partial \omega_2}{\partial \dot{\beta}} + \mathcal{J}_3 \omega_3 \frac{\partial \omega_3}{\partial \dot{\beta}} \\
 &= \mathcal{J}_1 \omega_1 \sin \alpha + \mathcal{J}_2 \omega_2 \cos \alpha,
 \end{aligned}
 \tag{11.5b}$$

$$\begin{aligned}
 p_\gamma &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\gamma}} = \mathcal{J}_1 \omega_1 \frac{\partial \omega_1}{\partial \dot{\gamma}} + \mathcal{J}_2 \omega_2 \frac{\partial \omega_2}{\partial \dot{\gamma}} + \mathcal{J}_3 \omega_3 \frac{\partial \omega_3}{\partial \dot{\gamma}} \\
 &= -\mathcal{J}_1 \omega_1 \cos \alpha \sin \beta + \mathcal{J}_2 \omega_2 \sin \alpha \sin \beta + \mathcal{J}_3 \omega_3 \cos \beta.
 \end{aligned}
 \tag{11.5c}$$

L'inversion de ces relations conduit à l'expression des composantes de la vitesse angulaire en fonction des moments conjugués, qui, introduite dans la relation (11.4), donne le hamiltonien du rotateur

$$H = \frac{\mathcal{L}_1^2}{2\mathcal{J}_1} + \frac{\mathcal{L}_2^2}{2\mathcal{J}_2} + \frac{\mathcal{L}_3^2}{2\mathcal{J}_3}, \tag{11.6}$$

où

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_1 &= \cos \alpha \cotg \beta p_\alpha + \sin \alpha p_\beta - \cos \alpha \operatorname{cosec} \beta p_\gamma, \\
 \mathcal{L}_2 &= -\sin \alpha \cotg \beta p_\alpha + \cos \alpha p_\beta + \sin \alpha \operatorname{cosec} \beta p_\gamma, \\
 \mathcal{L}_3 &= p_\alpha.
 \end{aligned}
 \tag{11.7}$$

Les composantes du vecteur de moment cinétique  $\vec{\mathcal{L}}$  sur les axes fixes  $x_1, x_2, x_3$  se déduisent de celles sur les axes intrinsèques par l'inverse de la relation (1.36):

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_i &= \sum_j a_{ij}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) \mathcal{L}_j \\
 &= \sum_j a_{ij}(-\gamma, -\beta, -\alpha) \mathcal{L}_j.
 \end{aligned}
 \tag{11.8}$$

En effectuant la multiplication matricielle, on trouve

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_1 &= \operatorname{cosec} \beta \cos \gamma p_\alpha - \sin \gamma p_\beta - \cotg \beta \cos \gamma p_\gamma, \\
 \mathcal{L}_2 &= \operatorname{cosec} \beta \sin \gamma p_\alpha + \cos \gamma p_\beta - \cotg \beta \sin \gamma p_\gamma, \\
 \mathcal{L}_3 &= p_\alpha.
 \end{aligned}
 \tag{11.9}$$

## 11.2. Hamiltonien quantique du rotateur

Le hamiltonien quantique du rotateur s'obtient à partir du

hamiltonien classique en remplaçant les moments conjugués par les opérateurs (en faisant  $\hbar = 1$ )  $p_\alpha, p_\beta, p_\gamma$

$$\begin{aligned} p_\alpha &= -i \partial_\alpha, \\ p_\beta &= -i \partial_\beta, \\ p_\gamma &= -i \partial_\gamma. \end{aligned} \quad (11.10)$$

Il est donné par

$$H = \frac{p_1^2}{2J_1} + \frac{p_2^2}{2J_2} + \frac{p_3^2}{2J_3}, \quad (11.11)$$

où

$$\begin{aligned} L_1 &= -i \left[ \cos \alpha \cot \beta \partial_\alpha + \sin \alpha \partial_\beta - \cos \alpha \operatorname{cosec} \beta \partial_\gamma \right], \\ L_2 &= -i \left[ -\sin \alpha \cot \beta \partial_\alpha + \cos \alpha \partial_\beta + \sin \alpha \operatorname{cosec} \beta \partial_\gamma \right], \\ L_3 &= -i \partial_\alpha. \end{aligned} \quad (11.12)$$

Notons qu'en effectuant la substitution (11.10) dans (11.9), les composantes du moment cinétique dans le trièdre fixe deviennent les opérateurs quantiques

$$\begin{aligned} L_1 &= -i \left[ \operatorname{cosec} \beta \cos \gamma \partial_\alpha - \sin \gamma \partial_\beta - \cot \beta \cos \gamma \partial_\gamma \right], \\ L_2 &= -i \left[ \operatorname{cosec} \beta \sin \gamma \partial_\alpha + \cos \gamma \partial_\beta - \cot \beta \sin \gamma \partial_\gamma \right], \\ L_3 &= -i \partial_\gamma. \end{aligned} \quad (11.13)$$

Le carré du moment cinétique de rotation s'obtient aisément soit à partir de (11.12), soit à partir de (11.13), sous la forme

$$\begin{aligned} \bar{L}^2 &= L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \\ &= - \left\{ \frac{1}{\sin^2 \beta} \partial_\beta \sin \beta \partial_\beta + \frac{1}{\sin^2 \beta} \left[ \partial_{\alpha\alpha}^2 - 2 \cos \beta \partial_{\alpha\gamma}^2 + \partial_{\gamma\gamma}^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (11.14)$$

Dans le but d'obtenir les valeurs propres et fonctions propres de H, nous allons étudier au préalable les propriétés des opérateurs (11.12), composantes du moment cinétique du rotateur dans le

trièdre en rotation.

### 11.3. Relations de commutation des composantes du moment cinétique

Les composantes du moment cinétique de rotation sur les axes fixes satisfont aux relations de commutation usuelles d'un moment cinétique

$$[L_i, L_j] = i L_k, \quad (11.15)$$

où  $(i j k)$  représente une permutation circulaire de  $(1 2 3)$ . Le calcul explicite, utilisant les opérateurs différentiels (11.13), permet de s'en convaincre aisément.

A première vue, on s'attendrait à ce que les composantes du moment cinétique sur les axes intrinsèques satisfassent les mêmes relations de commutation. En fait, il n'en est rien. Une inspection des relations (11.12) et (11.13) montre qu'une permutation des variables  $\alpha$  et  $-\gamma$  changent les opérateurs  $L_1, L_2$  et  $L_3$  en  $L_{\bar{1}}, L_{\bar{2}}$  et  $-L_{\bar{3}}$  respectivement. Par conséquent cette permutation transforme la relation de commutation

$$[L_1, L_2] = i L_3 \quad (11.16)$$

en

$$[L_{\bar{1}}, L_{\bar{2}}] = -i L_{\bar{3}} \quad (11.17)$$

et d'une manière générale les relations de commutation (11.15) en

$$[L_{\bar{i}}, L_{\bar{j}}] = -i L_{\bar{k}}. \quad (11.18)$$

Les composantes du moment cinétique de rotation sur les axes du trièdre intrinsèque satisfont donc des relations de commutation qui diffèrent en signe par rapport aux relations de commutation usuelles des composantes d'un moment cinétique.

Le résultat assez paradoxal que nous venons d'obtenir a pour origine le fait que le trièdre intrinsèque, contrairement au trièdre

fixe, n'est pas un trièdre d'inertie. En mécanique classique, lorsqu'on travaille dans un trièdre qui n'est pas un trièdre d'inertie, divers effets curieux apparaissent (citons entre autres l'existence de forces centrifuges, de forces de Coriolis, etc.). Un de ces effets a trait aux parenthèses de Poisson des composantes du moment cinétique. Pour les composantes (11.9) dans le trièdre fixe,

$$\{L_i, L_j\} = \sum_{\nu=\alpha,\beta,\gamma} \left[ \frac{\partial L_i}{\partial \nu} \frac{\partial L_j}{\partial p_\nu} - \frac{\partial L_i}{\partial p_\nu} \frac{\partial L_j}{\partial \nu} \right] = L_k, \quad (11.19)$$

tandis que pour les composantes (11.7) dans le trièdre en rotation

$$\{L_{\bar{i}}, L_{\bar{j}}\} = -L_{\bar{k}}. \quad (11.20)$$

Les relations (11.15) et (11.18) ne sont autres que l'analogie quantique de (11.19) et (11.20) lorsque l'on remplace  $\{, \}$  par  $\frac{1}{i} [ , ]$ . En conclusion, il faut toujours avoir bien présent à l'esprit que les relations de commutation usuelles du moment cinétique ne sont valables que dans un trièdre d'inertie.

Lorsqu'on effectue une rotation du trièdre du laboratoire  $x_1 x_2 x_3$ , le vecteur  $\bar{L}$  ainsi que le trièdre intrinsèque  $\bar{x}_1 \bar{x}_2 \bar{x}_3$  sont laissés invariants ; par conséquent les composantes de  $\bar{L}$  sur les axes intrinsèques se comportent comme des scalaires dans les rotations des axes  $x_1 x_2 x_3$  et de ce fait commutent, en vertu de (3.12), avec les composantes de  $\bar{L}$  sur les axes fixes :

$$[L_i, L_{\bar{j}}] = 0 \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (11.21)$$

L'application des relations de commutation (11.15) et (11.18) montre que le carré du moment cinétique  $\bar{L}^2$ , défini par (11.14), commute avec les composantes de  $\bar{L}$  sur les axes fixes et sur les axes intrinsèques :

$$[\bar{L}^2, L_i] = [\bar{L}^2, L_{\bar{i}}] = 0 \quad i = 1, 2, 3. \quad (11.22)$$

Il en résulte que les opérateurs  $\bar{L}^2$ ,  $L_3$  et  $L_{\bar{3}}$  constituent un ensemble



d'observables commutables et peuvent donc être diagonalisés simultanément. Nous allons montrer que les fonctions propres simultanées de ces opérateurs ne sont autres que les éléments des matrices de rotation  $\mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma)$ .

#### 11.4. Action du moment cinétique de rotation sur les matrices de rotation

Les composantes du moment cinétique de rotation étant des opérateurs différentiels agissant sur les variables  $\alpha, \beta, \gamma$ , commençons par étudier l'effet des opérateurs  $\partial_\alpha, \partial_\beta$  et  $\partial_\gamma$  sur les matrices de rotation. L'action de  $\partial_\alpha$  et  $\partial_\gamma$  est triviale si l'on tient compte de la factorisation (5.9) des matrices de rotation :

$$\partial_\alpha \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \partial_\alpha e^{iK\alpha} d_{KM}^J(\beta) e^{iM\gamma} = iK \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma), \quad (11.23)$$

$$\partial_\gamma \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \partial_\gamma e^{iK\alpha} d_{KM}^J(\beta) e^{iM\gamma} = iM \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (11.24)$$

En vertu de (11.12) et (11.13), on en déduit immédiatement que

$$L_3 \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) = M \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) \quad (11.25)$$

et

$$L_{\frac{3}{2}} \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) = K \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (11.26)$$

Plus généralement l'action d'un opérateur différentiel  $\partial_\alpha, \partial_\beta$  ou  $\partial_\gamma$  sur une matrice de rotation se réduit à son effet sur l'opérateur de rotation  $P_R(\alpha, \beta, \gamma)$ , les bras et les kets entre lesquels ce dernier opérateur agit étant fonctions seulement des coordonnées dans le trièdre fixe. L'application de  $\partial_\alpha, \partial_\beta$  et  $\partial_\gamma$  sur  $P_R(\alpha, \beta, \gamma)$  donne

$$\partial_\gamma P_R(\alpha, \beta, \gamma) = \partial_\gamma e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3}$$

$$\begin{aligned}
&= e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3} (iJ_3) \\
&= i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} J_3, \quad (11.27a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_\beta \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} &= e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} (iJ_2) e^{i\gamma J_3} \\
&= i e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3} e^{-i\gamma J_3} J_2 e^{i\gamma J_3} \\
&= i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \left[ \mathbb{P}_{R(-\gamma, 0, 0)} J_2 \mathbb{P}_{R(-\gamma, 0, 0)}^+ \right] \\
&= i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \left[ \sum_j (a(0, 0, \gamma))_{2j} J_j \right] \\
&= i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \left[ -\sin \gamma J_1 + \cos \gamma J_2 \right], \quad (11.27b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_\alpha \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} &= e^{i\alpha J_3} (iJ_3) e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3} \\
&= i e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3} e^{-i\gamma J_3} e^{-i\beta J_2} J_3 e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3} \\
&= i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \left[ \mathbb{P}_{R(-\gamma, -\beta, 0)} J_3 \mathbb{P}_{R(-\gamma, -\beta, 0)}^+ \right] \\
&= i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \left[ \sum_j (a(0, \beta, \gamma))_{3j} J_j \right] \\
&= i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \left[ \sin \beta \cos \gamma J_1 + \sin \beta \sin \gamma J_2 + \cos \beta J_3 \right], \quad (11.27c)
\end{aligned}$$

en utilisant la loi de transformation (2.24) des opérateurs vectoriels et l'expression (1.37) de la matrice  $a(\alpha, \beta, \gamma)$ .

L'effet sur  $\mathbb{P}_R$  des composantes de  $\mathcal{L}^{\mathbb{P}}$  sur les axes fixes résulte des relations (11.13) et (11.27). Pour  $\mathcal{L}_1$  on trouve :

$$\mathcal{L}_1 \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} = \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \left\{ \operatorname{cosec} \beta \cos \gamma \left[ \sin \beta \cos \gamma J_1 + \sin \beta \sin \gamma J_2 \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \omega \beta J_3 \Big] - \sin \gamma \left[ -\sin \gamma J_1 + \cos \gamma J_2 \right] - \cot \gamma \beta \cos \gamma J_3 \Big\} \\
& = \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} J_1 \quad , \quad (11.28)
\end{aligned}$$

et un calcul similaire pour les autres composantes montre qu'on a d'une manière générale

$$\mathcal{L}_i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} = \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} J_i \quad i=1, 2, 3. \quad (11.29)$$

Par conséquent, l'action de  $\mathcal{L}_i$  sur les matrices de rotation est donnée par

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_i \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle JK | (\mathcal{L}_i \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)}) | JM \rangle \\
&= \langle JK | \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} J_i | JM \rangle \quad (11.30)
\end{aligned}$$

et, en vertu des relations (I 8.29), (I 8.32) et (I 8.33), on obtient

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_1 \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= \frac{1}{2} \left[ (J+M)(J-M+1) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{K, M-1}^J(\alpha, \beta, \gamma) \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[ (J-M)(J+M+1) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{K, M+1}^J(\alpha, \beta, \gamma), \quad (11.31a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_2 \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= \frac{i}{2} \left[ (J+M)(J-M+1) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{K, M-1}^J(\alpha, \beta, \gamma) \\
&\quad - \frac{i}{2} \left[ (J-M)(J+M+1) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{K, M+1}^J(\alpha, \beta, \gamma), \quad (11.31b)
\end{aligned}$$

$$\mathcal{L}_3 \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) = M \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (11.31c)$$

Un raisonnement analogue permet d'obtenir l'effet des opérateurs  $\mathcal{L}_i$  sur les matrices de rotation. On a d'abord

$$\mathcal{L}_\alpha \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} = i J_3 e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3}$$

$$\begin{aligned} &= i J_3 \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \quad , \quad (11.32a) \\ \partial_\beta \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} &= e^{i\alpha J_3} (i J_2) e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3} \end{aligned}$$

$$= i e^{i\alpha J_3} J_2 e^{-i\alpha J_3} e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3}$$

$$= i \left[ \mathbb{P}_{R(\alpha, 0, 0)} J_2 \mathbb{P}_{R(\alpha, 0, 0)}^+ \right] \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)}$$

$$= i \left[ \sum_j (a(0, 0, -\alpha))_{2j} J_j \right] \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)}$$

$$= i \left[ \sin \alpha J_1 + \cos \alpha J_2 \right] \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \quad , \quad (11.32b)$$

$$\partial_\gamma \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} = e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} (i J_3) e^{i\gamma J_3}$$

$$= i e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} J_3 e^{-i\beta J_2} e^{-i\alpha J_3} e^{i\alpha J_3} e^{i\beta J_2} e^{i\gamma J_3}$$

$$= i \left[ \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, 0)} J_3 \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, 0)}^+ \right] \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)}$$

$$= i \left[ \sum_j (a(0, -\beta, -\alpha))_{3j} J_j \right] \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)}$$

$$= i \left[ -\cos \alpha \sin \beta J_1 + \sin \alpha \sin \beta J_2 + \cos \beta J_3 \right] \mathbb{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \cdot$$

(11.32c)

En combinant ces relations avec les relations (11.12), on obtient

$$\begin{aligned}
L_{\frac{1}{2}} P_{R(\alpha, \beta, \gamma)} &= \left\{ \cos \alpha \cot \beta J_3 + \sin \alpha \left[ \sin \alpha J_1 + \cos \alpha J_2 \right] \right. \\
&\quad \left. - \cos \alpha \cos \beta \left[ -\cos \alpha \sin \beta J_1 + \sin \alpha \sin \beta J_2 + \cos \beta J_3 \right] \right\} P_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \\
&= J_1 P_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \quad , \tag{11.33}
\end{aligned}$$

et un calcul similaire pour les autres composantes montre qu'on a d'une manière générale

$$L_{\frac{i}{2}} P_{R(\alpha, \beta, \gamma)} = J_i P_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \quad i=1, 2, 3. \tag{11.34}$$

Par conséquent, l'action de  $L_{\frac{i}{2}}$  sur les matrices de rotation est donnée par

$$\begin{aligned}
L_{\frac{i}{2}} \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle JK | (L_{\frac{i}{2}} P_{R(\alpha, \beta, \gamma)}) | JM \rangle \\
&= \langle JK | J_i P_{R(\alpha, \beta, \gamma)} | JM \rangle. \tag{11.35}
\end{aligned}$$

En vertu des relations (I 8.29), (I 8.32) et (I 8.33) et de la propriété

$$\langle JK | J_i = \langle JK | J_i^+ = (J_i | JK \rangle^+ \quad , \tag{11.36}$$

on obtient :

$$\begin{aligned}
L_{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= \frac{1}{2} \left[ (J+K)(J-K+1) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{K-1, M}^J(\alpha, \beta, \gamma) \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[ (J-K)(J+K+1) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{K+1, M}^J(\alpha, \beta, \gamma), \tag{11.37a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{\frac{2}{2}} \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= -\frac{i}{2} \left[ (J+K)(J-K+1) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{K-1, M}^J(\alpha, \beta, \gamma) \\
&\quad + \frac{i}{2} \left[ (J-K)(J+K+1) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{D}_{K+1, M}^J(\alpha, \beta, \gamma), \tag{11.37b}
\end{aligned}$$

$$\mathcal{L}_3^J \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) = K \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (11.37c)$$

La comparaison des relations (11.31) et (11.37) montre que les matrices représentant  $\mathcal{L}_1$  et  $\mathcal{L}_1^-$ ,  $\mathcal{L}_3$  et  $\mathcal{L}_3^-$  sont les mêmes (quand on remplace M par K), tandis que celles représentant  $\mathcal{L}_2$  et  $\mathcal{L}_2^-$  ont un signe différent. Ce résultat est consistant avec la différence de signe dans les relations de commutation des opérateurs  $\mathcal{L}_i^-$  par rapport à celles des opérateurs  $\mathcal{L}_i$ .

Finalement, l'action de  $\bar{\mathcal{L}}^2$  sur les matrices de rotation s'obtient par application répétée de la relation (11.29) ou (11.34) :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}}^2 \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle JK | (\bar{\mathcal{L}}^2 \mathcal{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)}) | JM \rangle \\ &= \langle JK | \mathcal{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} \bar{\mathcal{J}}^2 | JM \rangle \\ &= \langle JK | \bar{\mathcal{J}}^2 \mathcal{P}_{R(\alpha, \beta, \gamma)} | JM \rangle, \end{aligned} \quad (11.38)$$

d'où l'on déduit que

$$\bar{\mathcal{L}}^2 \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) = J(J+1) \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (11.39)$$

Les relations (11.39), (11.25) et (11.26) expriment que les fonctions  $\mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma)$  sont les fonctions propres simultanées de  $\bar{\mathcal{L}}^2$ ,  $\mathcal{L}_3$  et  $\mathcal{L}_3^-$  correspondant aux valeurs propres  $J(J+1)$ , M et K respectivement.

#### 11.5. Equation différentielle à laquelle satisfont les fonctions

$$\underline{\mathcal{D}_{KM}^J(\beta)}$$

La relation (11.39), dans laquelle  $\bar{\mathcal{L}}^2$  est l'opérateur différentiel (11.14), est une équation aux dérivées partielles pour les fonctions  $\mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma)$  :

$$\left\{ \frac{1}{\sin \beta} \partial_{\beta} \sin \beta \partial_{\beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \left[ \partial_{\alpha\alpha}^2 - 2 \cos \beta \partial_{\alpha\gamma}^2 + \partial_{\gamma\gamma}^2 \right] + J(J+1) \right\} \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma) = 0. \quad (11.40)$$

On en déduit une équation différentielle pour les fonctions  $d_{KM}^J(\beta)$  :

$$\left\{ d_{\beta\beta}^2 + \cot \beta d_{\beta} - \left[ K^2 - 2KM \cos \beta + M^2 \right] \operatorname{cosec}^2 \beta + J(J+1) \right\} d_{KM}^J(\beta) = 0. \quad (11.41)$$

La résolution de cette équation fournit une preuve a posteriori de la validité de la formule (5.11) pour les fonctions  $d_{KM}^J(\beta)$ , que Wigner a démontrée par un autre procédé.

Cherchons donc les fonctions  $F(\beta)$  qui satisfont l'équation (11.41). Le changement de variable

$$t = - \operatorname{tg}^2 \frac{\beta}{2} \quad (11.42)$$

transforme l'équation en

$$\left\{ t d_{tt}^2 + d_t + \frac{(K+M)^2 t - (K-M)^2}{4t(1-t)} - \frac{J(J+1)}{(1-t)^2} \right\} F(t) = 0. \quad (11.43)$$

Cherchons une solution du type

$$F(t) = t^{\lambda} (1-t)^{\mu} f(t), \quad (11.44)$$

où  $\lambda$  et  $\mu$  sont des constantes encore indéterminées. L'équation pour  $f(t)$  est la suivante :

$$\left\{ t(1-t) d_{tt}^2 + \left[ 2\lambda + 1 - (2\lambda + 2\mu + 1)t \right] d_t + \frac{A + Bt + Ct^2}{t(1-t)} \right\} f(t) = 0, \quad (11.45)$$

où  $A$ ,  $B$  et  $C$  sont les constantes

$$A = \lambda^2 - \frac{1}{4} (K-M)^2, \quad (11.46)$$

$$B = -2\lambda^2 - (2\lambda + 1)\mu + \frac{1}{4} (K-M)^2 + \frac{1}{4} (K+M)^2 - J(J+1), \quad (11.47)$$

$$C = (\lambda + \mu)^2 - \frac{1}{4} (K + M)^2. \quad (11.48)$$

L'équation (11.45) se réduit à celle de la fonction hypergéométrique  ${}_2F_1(a, b, c, t)$ ,

$$\left\{ t(1-t) d_{tt}^2 + [c - (a+b+1)t] d_t - ab \right\} {}_2F_1(a, b, c, t) = 0, \quad (11.49)$$

à condition de choisir  $\lambda$  et  $\mu$  de telle manière que

$$A = 0 \quad (11.50)$$

et 
$$B + C = 0. \quad (11.51)$$

La condition (11.50) est satisfaite si

$$\lambda = \frac{1}{2} (K - M); \quad (11.52)$$

la condition (11.51) s'écrit

$$-\lambda^2 + \mu(\mu-1) + \frac{1}{4} (M-K)^2 - J(J+1) = \mu(\mu-1) - J(J+1) = 0 \quad (11.53)$$

et est satisfaite si

$$\mu = -J. \quad (11.54)$$

La solution de l'équation (11.43) est donc

$$F(t) = N t^{\frac{1}{2}(K-M)} (1-t)^{-J} {}_2F_1(K-J, -M-J, K-M+1, t) \quad (11.55)$$

et celle de l'équation (11.41) est

$$F(\beta) = N \left( \sin \frac{\beta}{2} \right)^{K-M} \left( \cos \frac{\beta}{2} \right)^{2J+M-K} {}_2F_1\left(K-J, -M-J, K-M+1, -\cos^2 \frac{\beta}{2}\right), \quad (11.56)$$

où  $N$  est une constante de normalisation. Le développement en puissances de la fonction hypergéométrique

$${}_2F_1(a, b, c, t) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{t^n}{n!}, \quad (11.57)$$



où  $\Gamma(m) = (m-1)!$  pour  $m$  entier  $> 0$ , conduit à l'expression

$$F(\beta) = N (J-K)! (J+M)! \sum_n \frac{(-1)^n}{(J-K-n)! (J+M-n)! n! (K-M+n)!} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2J+M-K-2n} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2n+K-M}, \quad (11.58)$$

qui comparée à la relation (5.11) montre que

$$F(\beta) \propto d_{KM}^J(\beta). \quad (11.59)$$

Notons que la sommation dans (11.58) est finie, la fonction hypergéométrique se réduisant à un polynôme de degré égal à  $J + p = \min(J - K, J + M)$  et proportionnel à un polynôme de Jacobi :

$$\begin{aligned} & {}_2F_1\left(K-J, -M-J, K-M+1, -\tan^2 \frac{\beta}{2}\right) \\ &= \frac{(J+p)! (K-M)!}{(J+K-M+p)!} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{-2J-2p} P_{J+p}^{(K-M, M-K-2p)}(\cos \beta). \end{aligned} \quad (11.60)$$

### 11.6. Niveaux d'énergie et fonctions propres du rotateur

Nous allons considérer successivement les cas où les trois moments principaux d'inertie sont égaux (rotateur sphérique), deux seulement des moments d'inertie sont égaux (rotateur symétrique) et les moments d'inertie sont différents (rotateur asymétrique).

Lorsque les trois moments d'inertie sont égaux,  $\mathcal{J}_1 = \mathcal{J}_2 = \mathcal{J}_3 = \mathcal{J}$ , le hamiltonien (11.11) du rotateur est égal à

$$H = \frac{\bar{L}^2}{2\mathcal{J}} \quad (11.61)$$

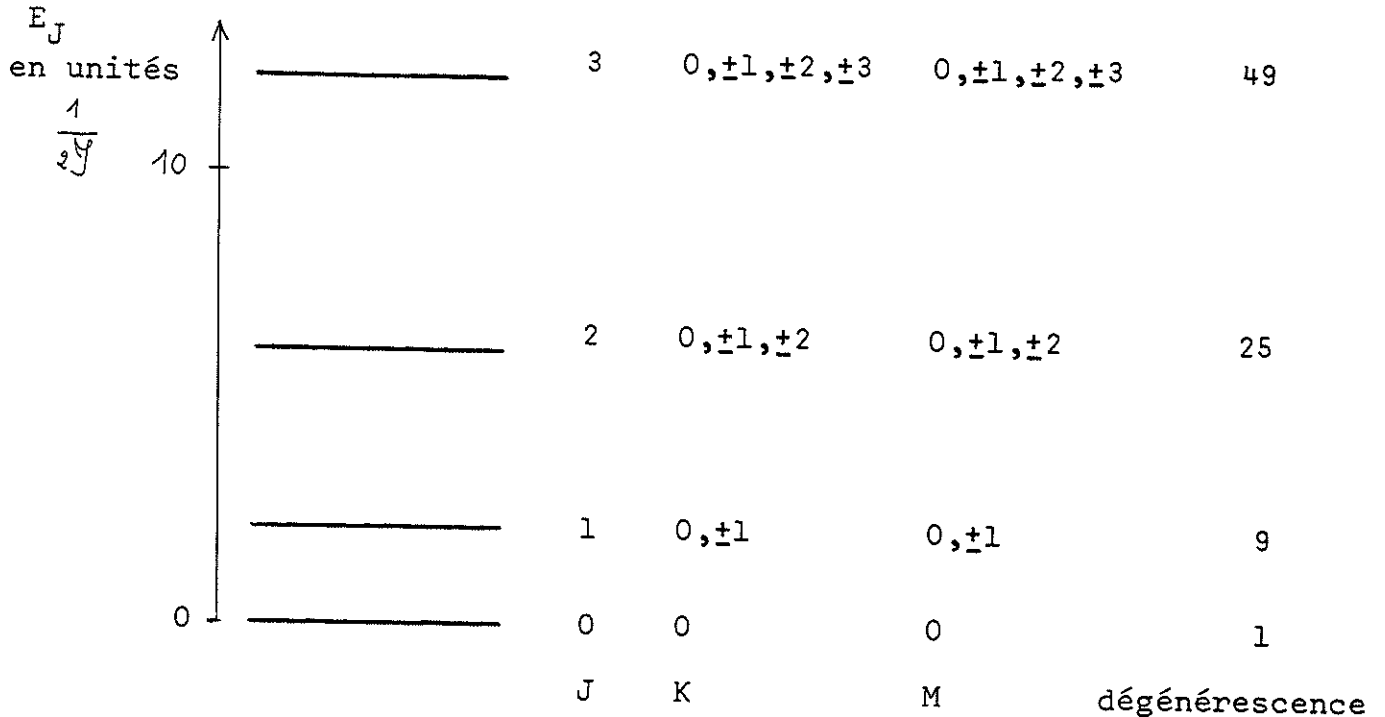
et ses fonctions propres se réduisent à celles de l'opérateur  $\bar{L}^2$ . Les valeurs propres de  $H$  sont égales à

$$E_J = \frac{J(J+1)}{2\mathcal{J}}, \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad (11.62)$$

A chaque valeur propre correspondent  $(2J+1)^2$  vecteurs propres

$$|JMK\rangle = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} \mathcal{D}_{KM}^J(\alpha, \beta, \gamma), \quad K, M = 0, \pm 1, \dots, \pm J. \quad (11.63)$$

Le facteur  $\sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}}$  a été introduit pour normaliser les vecteurs  $|JMK\rangle$  tenant compte de la propriété (10.12) des matrices de rotation.



### Spectre du rotateur sphérique

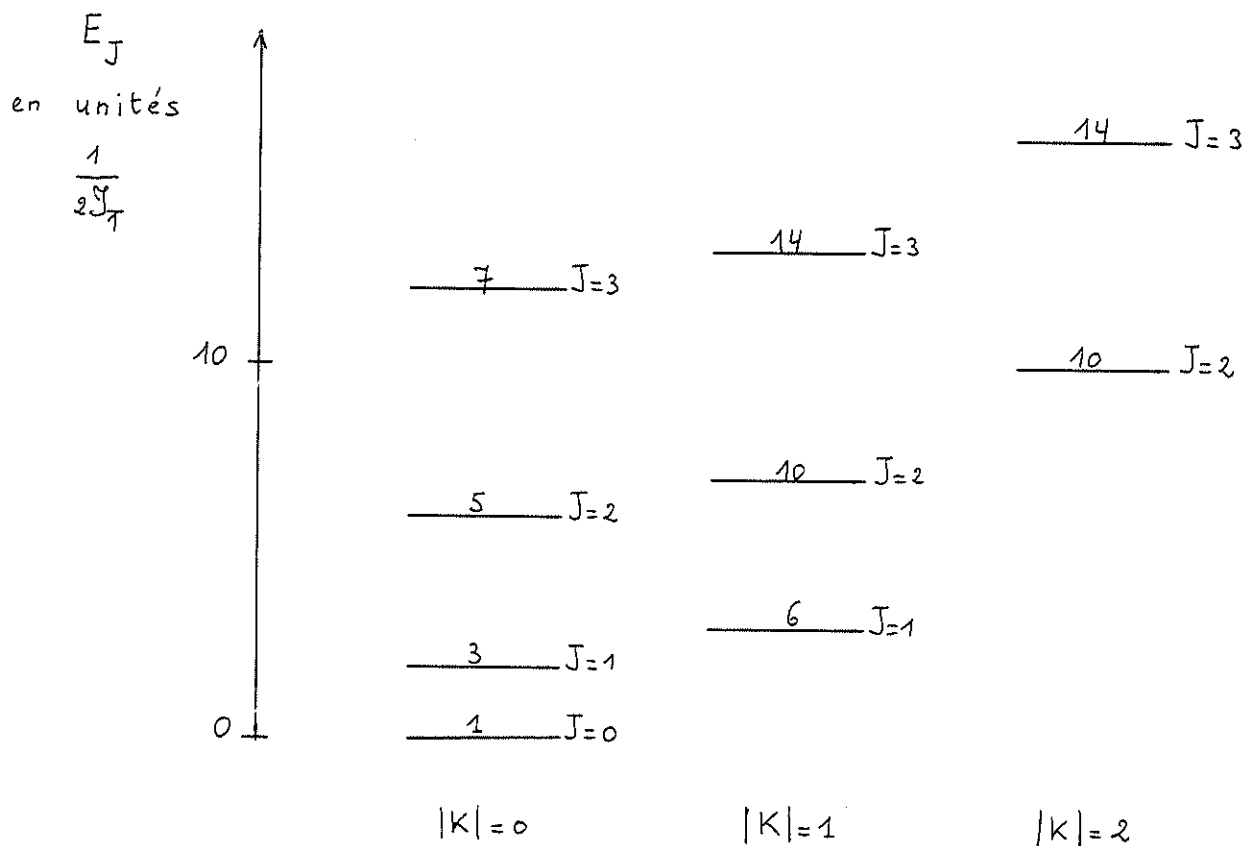
Lorsque deux seulement des moments d'inertie sont égaux, par exemple  $I_1 = I_2 \neq I_3$ , le hamiltonien (11.11) du rotateur devient

$$H = \frac{\bar{L}^2}{2I_1} + \left( \frac{1}{2I_3} - \frac{1}{2I_1} \right) L_3^2. \quad (11.64)$$

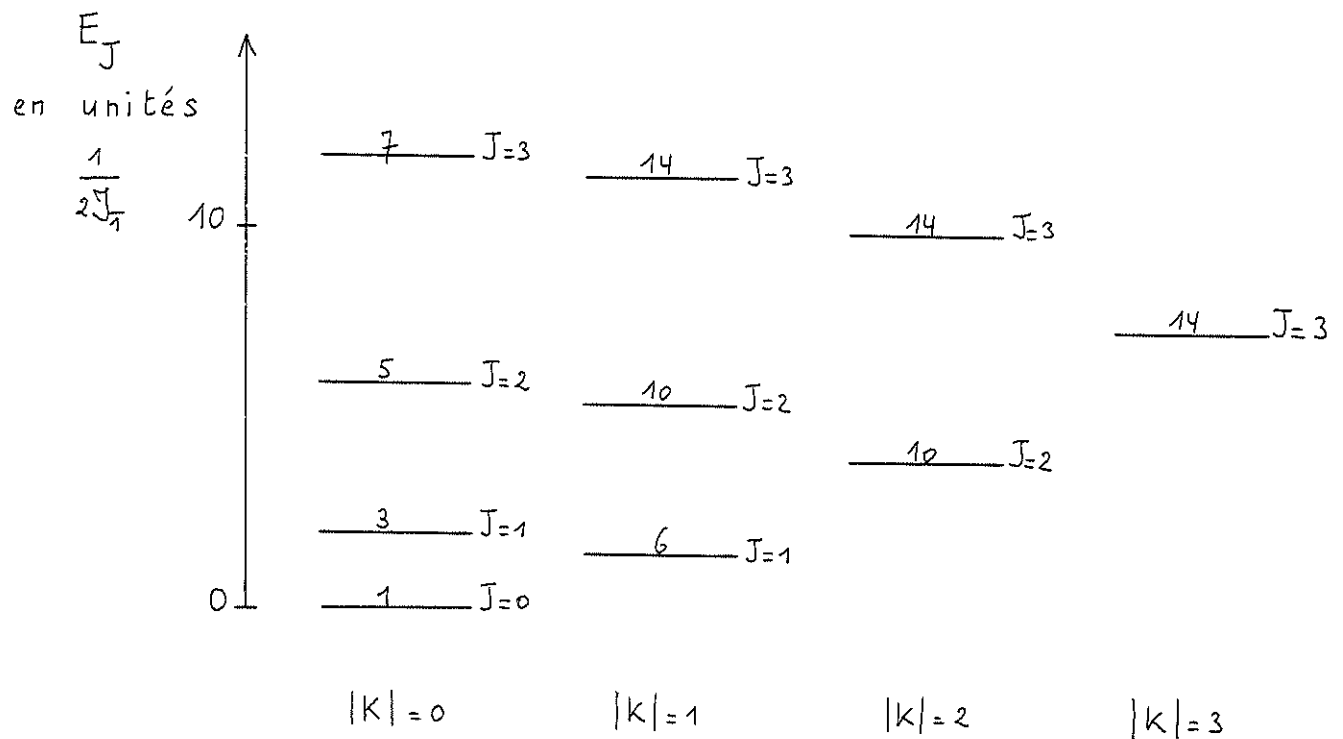
Il commute avec les opérateurs  $\bar{L}^2$ ,  $L_3$  et  $L_3^2$  et par conséquent, ses fonctions propres sont encore du type (11.63). Les valeurs propres de l'énergie sont

$$E_{J|K|} = \frac{J(J+1)}{2I_1} + \left( \frac{1}{2I_3} - \frac{1}{2I_1} \right) K^2, \quad \begin{array}{l} J = 0, 1, 2, \dots \\ |K| = 0, 1, 2, \dots, J. \end{array} \quad (11.65)$$

A chaque valeur de  $J$  correspondent  $(J+1)$  niveaux d'énergie différente, associés aux différentes valeurs possibles de  $|K|$ . Les niveaux d'énergie ne dépendent pas de la valeur de  $M$  ni du signe de  $K$ . Ils sont donc entachés d'une dégénérescence égale à  $2(2J+1)$  si  $K \neq 0$  et à  $(2J+1)$  si  $K = 0$ . Ils se groupent en bandes de rotation caractérisées par une valeur donnée de  $|K|$  et des valeurs croissantes de  $J$  ( $J = |K|, |K| + 1, \dots$ ). On distingue les rotateurs allongés pour lesquels  $\mathcal{J}_3 < \mathcal{J}_1$  et les rotateurs aplatis pour lesquels  $\mathcal{J}_3 > \mathcal{J}_1$ .



Spectre du rotateur symétrique allongé ( $\mathcal{J}_3 = \frac{1}{2} \mathcal{J}_1$ )



Spectre du rotateur symétrique aplati ( $J_3 = 2J_1$ )

La dégénérescence double par rapport au signe de  $K$ , c'est-à-dire le signe de la composante du moment cinétique sur l'axe de symétrie du rotateur, est liée à l'invariance du hamiltonien (11.64) par rapport à une réflexion dans un plan perpendiculaire à l'axe de symétrie. Désignons par  $P_v$  l'opérateur qui correspond à cette réflexion. Puisque deux applications successives de  $P_v$  correspondent à la transformation identique, les valeurs propres de  $P_v$  sont égales à  $\pm 1$ . Les fonctions d'onde (11.63) ne sont pas fonctions propres de  $P_v$ , mais il est facile de construire des combinaisons linéaires des fonctions (11.63) qui sont simultanément fonctions propres du hamiltonien et de l'opérateur  $P_v$ . Pour  $K > 0$ , ces combinaisons linéaires sont

$$|JMK+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |JMK\rangle + |JM-K\rangle ] \quad (11.66a)$$

et 
$$|JMK-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |JMK\rangle - |JM-K\rangle ] . \quad (11.66b)$$

Les vecteurs  $|JMK+\rangle$  restent inchangés tandis que les vecteurs  $|JMK-\rangle$  changent de signe dans une réflexion dans un plan perpendiculaire à l'axe de symétrie. Pour  $K = 0$ , il y a un seul type de vecteur

$$|JM0+\rangle = |JM0\rangle . \quad (11.67)$$

Lorsque les trois moments d'inertie sont différents, le hamiltonien du rotateur commute avec les opérateurs  $\bar{L}^2$  et  $L_3$ , mais non avec  $L_3$ . Ses états propres sont caractérisés par les nombres quantiques  $J$  et  $M$  et sont des combinaisons linéaires des vecteurs (11.63),

$$\psi_{JM} = \sum_K a_K |JMK\rangle . \quad (11.68)$$

En introduisant cette expression dans l'équation de Schrödinger

$$(H - E_J) \psi_{JM} = 0 , \quad (11.69)$$

où  $H$  est le hamiltonien (11.11), on obtient le système de  $2J + 1$  équations

$$\sum_{K'} [ \langle JMK | H | JMK' \rangle - E_J \delta_{KK'} ] a_{K'} = 0 \quad K=0, \pm 1, \dots, \pm J. \quad (11.70)$$

La condition de solubilité de ce système fournit une équation de degré  $2J + 1$  en  $E_J$ . Les racines de l'équation donnent les niveaux d'énergie du rotateur asymétrique correspondant au moment cinétique  $J$ . En fait nous allons voir ci-dessous que le problème est plus simple que cela car la matrice de  $H$  dans les états de moment cinétique  $J, M$  se sépare en quatre sous-matrices qui peuvent être traitées séparément et par conséquent l'équation de degré  $2J + 1$  en  $E_J$  se sépare en quatre équations indépendantes de degré inférieur.

Récrivons  $H$  sous la forme

$$H = a L_1^2 + b L_2^2 + c L_3^2 , \quad (11.71)$$

$$\text{où } a = \frac{1}{2J_7}, \quad b = \frac{1}{2J_2}, \quad c = \frac{1}{2J_3}. \quad (11.72)$$

Les éléments de matrice de H dans les états (11.63) s'obtiennent par deux applications successives des relations (11.37). On trouve :

$$\langle JMK' | H | JMK \rangle = 0 \quad \text{si } K' \neq K, K \pm 2, \quad (11.73a)$$

$$\langle JMK | H | JMK \rangle = \frac{1}{2} \left\{ (a+b) [J(J+1) - K^2] + 2c K^2 \right\}, \quad (11.73b)$$

$$\begin{aligned} \langle JM K_{+2} | H | JMK \rangle &= \langle JMK | H | JM K_{+2} \rangle \\ &= \frac{1}{4} (a-b) \sqrt{(J-K)(J-K-1)(J+K+1)(J+K+2)}. \end{aligned} \quad (11.73c)$$

De la relation (11.73a), il résulte que l'opérateur H ne peut connecter que des états pour lesquels K diffère de deux unités. Par conséquent les états propres de H se séparent en deux classes indépendantes, correspondant aux combinaisons linéaires d'états  $|J M K\rangle$  à K pair (classe E) ou à K impair (classe O) :

$$\psi_{JM}^E = \sum_{K \text{ pair}} a_K |JMK\rangle, \quad (11.74a)$$

$$\psi_{JM}^O = \sum_{K \text{ impair}} a_K |JMK\rangle. \quad (11.74b)$$

D'autre part, les relations (11.73b,c) montrent que

$$\langle JM -K | H | JM -K \rangle = \langle JMK | H | JMK \rangle \quad (11.75a)$$

$$\text{et } \langle JM -K-2 | H | JM -K \rangle = \langle JM -K | H | JM -K-2 \rangle$$

$$= \langle JMK_{+2} | H | JMK \rangle = \langle JMK | H | JMK_{+2} \rangle, \quad (11.75b)$$

d'où l'on déduit que

$$\langle JM K'_+ | H | JMK_- \rangle = \langle JMK_- | H | JM K'_+ \rangle = 0 \quad (11.76)$$

quels que soient  $K$  et  $K' \geq 0$ , les éléments de matrice de  $H$  étant pris entre les états (11.66). Par conséquent, chacune des classes  $E$  et  $O$  se sépare en deux sous-classes indépendantes, correspondant aux combinaisons linéaires  $|JMK+\rangle$  ou  $|JMK-\rangle$  :

$$\psi_{JM}^{E+} = \sum_{K \text{ pair} \geq 0} a_K |JMK+\rangle, \quad (11.77a)$$

$$\psi_{JM}^{E-} = \sum_{K \text{ pair} > 0} a_K |JMK-\rangle, \quad (11.77b)$$

$$\psi_{JM}^{O+} = \sum_{K \text{ impair} > 0} a_K |JMK+\rangle, \quad (11.77c)$$

$$\psi_{JM}^{O-} = \sum_{K \text{ impair} > 0} a_K |JMK-\rangle. \quad (11.77d)$$

Considérons les premières valeurs de  $J$ . Pour  $J = 0$ , il y a un seul état

$$\psi_{00}^{E+} = |000+\rangle = |000\rangle, \quad (11.78)$$

$$\text{d'énergie } E_0 = 0. \quad (11.79)$$

Pour  $J = 1$ , il y a trois états

$$\psi_{1M}^{E+} = |1M0+\rangle = |1M0\rangle, \quad (11.80a)$$

$$\psi_{1M}^{O+} = |1M1+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1M1\rangle + |1M-1\rangle ], \quad (11.80b)$$

$$\psi_{1M}^{O-} = |1M1-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1M1\rangle - |1M-1\rangle ], \quad (11.80c)$$

qui, appartenant à des classes distinctes, ne se mélangent pas. Leur énergie est donc simplement la valeur moyenne de  $H$  :

$$E_{1E+} = \langle 1M0 | H | 1M0 \rangle = a + b, \quad (11.81a)$$

$$E_{1O+} = \langle 1M1 | H | 1M1 \rangle + \langle 1M1 | H | 1M-1 \rangle = a + c, \quad (11.81b)$$

$$E_{10-} = \langle 1M_1 | H | 1M_1 \rangle - \langle 1M_1 | H | 1M_{-1} \rangle = b + c. \quad (11.81c)$$

Pour  $J = 2$ , il y a cinq états

$$\begin{aligned} \psi_{2M}^{E+(i)} &= a_0^{(i)} |2M_0+\rangle + a_2^{(i)} |2M_2+\rangle \\ &= a_0^{(i)} |2M_0\rangle + a_2^{(i)} \frac{1}{\sqrt{2}} [ |2M_2\rangle + |2M_{-2}\rangle ] \quad i=1,2, \end{aligned} \quad (11.82a)$$

$$\psi_{2M}^{E-} = |2M_2-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |2M_2\rangle - |2M_{-2}\rangle ], \quad (11.82b)$$

$$\psi_{2M}^{0+} = |2M_1+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |2M_1\rangle + |2M_{-1}\rangle ], \quad (11.82c)$$

$$\psi_{2M}^{0-} = |2M_1-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |2M_1\rangle - |2M_{-1}\rangle ]. \quad (11.82d)$$

Les trois derniers, appartenant à des classes distinctes, correspondent aux énergies

$$E_{2E-} = \langle 2M_2 | H | 2M_2 \rangle = a + b + 4c, \quad (11.83a)$$

$$E_{20+} = \langle 2M_1 | H | 2M_1 \rangle + \langle 2M_1 | H | 2M_{-1} \rangle = 4a + b + c, \quad (11.83b)$$

$$E_{20-} = \langle 2M_1 | H | 2M_1 \rangle - \langle 2M_1 | H | 2M_{-1} \rangle = a + 4b + c. \quad (11.83c)$$

Pour trouver les énergies des deux premiers états, il faut résoudre le système d'équations

$$\left[ \langle 2M_0 | H | 2M_0 \rangle - E \right] a_0 + \sqrt{2} \langle 2M_0 | H | 2M_2 \rangle a_2 = 0, \quad (11.84)$$

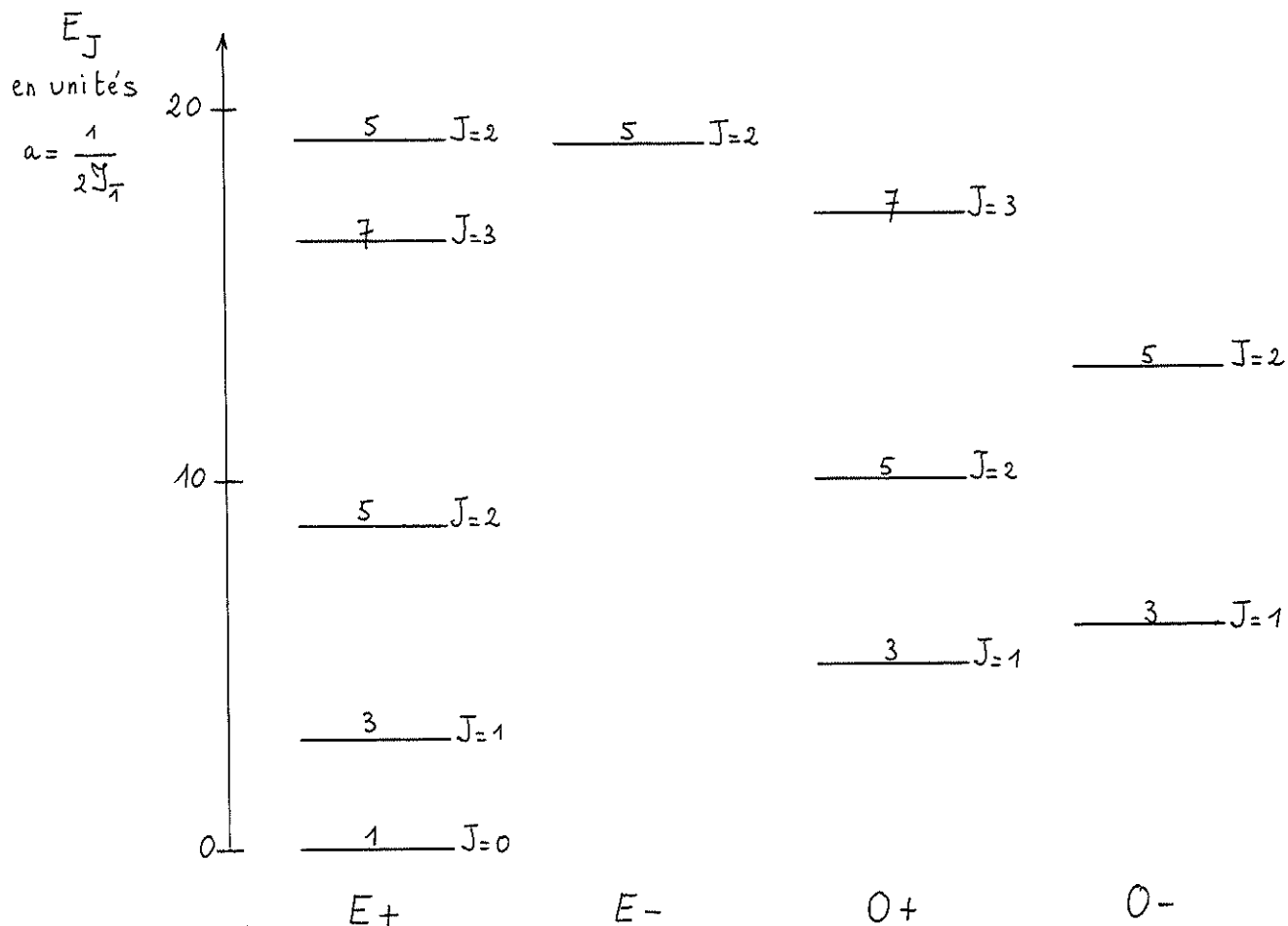
$$\sqrt{2} \langle 2M_0 | H | 2M_2 \rangle a_0 + \left[ \langle 2M_2 | H | 2M_2 \rangle - E \right] a_2 = 0,$$



qui fournit une équation du second degré en  $E$ . Sa résolution conduit au résultat

$$E_{2E+}^{(i)} = 2(a+b+c) \pm 2\sqrt{(a+b+c)^2 - 3(ab+ac+bc)} \quad i=1,2. \quad (11.85)$$

Le spectre obtenu pour  $c = 2b = 4a$  est représenté dans la figure ci-dessous.



Spectre du rotateur asymétrique  $(J_3 = \frac{1}{2} J_2 = \frac{1}{4} J_1)$

La théorie quantique du rotateur trouve une application directe dans les spectres de rotation des molécules et des noyaux.