

Symétries et intégrales de chemin

Table des matières

1	Introduction aux symétries	2
1.1	Les symétries en mécanique classique	2
1.1.1	Principe variationnel	2
1.1.2	Constantes du mouvement	3
1.1.3	Transformée de Legendre	4
1.2	Les symétries en mécanique quantique	6
2	Les groupes de rotation	7
2.1	Groupes et groupes linéaires	7
2.2	Notion de groupe de Lie	8
2.3	Notion d'algèbre de Lie	8
2.4	Représentation d'une algèbre de Lie	9
2.5	Le groupe $SU(2)$ et ses représentations	10
2.5.1	Représentations unitaires irréductibles de $SU(2)$	12
2.5.2	Construction des représentations irréductibles de $SU(2)$	13
2.6	Représentations de $SU(2)/SO(3)$	14
2.7	Transformation des états et des observables sous une rotation	15
2.7.1	Rotation agissant sur des états de moment angulaire donné	17
2.7.2	Fonctions d'onde spinorielles	17
2.7.3	Illustration : désintégration de particules	18
2.8	Groupes dynamiques	19
3	Groupe de Lorentz	21
3.1	Contexte physique	21
3.2	Groupe de Lorentz	21
3.2.1	Générateurs	22
3.2.2	Algèbre de Lie	23
3.2.3	Représentations de l'algèbre	23
4	Mécanique quantique relativiste	24
4.1	Équation de Klein-Gordon	24
4.2	Équation de Dirac	25
4.2.1	Limite non relativiste	26
4.2.2	Invariance par rotation	28
4.2.3	Invariance de Lorentz	29
4.2.4	Construction des états propres d'énergie et d'impulsion fixée	30
5	L'intégrale de chemin	32
5.1	Le propagateur de Feynman	32
5.2	Expression du propagateur de la particule libre	32
5.3	Construction générale du propagateur	33
5.4	Propriétés du propagateur	34
5.5	Propagateur euclidien	35
5.6	Intégrale de chemin sur un espace multiplement connexe	36
5.7	Méthodes semi-classiques	37
5.7.1	Méthode WKB	37
5.7.2	Calcul du propagateur semi-classique	38

1 Introduction aux symétries

1.1 Les symétries en mécanique classique

Nous allons reformuler les équations de la mécanique classique en termes variationnels. Pour cela nous allons introduire les formalismes Lagrangien puis Hamiltonien et étudier l'influence des symétries sur la conservations de certaines grandeurs physiques.

1.1.1 Principe variationnel

On trouve les solutions d'un problème physique en recherchant les extréma d'une fonctionnelle :

$$S\{q(t)\} = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} \left[q(t), \frac{dq}{dt} \right] dt \quad (1)$$

La fonctionnelle S est appelée action et \mathcal{L} le lagrangien.

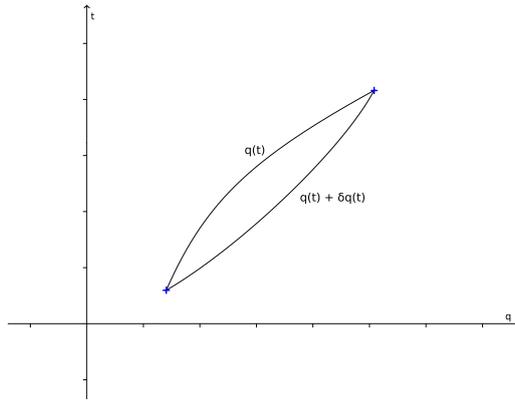


FIGURE 1 – Deux trajectoires reliant les mêmes points de départ et d'arrivée

Théorème : La fonctionnelle $S\{q(t)\}$ est différentiable et :

$$\delta S = S\{q(t) + \delta q(t)\} - S\{q(t)\} = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \right] \delta q(t) dt + \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} \quad (2)$$

Démonstration :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right] dt = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \delta q + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \right\} dt$$

Conséquence : Pour un chemin $q(t)$ dont les extrémités en t_1 et t_2 sont fixées, on a $\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} = 0$. Les extréma de S sont donnés par l'équation de Lagrange :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \quad (3)$$

Remarque : On peut généraliser cette équation à N degrés de liberté : pour un système décrit par le lagrangien $\mathcal{L}(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N)$ les extréma de S sont donnés par :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right)$$

Exemple : On considère le lagrangien d'une particule dans l'espace à trois dimensions plongée dans un potentiel V :

$$\mathcal{L}(q_1, q_2, q_3) = \frac{m}{2} (\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2 + \dot{q}_3^2) - V(q_1, q_2, q_3)$$

L'équation de Lagrange redonne les équations du mouvement : $m\ddot{q}_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i}$ donc $m\frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla}V$.

NB : La transformation $\mathcal{L}(q, \dot{q}) \mapsto \mathcal{L}'(q, \dot{q}) = \mathcal{L}(q, \dot{q}) + \frac{d}{dt}K(q(t))$ ne change pas δS .

1.1.2 Constantes du mouvement

On considère une trajectoire $q(t)$ qui vérifie les équations du mouvement. On considère la trajectoire $q'(t) = q(t) + \delta q(t)$ avec δq ne s'annulant pas aux bords. La variation d'action est alors :

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \right] \delta q(t) dt + \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} = \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2}$$

car q vérifie les équations du mouvement. Si cette transformation laisse l'action invariante, alors :

$$\forall (t_1, t_2), \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} = 0$$

Donc $Q = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \delta q$ est une **constante du mouvement** (théorème de Neuter).

On peut généraliser à N degrés de liberté :

$$Q = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \text{ est une constante du mouvement.} \quad (4)$$

Invariance par translation : On considère le lagrangien de deux particules en interaction via un potentiel central :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{r}_1^2 + \frac{1}{2} m \dot{r}_2^2 - V(|r_1 - r_2|)$$

On translate le système d'un vecteur \vec{a} : $r_1 \mapsto r_1 + \vec{a}$ et $r_2 \mapsto r_2 + \vec{a}$. Le théorème de Neuter donne que :

$$Q = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_1} \delta r_1 + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_2} \delta r_2 = m \dot{r}_1 \cdot \vec{a} + m \dot{r}_2 \cdot \vec{a}$$

est une constante du mouvement. Ceci est vrai pour toute translation de vecteur \vec{a} d'où :

$$\frac{d}{dt} (m \dot{r}_1 + m \dot{r}_2) = 0$$

On retrouve que le centre de masse se déplace à vitesse uniforme.

Invariance par rotation : On considère le lagrangien d'une particule dans un plan soumise à un potentiel central :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - V(\sqrt{x^2 + y^2})$$

Une rotation d'angle θ s'exprime :

$$\begin{cases} x' = x \cos \theta - y \sin \theta \\ y' = x \sin \theta + y \cos \theta \end{cases}$$

D'après le théorème de Neuter :

$$Q = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \delta x + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} \delta y$$

est une constante du mouvement. Pour une petite variation $\delta \theta$:

$$\begin{cases} \delta x = -y \delta \theta \\ \delta y = x \delta \theta \end{cases}$$

On en déduit que $Q = \delta \theta (m x \dot{y} - m \dot{x} y)$ est une constante du mouvement : on retrouve la conservation du moment cinétique $L_z = m x \dot{y} - m \dot{x} y$.

Invariance par translation temporelle : $t \mapsto t + t_0$

Cette invariance implique que le lagrangien ne dépend pas explicitement de t . On dérive \mathcal{L} et on applique l'équation de Lagrange :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{L}}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \ddot{q} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \dot{q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \dot{q} = \frac{d}{dt} \left(\dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) \\ &= \frac{d}{dt} \left(\dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \mathcal{L} \right) = 0 \end{aligned}$$

On définit l'énergie du système par :

$$E = \dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \mathcal{L} \quad (5)$$

L'invariance par translation temporelle implique la conservation de l'énergie du système.

1.1.3 Transformée de Legendre

On considère une fonction f convexe. On rappelle la propriété suivante :

$$f \text{ convexe} \Leftrightarrow f'' > 0$$

On considère la fonction $F(x, p) = px - f(x)$. Cette fonction passe par un maximum pour $x = x(p)$. On le trouve avec : $\frac{\partial F}{\partial x} \Big|_{x(p)} = 0$. On en déduit alors $p = f'(x(p))$.

On définit la **transformée de Legendre** de f par la fonction $g(p) = F(p, x(p))$

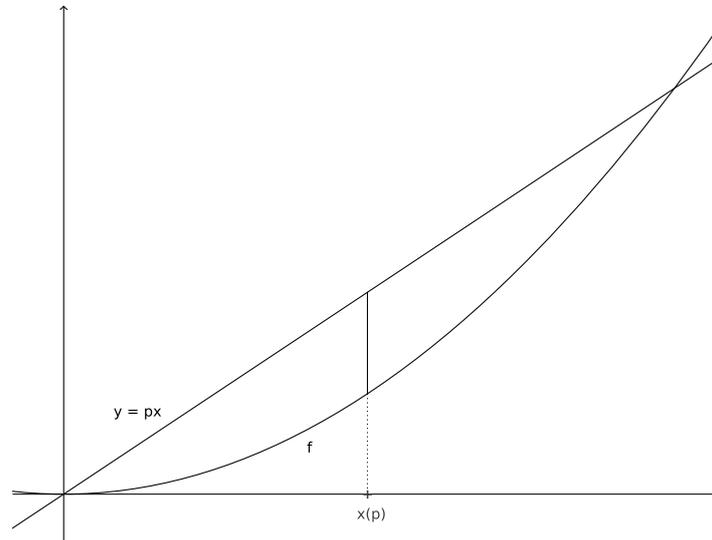


FIGURE 2 – Illustration de la transformée de Legendre d'une fonction f

Exemple : On considère la fonction $f(x) = \frac{mx^2}{2}$. Calculons sa transformée de Legendre : $F(p, x) = px - \frac{mx^2}{2}$ donc on en déduit $x(p) = \frac{p}{m}$. D'où la transformée de Legendre de f :

$$g(p) = F(p, x(p)) = \frac{p^2}{2m}$$

Calculons la **transformée de Legendre de $\mathcal{L}(q, \dot{q})$ par rapport à \dot{q}** : $H(p, q) = p\dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q})$ à minimiser. Donc $p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}$. On en déduit $\dot{q}(p, q)$, ce qui donne l'expression du **hamiltonien** :

$$H(p, q) = p\dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q}) \text{ avec } p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}$$

On a alors :

$$dH = pdq + \dot{q}dp - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q}dq - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}d\dot{q} = \dot{q}dp - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q}dq$$

Et l'équation de Lagrange donne :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right) = \dot{p}$$

On en déduit les équations de Hamilton :

$$\boxed{\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q} ; \frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}} \quad (6)$$

Tout ceci se généralise à N degrés de libertés :

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i ; \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i$$

On passe ainsi du formalisme Lagrangien à N degrés de libertés (q_1, \dots, q_N) et leurs dérivées temporelles au formalisme Hamiltonien à $2N$ degrés de libertés $q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N$. On appelle cet espace à $2N$ dimensions l'**espace des phases**.

Exemple : L'oscillateur harmonique

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

On effectue la transformée de Legendre : $p = m\dot{q}$. D'où l'expression du Hamiltonien :

$$H = p\dot{q} - \mathcal{L} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

On peut représenter des trajectoires dans l'espace des phases (voir figure 3).

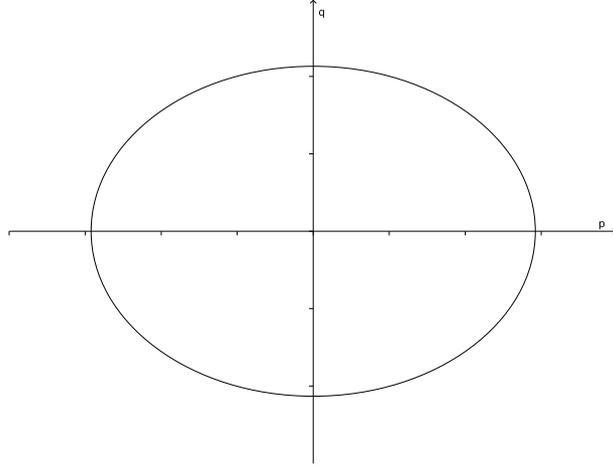


FIGURE 3 – Trajectoire d'énergie constante de l'oscillateur harmonique dans l'espace des phases

Définition : Les **crochets de Poisson** de deux fonctions $A(\{p_i, q_i\})$ et $B(\{p_i, q_i\})$ sur l'espace des phases sont définis par :

$$\{A, B\} = \sum_i \left[\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right] \quad (7)$$

Propriétés immédiates :

$$\{q_\alpha, p_\beta\} = \delta_{\alpha\beta} ; \{q_\alpha, q_\beta\} = 0 ; \{p_\alpha, p_\beta\} = 0$$

Constantes du mouvement : Soit F une fonction sur l'espace des phases.

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i$$

On utilise les équations de Hamilton et on obtient :

$$\frac{dF}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

Et finalement :

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} \quad (8)$$

Les constantes du mouvement sont donc données par : $\{F, H\} = 0$.

Propriété : **Identité de Jacobi**

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \quad (9)$$

Conséquence : Si l'on a deux constantes du mouvement A et B , alors $C = \{A, B\}$ est aussi une constante du mouvement.

1.2 Les symétries en mécanique quantique

On rappelle que l'on se place dans un espace de Hilbert \mathcal{H} . Les états physiques sont des éléments de \mathcal{H} de norme 1 notés $|\psi\rangle$. A toute grandeur physique mesurable on associe un opérateur A autoadjoint : $A^\dagger = A$. La probabilité qu'un état $|\phi_1\rangle$ passe dans un état $|\phi_2\rangle$ est donnée par $W_{12} = |\langle\phi_1|\phi_2\rangle|^2$.

On se donne un système (atome, molécule, ...) sur lequel on applique une transformation active S (rotation, translation, ...) : $\psi_n(\vec{r}) \rightarrow \psi'_n(\vec{r}')$.

Un système préparé dans un état $|\psi\rangle$ peut être mesuré dans un état propre $|n\rangle$ avec la probabilité :

$$|\langle n|\psi\rangle|^2 = \left| \int \psi_n^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d^3\vec{r} \right|^2$$

Définition : Une opération de symétrie est une correspondance entre vecteurs d'états qui **conserve les probabilités de transition** :

$$\boxed{|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 = \left| \int \psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})d^3\vec{r} \right|^2 = \left| \int S\psi_1^*(\vec{r}')S\psi_2(\vec{r}')d^3\vec{r}' \right|^2 = |\langle^S\psi_1|^S\psi_2\rangle|^2} \quad (10)$$

Exemple 1 : Rotation

L'opération de rotation R : $\psi(\vec{r}) \mapsto R\psi(R^{-1}\vec{r})$ est bien une symétrie car le Jacobien du changement de variable $\vec{r}' = R^{-1}\vec{r}$ est égal à 1. On a même ici $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle^R\psi_1|^R\psi_2\rangle$.

Il existe un opérateur \mathcal{U} tel que $|^R\psi\rangle = \mathcal{U}(R)|\psi\rangle$

Exemple 2 : Translation

$|\psi\rangle \mapsto |^T\psi\rangle$ avec $^T\psi(x) = \psi(x - a)$. De même que pour la rotation, on a $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle^T\psi_1|^T\psi_2\rangle$.
Considérons l'opérateur unitaire $\mathcal{U}(a) = e^{-iap_x/\hbar}$. On a :

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(a)\psi(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{ia}{\hbar} \right)^n p_x^n \psi(x) \text{ avec } p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \frac{\partial^n \psi}{\partial x^n}(x) \\ \mathcal{U}(a)\psi(x) &= \psi(x - a) \end{aligned}$$

Théorème de Wigner : Soit S une transformation de \mathcal{H} qui agit sur les vecteurs d'états (à une phase près) qui conserve les probabilités de transition.

- Il existe un opérateur unitaire $\mathcal{U}(S)$ qui induit la transformation $|\psi'\rangle = \mathcal{U}(S)|\psi\rangle$
- Cet opérateur est soit unitaire : $\langle\psi'|\psi\rangle = \langle\mathcal{U}(S)\psi'|\mathcal{U}(S)\psi\rangle$, soit antiunitaire : $\langle\psi'|\psi\rangle = \langle\mathcal{U}(S)\psi'|\mathcal{U}(S)\psi\rangle^*$

Remarque sur le concept de symétrie :

Le fait qu'il y ait une symétrie n'implique aucune propriété particulière sur l'état du système (la fonction d'onde ne présente pas forcément les mêmes symétries : voir états $2p$ d'un atome) ni sur l'évolution temporelle du système : il s'agit d'une description instantanée.

$|\phi(t_0)\rangle$ Considérons une opération de symétrie S qui transforme un état initial $|\phi(t_0)\rangle$ en un état $|^S\phi(t_0)\rangle$. On fait évoluer l'état $|\phi(t_0)\rangle$ avec un hamiltonien H selon l'équation de Schrödinger jusqu'à un temps t . A cet instant, $|\phi(t)\rangle \xrightarrow{S} |^S\phi(t)\rangle$. Mais l'état $|^S\phi(t_0)\rangle$ n'évolue pas forcément vers l'état $|^S\phi(t)\rangle$ selon les lois de la mécanique quantique.

Imposons de plus cette condition. L'évolution Hamiltonienne pour un opérateur hamiltonien est régie par l'opérateur $e^{-i\frac{t-t_0}{\hbar}H}$. Supposons que S soit appliquée par un opérateur unitaire $\mathcal{U}(S)$ tel que $\mathcal{U}(S)|\psi\rangle = |^S\psi\rangle$. On a donc :

$$e^{-i\frac{t-t_0}{\hbar}H}|^S\phi(t_0)\rangle = \mathcal{U}(S)e^{-i\frac{t-t_0}{\hbar}H}|\phi(t_0)\rangle$$

Donc $[\mathcal{U}(S), e^{-i\frac{t-t_0}{\hbar}H}] = 0$ et en dérivant par rapport à t , on obtient :

$$[\mathcal{U}(S), H] = 0$$

Prenons l'exemple d'une translation de \vec{a} :

$$\mathcal{U}(T_{\vec{a}}) = e^{-i\frac{\vec{a}\cdot\vec{p}}{\hbar}H} \text{ donc } [\vec{p}, H] = 0$$

On retrouve donc l'équivalent classique dans le cas où l'on impose la même évolution temporelle aux fonctions d'onde.

2 Les groupes de rotation

2.1 Groupes et groupes linéaires

Définition : Un groupe est un ensemble G muni d'une loi de composition interne \circ qui vérifient :

1. \circ est associative : $\forall g_1, g_2, g_3 \in G, (g_1 \circ g_2) \circ g_3 = g_1 \circ (g_2 \circ g_3)$
2. Il existe un élément neutre de G pour \circ noté e qui vérifie : $\forall g \in G, g \circ e = e \circ g = g$
3. Tout élément de G admet un inverse pour \circ : $\forall g \in G, \exists g^{-1} \in G, g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$

Définition : Une représentation linéaire d'un groupe G sur un espace vectoriel V est une application linéaire de G dans V telle que :

$$\forall (g_1, g_2) \in G^2, T(g_1 \circ g_2) = T(g_1) \cdot T(g_2)$$

Ce qui implique $T(e) = \mathbb{I}$ et $T(g^{-1}) = [T(g)]^{-1}$.

Groupe général linéaire :

Le groupe général linéaire noté $GL(n, \mathbb{R})$ ou $GL(n, \mathbb{C})$ est l'ensemble des matrices inversibles de taille $n \times n$ à coefficients dans \mathbb{R} ou \mathbb{C} .

Pour caractériser un élément de $GL(n, \mathbb{R})$, il faut n^2 paramètres.

Groupe spécial linéaire :

Le groupe spécial linéaire $SL(n, \mathbb{R})$ ou $SL(n, \mathbb{C})$ est un sous-groupe du groupe linéaire formé des matrices de déterminant égal à 1.

Pour caractériser un élément de $SL(n, \mathbb{R})$, il faut $n^2 - 1$ paramètres.

Groupe orthogonal :

Le groupe orthogonal $O(n)$ est un sous groupe de $GL(n, \mathbb{R})$ formé des matrices qui laissent invariant le produit scalaire euclidien.

Notons $(x, y) = \sum x_i y_i$ le produit scalaire euclidien de x et de y .

$$M \in O(n) \Leftrightarrow (Mx, My) = (x, y) \Leftrightarrow {}^t(Mx)^t(My) = {}^t x^t M M y = {}^t x y$$

$$\boxed{M \in O(n) \Leftrightarrow {}^t M M = \mathbb{I}}$$

On a la propriété suivante : $M \in O(n) \Rightarrow \det M = \pm 1$

Groupe spécial orthogonal :

Le groupe spécial orthogonal est le sous groupe de $O(n)$ formé des matrices de déterminant égal à 1.

$$\boxed{M \in SO(n) \Leftrightarrow {}^t M M = \mathbb{I} \text{ et } \det M = 1}$$

Il faut $\frac{n(n-1)}{2}$ paramètres pour caractériser un élément de ce groupe.

Remarques :

On peut définir un pseudo produit scalaire par $(x, y) = {}^t x G y$ avec $G \in S_n(\mathbb{R})$.

Dans le cas euclidien, $G = \mathbb{I}$.

Si on prend $G = \text{Diag}(1, \dots, 1, -1, \dots, -1)$ avec s termes négatifs, on définit les groupes pseudo-orthogonaux $O(n-s, s)$ et $SO(n-s, s)$.

Groupe unitaire :

Dans \mathbb{C}^n , on définit la forme sesquilinéaire suivante : $(x, y) = \sum x_i^* y_i$.

Le groupe unitaire $U(n)$ est le sous groupe de $GL(n, \mathbb{C})$ formé des matrices laissant invariant cette forme.

$$\boxed{M \in U(n) \Leftrightarrow U^\dagger U = \mathbb{I}}$$

Groupe spécial unitaire :

C'est le sous-groupe $SU(n)$ de $U(n)$ formé des matrices de déterminant égal à 1.

Remarque :

On peut comme précédemment définir les groupes pseudo-unitaires.

2.2 Notion de groupe de Lie

Définition : Un groupe de Lie est un ensemble muni d'une variété analytique et d'une structure de groupe telles que les applications :

$$\begin{aligned} G \times G &\rightarrow G & \text{et} & & G &\rightarrow G \\ (A, B) &\mapsto AB & & & A &\mapsto A^{-1} \end{aligned} \text{ soient analytiques.}$$

Remarque :

On peut voir un groupe de Lie comme un groupe continu dont les éléments sont déterminés par n paramètres : $A(\vec{t}) = A(t_1, \dots, t_n) \in G$. On peut écrire : $A(\vec{t})B(\vec{t}') = C(\phi(\vec{t}, \vec{t}'))$ et $A(\vec{t})^{-1} = A(\psi(\vec{t}))$. Les fonctions ϕ et ψ doivent être analytiques.

Exemple : $SO(2)$ est un groupe de Lie dont les éléments sont déterminés par un paramètre :

$$A(t) = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix} \text{ et } \phi(t, t') = t + t' ; \psi(t) = -t$$

2.3 Notion d'algèbre de Lie

Définition : Une algèbre de Lie est un espace vectoriel G muni d'une application bilinéaire de $G \times G$ dans G notée $[\cdot, \cdot]$ qui vérifie :

1. $\forall g \in G, [g, g] = 0$
2. l'identité de Jacobi : $\forall x, y, z \in G, [x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0$

Il en résulte que $[\cdot, \cdot]$ est antisymétrique : $\forall x, y \in G, [x, y] = -[y, x]$

Remarque : A partir d'un groupe de Lie, on peut générer une algèbre de Lie en s'intéressant au comportement de ses éléments au voisinage de l'identité :

On considère un groupe de Lie dont les éléments dépendent de n paramètres et tel que $A(0) = \mathbb{I}$. On définit les **générateurs** de l'algèbre par :

$$X_i = \left. \frac{\partial}{\partial t_i} A(0, \dots, 0, t_i, 0, \dots, 0) \right|_{t_i=0}$$

On a alors n générateurs, donc on peut écrire $[X_i, X_j] = \sum_m f_{ij}^m X_m$. Les f_{ij}^m sont appelés **constantes de structure** de l'algèbre de Lie et vérifient :

$$f_{ij}^m = -f_{ji}^m \text{ et } f_{ij}^m f_{mk}^n + f_{jk}^m f_{mi}^n + f_{ki}^m f_{mj}^n = 0$$

Remarque : Il est parfois plus aisé de déterminer les générateurs en étudiant de petites variations autour de l'identité plutôt que de dériver une paramétrisation. Voir section 2.5 page 11.

Exemple : On considère $SO(n)$ le groupe spécial orthogonal d'ordre n . On s'intéresse à un sous-groupe de $SO(n)$ dont les éléments $A(t)$ sont déterminés par un unique paramètre t et tels que $A(0) = \mathbb{I}$.

$$\forall t, {}^t A(t)A(t) = \mathbb{I}$$

On dérive cette relation par rapport à t et on l'évalue en $t = 0$:

$${}^t A'(0) + A'(0) = 0$$

Donc $A'(0) \in A_n$ l'ensemble des matrices antisymétriques.

Soit $X \in A_n$, on s'intéresse à $e^{tX} = \sum_n \frac{t^n X^n}{n!}$. On vérifie que $\forall X \in A_n, e^{tX} \in SO(n)$.

Pour $X \in A_n$ et $A \in SO(n)$, en dérivant $Ae^{tX}A^{-1}$ par rapport à t et en l'évaluant en $t = 0$, on obtient que $\forall A \in SO(n), AXA^{-1} \in A_n$. Si on prend A de la forme e^{tY} et que l'on développe par rapport à t , on obtient :

$$(1 + tY + \dots)X(1 - tY + \dots) = X + t[X, Y] + \dots \in A_n$$

Où $[\cdot, \cdot]$ désigne le commutateur. On en déduit alors :

$$\forall (X, Y) \in A_n^2, [X, Y] \in A_n$$

$[\cdot, \cdot]$ est antisymétrique et vérifie la relation de Jacobi, on a donc une algèbre de Lie.

2.4 Représentation d'une algèbre de Lie

Définition : Une **représentation** $\mathcal{D}(G)$ d'une algèbre de Lie G est une application linéaire de G dans un espace vectoriel V qui vérifie : $\forall (X_i, X_j) \in G^2, [\mathcal{D}(X_i), \mathcal{D}(X_j)] = \mathcal{D}([X_i, X_j])$

Définition : La **représentation adjointe** de G est l'application linéaire définie sur les générateurs de G par :

$$\begin{aligned} G &\rightarrow M_n(\mathbb{K}) \\ X_i &\mapsto M(X_i) = ((f_{ij}^k)) \end{aligned}$$

Exemple : On considère le groupe $SO(3)$ des transformations linéaires de \mathbb{R}^3 qui conservent le produit scalaire et l'orientation.

1. Algèbre de Lie :

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} ; L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; L_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$[L_i, L_j] = \epsilon_{ijk} L_k \text{ avec } \epsilon_{123} = 1$$

Un autre choix est plus approprié à la mécanique quantique : $J_n = iL_n$.

2. Topologie du groupe $SO(3)$:

Paramétrisation du groupe : \vec{n} axe de rotation et θ angle de rotation.

$$\vec{r}' = R(\theta, \vec{n})\vec{r} = \vec{n}(\vec{r} \cdot \vec{n}) + \cos \theta (\vec{r} - \vec{n}(\vec{r} \cdot \vec{n})) + \sin \theta (\vec{n} \wedge \vec{r})$$

Les couples (\vec{n}, θ) et $(-\vec{n}, 2\pi - \theta)$ donnent la même rotation donc on convient de restreindre θ à $[0, \pi]$. On peut représenter les rotations par un vecteur de \mathbb{R}^3 : $\theta\vec{n}$. Ainsi à tout point de la sphère de centre O et de rayon π est associé une rotation de \mathbb{R}^3 . Mais une rotation autour de \vec{n} d'angle π est identique à une rotation autour de $-\vec{n}$ et d'angle π . L'espace de $SO(3)$ est donc la sphère de rayon π dont on a associé les points diamétralement opposés.

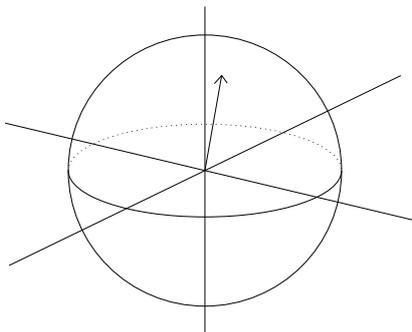


FIGURE 4 – Représentation de $SO(3)$ et d'une rotation

Une rotation peut se voir comme un chemin dans l'espace $\{\theta(t), \vec{n}(t)\}$ donc sur cette sphère. Un chemin fermé ramène l'objet sur lui-même. Il existe deux classes de chemins fermés : ceux qui joignent deux points équivalents et qui ne sont pas déformables en un chemin non trivial et ceux qui joignent deux couples de points équivalents et qui sont déformables en un chemin trivial. On dit que $SO(3)$ est doublement connexe.

Une rotation de 2π dans \mathbb{R}^3 n'est pas une rotation triviale mais une de 4π l'est.

Parmi tous les groupes de Lie ayant la même algèbre de Lie que $SO(3)$ il existe un seul groupe qui est simplement connexe, c'est le groupe de recouvrement universel $SU(2)$.

Théorème : Toute représentation à une phase près du groupe $SO(3)$ est une représentation unitaire de son groupe de recouvrement universel $SU(2)$.

Remarque : Le théorème de Wigner donne que le groupe des symétries est représenté à une phase près dans l'espace de Hilbert \mathcal{H} par un opérateur unitaire ou anti-unitaire. Notons \mathcal{U} cette représentation, elle vérifie la relation suivante :

$$\mathcal{U}(g_1)\mathcal{U}(g_2) = e^{i\phi}\mathcal{U}(g_1 \circ g_2)$$

Le théorème précédent nous permet de nous ramener à l'étude des représentations de $SU(2)$ plutôt que celles à une phase près de $SO(3)$. Si l'on oublie cette phase, nous verrons que le spin demi-entier n'apparaît pas.

2.5 Le groupe $SU(2)$ et ses représentations

Définition : Le groupe $SU(2)$ est formé des matrices unitaires unimodulaires de \mathcal{M}_2 :

$$M \in SU(2) \Leftrightarrow M^\dagger M = \mathbb{I} \text{ et } \det U = 1$$

Paramétrisation : Les éléments du groupe $SU(2)$ peuvent être paramétrés de la façon suivante :

$$U = \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{I} - i \sin \frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \quad (11)$$

avec $\theta \in [0, 2\pi]$, $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$ avec $\|\vec{n}\| = 1$ et $\vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \sigma_1 n_1 + \sigma_2 n_2 + \sigma_3 n_3$ où les σ_i sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Propriétés : Notons $C = i\sigma_2$. On a les propriétés suivantes :

- Les σ_i sont hermitiennes : $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$
- $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{I} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$
- $C = C^* = -C^{-1} = -C^\dagger = -{}^t C$
- $C^{-1t} \sigma_i C = -\sigma_i$
- $\forall A \in \mathcal{M}_2, CAC^{-1t}A = \det A \mathbb{I}$

Démonstration de la paramétrisation : $CAC^{-1t}A = \det A \mathbb{I}$ donne : $AC^{-1t}AC = \det A \mathbb{I}$.

Pour U telle que $\det U = 1$ on a donc $U^{-1} = C^{-1t}UC$.

On peut écrire toute matrice de \mathcal{M}_2 sous la forme : $U = a_0 \mathbb{I} - i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}$.

Prenons $U \in SU(2)$, alors $U^\dagger = U^{-1}$. Or $U^\dagger = a_0^* \mathbb{I} + i\vec{a}^* \cdot \vec{\sigma}$ car σ_i est hermitienne. D'où :

$$a_0^* \mathbb{I} + i\vec{a}^* \cdot \vec{\sigma} = C^{-1}[a_0 \mathbb{I} - i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}]C = a_0 \mathbb{I} - i\vec{a} C^{-1t} \vec{\sigma} C = a_0 \mathbb{I} + i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}$$

On en déduit alors que $a_0 \in \mathbb{R}$ et $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$. Donc U s'écrit alors :

$$U = a_0 \mathbb{I} - i\vec{a} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} a_0 - ia_3 & -ia_1 - a_2 \\ -ia_1 + a_2 & a_0 + ia_3 \end{pmatrix}$$

De plus on doit avoir la relation $\det U = 1$ donc :

$$\det U = a_0^2 + \vec{a}^2 = 1$$

On prend donc :

$$a_0 = \cos \frac{\theta}{2} \text{ et } \vec{a} = \sin \frac{\theta}{2} \vec{n}$$

Théorème : A toute matrice $\pm U \in SU(2)$ correspond une rotation R , qui à tout vecteur \vec{x} associe un vecteur \vec{x}' , définie par :

$$\vec{x}' \cdot \vec{\sigma} = U \vec{x} \cdot \vec{\sigma} U^{-1} \quad (12)$$

Démonstration : Soient $U \in SU(2)$ et $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$. On considère la matrice :

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{x} = \sigma_1 x_1 + \sigma_2 x_2 + \sigma_3 x_3$$

On sait que $U \vec{\sigma} \cdot \vec{x} U^{-1} \in \mathcal{M}_2$ donc :

$$U \vec{\sigma} \cdot \vec{x} U^{-1} = x_0 \mathbb{I} + \vec{\sigma} \cdot \vec{x}'$$

Or les matrices de Pauli sont de trace nulle, donc :

$$Tr(U \vec{\sigma} \cdot \vec{x} U^{-1}) = Tr(\vec{\sigma} \cdot \vec{x}) = 0$$

Donc $x_0 = 0$ d'où $U \vec{\sigma} \cdot \vec{x} U^{-1} = \vec{\sigma} \cdot \vec{x}'$

Or nous avons vu que $\det(\vec{\sigma} \cdot \vec{x}) = -\vec{x}^2$ et on a $\det(\vec{\sigma} \cdot \vec{x}') = \det(\vec{\sigma} \cdot \vec{x})$ d'où $\vec{x}'^2 = \vec{x}^2$. Cette transformation conserve la norme, il reste à montrer qu'elle conserve l'orientation pour prouver qu'il s'agit d'une rotation. On peut écrire le produit mixte de trois vecteurs de \mathbb{R}^3 sous la forme : $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}) = \frac{1}{2i} \det[(\vec{\sigma} \cdot \vec{x})(\vec{\sigma} \cdot \vec{y})(\vec{\sigma} \cdot \vec{z})]$. On en déduit donc que $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}) = (\vec{x}', \vec{y}', \vec{z}')$. Cette transformation conserve l'orientation, c'est donc une rotation.

Remarque : U et $-U$ correspondent à la même rotation avec l'expression établie ci-dessus.

Propriété : $U = \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sin \frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ est une rotation d'angle θ autour de l'axe \vec{n} .

Démonstration :

- \vec{n} est l'axe de rotation :

$$[U, \sigma \cdot \vec{n}] = 0 \Rightarrow U \sigma \cdot \vec{n} = \sigma \cdot \vec{n} U \Rightarrow U \sigma \cdot \vec{n} U^{-1} = \sigma \cdot \vec{n}$$

Donc \vec{n} est laissé invariant par cette rotation, donc porte l'axe.

- Soit $\vec{V} \in \{\vec{n}\}^\perp$

$$U \vec{\sigma} \cdot \vec{V} U^{-1} = \left(\cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sigma \cdot \vec{n} \sin \frac{\theta}{2} \right) \vec{\sigma} \cdot \vec{V} \left(\cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} + i \sigma \cdot \vec{n} \sin \frac{\theta}{2} \right)$$

Or $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$ donc :

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} (\sigma_i a_i) (\sigma_j a_j) &= \sum_{i,j} a_i a_j \delta_{ij} + i \sum_{i,j} \epsilon_{ijk} a_i a_j \sigma_k \\ &\Rightarrow \boxed{(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b})} \end{aligned}$$

Or on a établi que : $U \vec{\sigma} \cdot \vec{V} U^{-1} = (\cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sigma \cdot \vec{n} \sin \frac{\theta}{2}) \vec{\sigma} \cdot \vec{V} (\cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} + i \sigma \cdot \vec{n} \sin \frac{\theta}{2})$ On en déduit alors que

$$U \vec{\sigma} \cdot \vec{V} U^{-1} = \vec{\sigma} \cdot \vec{V}' \text{ avec } \vec{V}' = \cos \theta \vec{V} + \sin \theta (\vec{n} \wedge \vec{V})$$

Donc \vec{V}' est l'image de \vec{V} par rotation d'angle θ autour de \vec{n} .

Propriété : $\forall V \in SU(2), VU(\theta, \vec{n})V^{-1} = U(\theta, \vec{n}')$ où $\vec{n}' = R(V)\vec{n}$ et $U(\theta, \vec{n}) = \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sin \frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$.

Démonstration : $VU(\theta, \vec{n})V^{-1} = \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sin \frac{\theta}{2} V \vec{\sigma} \cdot \vec{n} V^{-1} = \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sin \frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n}'$ où $\vec{n}' = R(V)\vec{n}$.

Algèbres de Lie de $SO(3)$ et $SU(2)$:

1. $SO(3)$:

$R(\theta, \vec{n}) = \mathbb{1} - i\theta \vec{J} \cdot \vec{n}$ avec les J_i les générateurs de l'algèbre de Lie. Pour une rotation d'angle θ autour de \vec{n} l'image d'un vecteur \vec{x} s'écrit :

$$\vec{x}' = \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{x}) + \cos \theta (\vec{x} - (\vec{x} \cdot \vec{n})\vec{n}) + \sin \theta (\vec{n} \wedge \vec{x})$$

Pour une rotation infinitésimale : $\vec{x}' = \vec{x} + \theta (\vec{n} \wedge \vec{x}) + O(\theta^2)$.

Donc en coordonnées : $x'_i = x_i + \theta \epsilon_{ijk} n_j x_k = R_{ik} x_k$ donc $R_{ik} = \delta_{ik} + \theta \epsilon_{ijk} n_j$. On en déduit alors les générateurs $(J_l)_{ik} = i \epsilon_{ilk}$:

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} ; J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} ; J_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$[J_i, J_j] = i \epsilon_{ijk} J_k$$

2. $SU(2)$:

$U(\theta, \vec{n}) = \mathbb{1} - i\theta \vec{J} \cdot \vec{n}$ pour $\theta \ll 1$ avec les J_i les générateurs de l'algèbre de Lie. Or :

$$U(\theta, \vec{n}) = \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin \frac{\theta}{2}$$

Donc à l'ordre 1, on a :

$$U(\theta, \vec{n}) = \mathbb{1} - i \frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$$

On en déduit que les générateurs sont donnés par : $J_i = i \epsilon_{ijk} \frac{\sigma_k}{2}$. Et on a aussi $[J_i, J_j] = i \epsilon_{ijk} J_k$.

Donc $SU(2)$ et $SO(3)$ ont même algèbre de Lie.

Représentation de $SU(2)$: Soit $\begin{matrix} G \rightarrow \mathcal{H} \\ U \mapsto \mathcal{D}(U) \end{matrix}$ telle que $\mathcal{D}(U_1 U_2) = \mathcal{D}(U_1) \mathcal{D}(U_2)$.

Si $U \in SU(2)$ est proche de $\mathbb{1}$: $U = \mathbb{1} - i\vec{\epsilon} \cdot \frac{\vec{\sigma}}{2}$. Alors $\mathcal{D}(U) = \mathbb{1} - i(\epsilon_1 J_1 + \epsilon_2 J_2 + \epsilon_3 J_3)$ avec les J_i les générateurs de la représentation.

Si la représentation est unitaire, les J_i sont hermitiens : $\mathcal{D}[U(\epsilon, \vec{n})] = \mathbb{1} - i\epsilon \vec{J} \cdot \vec{n}$.

Soit $V \in SU(2)$: $VU(\epsilon, \vec{n})V^{-1} = U(\epsilon, \vec{n}')$ avec $\vec{n}' = R(V)\vec{n}$ donc :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(V)\mathcal{D}(U(\epsilon, \vec{n}))\mathcal{D}(V^{-1}) &= \mathcal{D}(U(\epsilon, \vec{n}')) \\ \Rightarrow \mathcal{D}(V)(\mathbb{1} - i\epsilon \vec{J} \cdot \vec{n})\mathcal{D}(V)^{-1} &= \mathbb{1} - i\epsilon \vec{J} \cdot \vec{n}' \\ \Rightarrow \mathcal{D}(V)(\vec{J} \cdot \vec{n})\mathcal{D}(V)^{-1} &= \vec{J} \cdot \vec{n}' \text{ or } n'_\beta = R_{\beta\alpha} n_\alpha \\ \Rightarrow n_\alpha \mathcal{D}(V) J_\alpha \mathcal{D}(V)^{-1} &= J_\beta R_{\beta\alpha} n_\alpha \quad \forall \vec{n} \\ \Rightarrow \mathcal{D}(V) J_\alpha \mathcal{D}(V)^{-1} &= J_\beta R_{\beta\alpha} \end{aligned}$$

On obtient finalement :

$$\boxed{\mathcal{D}(V) J_j \mathcal{D}(V)^{-1} = R_{ij} J_i} \quad (13)$$

Propriété : $[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k$

Exemples de représentations :

1. Représentation spinorielle (de dimension 2) : c'est l'application $U \in SU(2) \mapsto U \in SU(2)$. Les générateurs sont les matrices de Pauli : $J_i = \frac{\sigma_i}{2}$.

2. Représentation vectorielle de dimension 3 : $\mathcal{D}(U) = R(U)$ avec $R_{ij} = \delta_{ij} - \alpha\epsilon_{ijk} n_k$.
 $\mathcal{D}(U) = \mathbb{1} - i\alpha \vec{J} \cdot \vec{n}$ avec $(J_k)_{ij} = -i\epsilon_{ijk}$.

3. Moment orbital : représentation du groupe sur un espace $L^2(\mathbb{R}^2)$ (espace de fonctions d'onde).

$${}^R\psi = \mathcal{D}(R)\psi \text{ avec } {}^R\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r})$$

Cette représentation est unitaire : $\int |{}^R\psi|^2 = \int |\psi|^2$.

On considère une rotation infinitésimale : ${}^R\psi = \psi(\vec{r} - \theta(\vec{r} \wedge \vec{n})) = \psi(\vec{r}) - \theta(\vec{r} \wedge \vec{n}) \cdot \vec{\nabla} \psi = \psi(\vec{r}) - \theta(\vec{r} \wedge \vec{\nabla} \psi) \cdot \vec{n}$.

Or $\mathcal{D}(U) = \mathbb{1} - i\theta \vec{J} \cdot \vec{n}$, on en déduit alors :

$$\boxed{\vec{J} = \frac{1}{i} \vec{r} \wedge \vec{\nabla}}$$

On a bien $[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k$.

Il y a une infinité d'espaces de représentation. On identifie les générateurs J_i , peut-on reconstruire la représentation du groupe en terme de ses générateurs ?

$$\mathcal{D}[U(\epsilon, \vec{n})] \mathcal{D}[U(\theta, \vec{n})] = \mathcal{D}[U(\epsilon + \theta, \vec{n})]$$

$$\mathcal{D}[U(\theta + \epsilon, \vec{n})] - \mathcal{D}[U(\theta, \vec{n})] = \mathcal{D}[U(\theta, \vec{n})] \{ \mathcal{D}[U(\epsilon, \vec{n})] - \mathbb{1} \} = -i\epsilon \vec{J} \cdot \vec{n} \mathcal{D}[U(\theta, \vec{n})]$$

Donc en prenant la limite :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \{ \mathcal{D}[U(\theta + \epsilon, \vec{n})] - \mathcal{D}[U(\theta, \vec{n})] \} = \frac{d}{d\theta} \mathcal{D}[U(\theta, \vec{n})] = -i\vec{J} \cdot \vec{n} \mathcal{D}[U(\theta, \vec{n})]$$

On en déduit alors :

$$\boxed{\mathcal{D}[U(\theta, \vec{n})] = \exp(-i\theta \vec{J} \cdot \vec{n})} \quad (14)$$

2.5.1 Représentations unitaires irréductibles de $SU(2)$

Définition : On appelle **représentations équivalentes** deux représentations $\mathcal{D}_1(U)$ et $\mathcal{D}_2(U)$ de même dimension n d'un groupe G telles qu'il existe $S \in GL_n(\mathbb{C})$ vérifiant :

$$\forall U \in G, \mathcal{D}_2(U) = S^{-1} \mathcal{D}_1(U) S$$

Définition : Soient $\mathcal{D}_1(U)$ et $\mathcal{D}_2(U)$ deux représentations de dimensions respectives p_1 et p_2 du même groupe G . On appelle **somme directe** des représentations $\mathcal{D}_1(U)$ et $\mathcal{D}_2(U)$ la représentation :

$$\mathcal{D}(U) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_1(U) & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_2(U) \end{pmatrix}$$

Définition : On dit qu'une représentation est **réductible** si elle est équivalente à une somme directe de représentations. Dans le cas contraire on parle de représentation **irréductible**.

NB : Une représentation réductible implique l'existence de sous-espaces stables.

Remarque : les systèmes physiques élémentaires sont associés à des représentations irréductibles. Par exemple, pour le groupe des rotations, un atome ou une particule de spin j est un système élémentaire.

Exemple : considérons l'application $f(\vec{r}) \xrightarrow{T_R} (T_R f)(\vec{r}) = f(R^{-1}\vec{r})$
Vérifions qu'il s'agit bien d'une représentation de $SO(3)$:

$$\begin{aligned} (T_R T_{R'} f)(\vec{r}) &= (T_R f)(R'^{-1}\vec{r}) = f(R^{-1}R'^{-1}\vec{r}) = f((R'R)^{-1}\vec{r}) \\ &\Rightarrow (T_R T_{R'} f)(\vec{r}) = (T_{RR'} f)(\vec{r}) \end{aligned}$$

Les $2l + 1$ fonctions $f_m(\vec{r}) = f(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ pour $-l \leq m \leq l$ forment un sous espace stable de T_R .

Lemme de Schur : Soient $\mathcal{D}(U)$ une représentation irréductible d'un groupe G sur un espace vectoriel V et A un opérateur de V . Si A commute avec tous les opérateurs $\mathcal{D}(U)$ alors A est un multiple de l'identité :

$$\boxed{\forall U \in G, [A, \mathcal{D}(U)] = 0 \Rightarrow \exists \lambda, A = \lambda \mathbb{I}} \quad (15)$$

2.5.2 Construction des représentations irréductibles de $SU(2)$

On considère l'algèbre de Lie de $SU(2)$: $[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k$

Définition : On appelle un **opérateur de Casimir** un opérateur quadratique en générateurs qui commute avec tous les générateurs.

Soit le Casimir $J = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$. On vérifie que : $[J^2, J_i] = 0$.
Or $\mathcal{D}(U) = \exp(-i\theta\vec{n} \cdot \vec{J})$ donc $\forall U, [J^2, \mathcal{D}(U)] = 0$. Donc d'après le lemme de Schur, il existe $j \in \mathbb{R}^+$ tel que :

$$\boxed{J^2 = j(j+1)\mathbb{I}}$$

On définit alors $J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$. On a les relations suivantes :

$$J_+ J_- = J^2 - J_3(J_3 - 1) \text{ et } J_- J_+ = J^2 - J_3(J_3 + 1)$$

La représentation choisie étant unitaire, les J_i sont hermitiens. On peut donc diagonaliser J_3 :

$$J_3 |jm\rangle = m |jm\rangle \text{ avec } m \in \mathbb{R}$$

Donc on peut écrire :

$$J_+ J_- |jm\rangle = [j(j+1) - m(m-1)] |jm\rangle = (j+m)(j-m+1) |jm\rangle$$

Or les $|jm\rangle$ sont orthonormés, donc :

$$\langle jm | J_+ J_- |jm\rangle = (j+m)(j-m)$$

Or $J_+^\dagger = J_-$, on peut donc écrire la relation précédente sous la forme :

$$\|J_- |jm\rangle\|^2 = (j+m)(j-m+1) \geq 0$$

Et de même avec J_+ :

$$\|J_+ |jm\rangle\|^2 = (j-m)(j+m+1) \geq 0$$

Ce qui donne finalement :

$$\boxed{-j \leq m \leq j}$$

De plus, $J_3 J_+ = J_+(J_3 + 1)$ et $J_3 J_- = J_-(J_3 + 1)$ donc :

$$J_3 J_+ |jm\rangle = (m+1) J_+ |jm\rangle$$

Donc $J_+|jm\rangle$ est un état propre de J_3 de valeur propre $m + 1$.

$$J_+|jm\rangle \propto |j, m + 1\rangle$$

De même avec J_- on en déduit :

$$J_-|jm\rangle \propto |j, m - 1\rangle$$

Donc en appliquant p fois J_+ :

$$J_+^p|jm\rangle \propto |j, m + p\rangle$$

Or $m + p$ est borné, donc il existe m_S tel que $J_+|jm_S\rangle = 0$. Or on a vu que :

$$\|J_+|jm_S\rangle\|^2 = (j - m_S)(j + m_S + 1) = 0$$

Donc $m_S = j$ et de même avec J_- :

$$J_+|jj\rangle = 0 \text{ et } J_-|j, -j\rangle = 0$$

Donc il existe p tel que $J_+^p|j, -j\rangle \propto |j, -j + p\rangle = |jj\rangle$. On a alors $2p \in \mathbb{N}$. Donc p est entier ou demi-entier.

Résumé : Toute représentation unitaire irréductible de dimension finie du groupe $SU(2)$ est caractérisée par un nombre j tel que $2j \in \mathbb{N}$.

- La représentation est de dimension $2j + 1$.
- $J^2 = j(j + 1)\mathbb{I}$
- Il existe une base $\{|jm\rangle\}$ telle que :

$$\langle jm|jm'\rangle = \delta_{mm'} ; J_3|jm\rangle = m|jm\rangle$$

$$J_+|jm\rangle = \sqrt{j(j + 1) - m(m + 1)}|j, m + 1\rangle$$

$$J_-|jm\rangle = \sqrt{j(j + 1) - m(m - 1)}|j, m - 1\rangle$$

2.6 Représentations de $SU(2)/SO(3)$

Nous avons vu qu'il existe un homomorphisme de $SU(2)$ sur $SO(3)$: $\pm U \mapsto R(U)$

- Les représentations de $SU(2)$ telles que $\mathcal{D}(U) = \mathcal{D}(-U)$ sont des représentations vraies de $SO(3)$.
- Celles pour lesquelles $\mathcal{D}(U) = -\mathcal{D}(-U)$ sont appelées représentations projectives.

$$-\mathbb{I} \in SU(2)$$

$$U = \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{I} - i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin \frac{\theta}{2} \in SU(2)$$

$$U(2\pi) = -\mathbb{I} \text{ et } \forall V \in SU(2), [-\mathbb{I}, V] = 0$$

$$\Rightarrow \forall V, [\mathcal{D}(-\mathbb{I}), \mathcal{D}(V)] = 0$$

Donc d'après le lemme de Schur, si \mathcal{D} est irréductible :

$$\exists \lambda, \mathcal{D}(-\mathbb{I}) = \lambda \mathbb{I}_R$$

Or la relation de groupe impose :

$$\mathcal{D}(-\mathbb{I})\mathcal{D}(-\mathbb{I}) = \mathcal{D}(\mathbb{I}) = \mathbb{I}_R$$

Donc $\lambda^2 = 1$. On en déduit finalement que $\mathcal{D}(-\mathbb{I}) = \pm \mathbb{I}_R$.

- Si $\mathcal{D}(-\mathbb{I}) = \mathbb{I}_R$, $\mathcal{D}(-U) = \mathcal{D}(-\mathbb{I}U) = \mathcal{D}(U)$

On peut montrer que dans ce cas, $j \in \mathbb{N}$.

- Si $\mathcal{D}(-\mathbb{I}) = -\mathbb{I}_R$, $\mathcal{D}(-U) = -\mathcal{D}(U)$

Et alors j est demi-entier.

Définition : On appelle **matrices de rotation** les éléments de matrice de $\mathcal{D}(U)$ dans la base des $|jm\rangle$.

$$\langle jm|\mathcal{D}(U)|jm'\rangle = D_{mm'}^j(U)$$

Cela forme une matrice de taille $(2j + 1)(2j + 1)$.

On repère une rotation par les angles d'Euler α, β, γ comme sur la figure 5.
On a donc $\mathcal{D}(U) = \exp(-i\alpha J_3) \exp(-i\beta J_2) \exp(-i\gamma J_3)$.
Alors que avec $(\theta, \vec{n}) : \mathcal{D}(U) = \exp(-i\theta \vec{J} \cdot \vec{n})$.

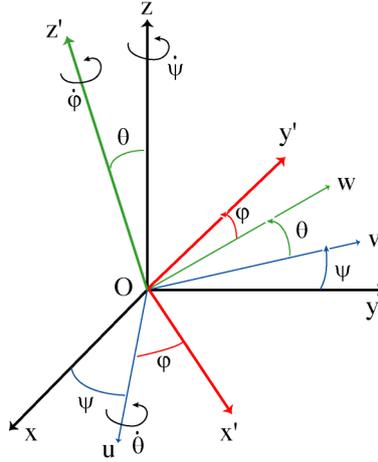


FIGURE 5 – Angles d'Euler

On peut donc calculer les matrices de rotation :

$$\begin{aligned} D_{mm'}^j &= \langle jm | \exp(-i\alpha J_3) \exp(-i\beta J_2) \exp(-i\gamma J_3) | jm' \rangle \\ &= e^{-im\alpha} \langle jm | e^{-i\beta J_2} | jm' \rangle e^{-im\gamma} \end{aligned}$$

Notons $d_{mm'}^j = \langle jm | e^{-i\beta J_2} | jm' \rangle$ les éléments de matrice réduits.

Exemple : Cas $j = \frac{1}{2}$:

$$d_{mm'}^{1/2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} & d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \\ d_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} & d_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Cas $j = 1$:

$$d_{mm'}^1 = \begin{array}{c|ccc} m \backslash m' & 1 & 0 & -1 \\ \hline 1 & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ 0 & \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \cos \beta & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} \\ -1 & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{array}$$

2.7 Transformation des états et des observables sous une rotation

Avec les notations précédentes, on a :

$$\mathcal{D}(U)|jm\rangle = \sum_{m'} D_{mm'}^j |jm'\rangle$$

On considère une rotation R qui agit sur les états et les observables de la façon suivante :

$$|\psi\rangle \mapsto |^R\psi\rangle = \mathcal{D}(U)|\psi\rangle$$

$$A \mapsto ^R A = \mathcal{D}(U)A\mathcal{D}(U)^{-1}$$

On a donc $\langle ^R\psi | ^R A | ^R\psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$.

Soit $U \in SU(2)$, $UV(\epsilon, \vec{n})U^{-1} = V(\epsilon, \vec{n}')$ avec $\vec{n}' = R(U)\vec{n}$

Donc en représentation :

$$\mathcal{D}(U)\mathcal{D}[V(\epsilon, \vec{n})]\mathcal{D}(U^{-1}) = \mathcal{D}[V(\epsilon, \vec{n}')]]$$

Pour une rotation infinitésimale d'angle $\epsilon \ll 1$:

$$\mathcal{D}[V(\epsilon, \vec{n})] = \mathbb{1} - i\epsilon \vec{J} \cdot \vec{n}$$

où les J_i sont les générateurs de la représentation. On en déduit alors :

$$\mathbb{1} - i\epsilon \mathcal{D}(U) \vec{J} \cdot \vec{n} \mathcal{D}(U)^{-1} = \mathbb{1} - i\epsilon \vec{J} \cdot \vec{n}'$$

$$\Rightarrow \vec{J} \cdot \vec{n}' = \mathcal{D}(U) \vec{J} \cdot \vec{n} \mathcal{D}(U)^{-1}$$

Cas particulier : $\vec{n} = \vec{k}$: $\mathcal{D}(U) J_z \mathcal{D}(U)^{-1} = J_z$
 Vérifions que $\mathcal{D}(U)|jm\rangle$ décrit un état tourné par la rotation $R(U)$, c'est-à-dire un état propre de J_z :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(U) J_z \mathcal{D}(U)^{-1} \mathcal{D}(U)|jm\rangle &= J_z \mathcal{D}(U)|jm\rangle \\ \Rightarrow J_z [\mathcal{D}(U)|jm\rangle] &= m [\mathcal{D}(U)|jm\rangle] \end{aligned}$$

Exemple : $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ est un état propre du spin pointant selon \vec{k} . $\mathcal{D}(U) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ est un état propre de spin selon $\vec{n} = R(U)\vec{k}$ de valeur propre $+1$. Notons (r, θ, ϕ) les coordonnées sphériques de \vec{n} . On peut montrer que :

$$\mathcal{D}(U) = U = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$\text{Donc } \mathcal{D}(U) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Remarque : Observation expérimentale :
 Considérons une rotation $R : H \mapsto {}^R H = \mathcal{D}(U) H \mathcal{D}(U)^{-1}$.
 On suppose qu'il s'agit d'une symétrie au sens fort : ${}^R H = H$, c'est à dire :

$$\forall U, [\mathcal{D}(U), H] = 0$$

Donc $[H, \vec{J}] = 0$ où les J_i sont les générateurs.
 On peut donc écrire les états propres de H , J^2 et J_z sous la forme $|njm\rangle$ tels que :

$$\begin{cases} H|njm\rangle = E_n(j, m)|njm\rangle \\ J^2|njm\rangle = j(j+1)|njm\rangle \\ J_z|njm\rangle = m|njm\rangle \end{cases}$$

Montrons que E_n est indépendant de m :

$$\begin{aligned} [H, J_+] = 0 &\Rightarrow \langle njm'| [H, J_+] |njm\rangle = 0 \\ \langle njm'| H J_+ |njm\rangle &= \langle njm'| J_+ H |njm\rangle \\ \sqrt{\frac{(j-m)(j+m+1)}{2}} \langle njm'| H |n, j, m+1\rangle &= \sqrt{\frac{(j+m')(j-m'+1)}{2}} \langle n, j, m'-1 | H |njm\rangle \end{aligned}$$

En prenant $m' = m + 1$, on en déduit : $E_n(j, m+1) = E_n(j, m)$.
 On peut donc observer des dégénérescences dans le spectre lorsqu'il y a des symétries.

Exemple : Atome d'hydrogène dont l'électron est décrit par le hamiltonien $H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

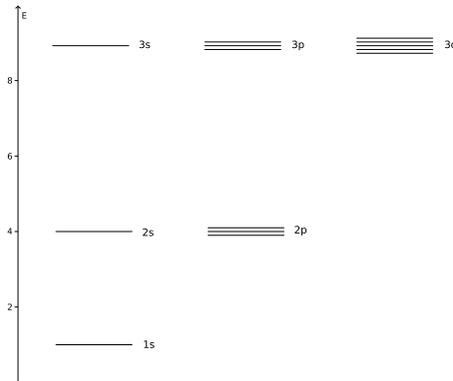


FIGURE 6 – Niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène

La dégénérescence des niveaux p et d montre qu'il existe une symétrie de type $SO(3)$ car l'énergie de ces niveaux est indépendante de m . Mais on voit de plus que l'énergie est indépendante de l donc il y a un groupe de symétries plus grand. C'est le groupe $SO(4)$.

Ceci est vrai même en mécanique classique, il y a une constante du mouvement autre que le moment cinétique, c'est le vecteur de Lenz : $\vec{M} = \vec{p} \wedge \vec{L} - mk \frac{\vec{r}}{r}$ où k décrit la force : $\vec{F} = -\frac{k}{r^2} \frac{\vec{r}}{r}$.

2.7.1 Rotation agissant sur des états de moment angulaire donné

On considère l'hamiltonien d'une particule plongée dans un potentiel central $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$. L'invariance par rotation implique $[H, L_i] = 0$. Les L_i forment l'algèbre de Lie de $SO(3)$. On écrit les états propres communs de H , L^2 et L_z sous la forme :

$$H|Elm\rangle = E|Elm\rangle \quad L^2|Elm\rangle = l(l+1)|Elm\rangle \quad L_z|Elm\rangle = m|Elm\rangle$$

A énergie fixée, on a $2l+1$ états dégénérés. Pour une fonction d'onde, l'action d'une rotation R s'écrit :

$$\psi(\vec{r}) \mapsto {}^R\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}) \text{ ou aussi } \langle \vec{r} | {}^R\psi \rangle = \langle R^{-1}\vec{r} | \psi \rangle$$

Or nous avons vu que $|{}^R\psi\rangle = \mathcal{D}(U)|\psi\rangle$ donc

$$\langle \vec{r} | \mathcal{D}(U) | \psi \rangle = \langle R^{-1}\vec{r} | \psi \rangle$$

En écrivant cette relation sur des états $|Elm\rangle$ on obtient :

$$\langle R^{-1}\vec{r} | lm \rangle = \langle \vec{r} | \mathcal{D}(U) | lm \rangle = \langle \vec{r} | \sum_{m'} D_{m'm}^l(U) | lm' \rangle$$

$$\psi_{lm}(R^{-1}\vec{r}) = \sum_{m'} D_{m'm}^l(U) \psi_{lm'}(\vec{r})$$

Or les fonctions d'onde peuvent s'écrire sous la forme :

$$\psi_{Elm}(\vec{r}) = f_{Elm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = f_E(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

On obtient donc la relation donnant la transformation des harmoniques sphériques :

$$\boxed{\sum_{m'} D_{m'm}^l(U) Y_{lm'}(\vec{n}) = Y_{lm}(R^{-1}\vec{n})} \quad (16)$$

2.7.2 Fonctions d'onde spinorielles

On s'intéresse maintenant à un système possédant un spin 1/2 en plus. On considère les fonctions propres de H , \vec{J}^2 et J_z avec $\vec{J} = \vec{L} + \frac{\vec{\sigma}}{2}$.

$$|{}^R\psi\rangle = \exp(-i\theta \vec{n} \cdot \vec{J}) |\psi\rangle = \exp\left(-i\theta \left(\vec{L} + \frac{\vec{\sigma}}{2}\right) \cdot \vec{n}\right) |\psi\rangle$$

\vec{L} agit sur des fonctions de $L^2(\mathbb{R}^3)$ et $\vec{\sigma}$ agit sur des fonctions de spin, vecteurs de \mathbb{C}^2 . On écrit alors :

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma'} \left|\frac{1}{2}\sigma'\right\rangle |\psi_{\sigma'}\rangle$$

$$\langle \vec{r} | \frac{1}{2}\sigma | \psi \rangle = \sum_{\sigma'} \langle \frac{1}{2}\sigma | \frac{1}{2}\sigma' \rangle \langle \vec{r} | \psi_{\sigma'} \rangle$$

On obtient finalement :

$$\langle \vec{r} | \frac{1}{2}\sigma | \psi \rangle = \psi_{\sigma}(\vec{r})$$

Nous pouvons alors calculer :

$$\langle \vec{r} | \frac{1}{2}\sigma' | {}^R\psi \rangle = \langle \vec{r} | \frac{1}{2}\sigma' | \exp\left(-i\theta \left(\vec{L} + \frac{\vec{\sigma}}{2}\right) \cdot \vec{n}\right) |\psi\rangle$$

\vec{L} et $\vec{\sigma}$ agissent dans des espaces différents donc commutent, et on peut écrire $|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \left|\frac{1}{2}\sigma\right\rangle |\psi_{\sigma}\rangle$ d'où :

$$\langle \vec{r} | \frac{1}{2}\sigma' | {}^R\psi \rangle = \sum_{\sigma} \langle \frac{1}{2}\sigma' | \frac{1}{2}\sigma \rangle \exp\left(-i\theta \frac{\vec{\sigma}}{2} \cdot \vec{n}\right) \left|\frac{1}{2}\sigma\right\rangle \langle \vec{r} | \exp(-i\theta \vec{L} \cdot \vec{n}) |\psi_{\sigma}\rangle$$

On obtient finalement la relation :

$$\boxed{{}^R\psi_{\sigma'}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} D_{\sigma'\sigma}^{1/2}(U) \psi_{\sigma}(R^{-1}\vec{r})} \quad (17)$$

Pour un spin j quelconque, nous pouvons généraliser cette expression à des spineurs à $2j+1$ composantes :

$$\boxed{{}^R\psi_{j\sigma'}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} D_{\sigma'\sigma}^j(U)\psi_{j\sigma}(R^{-1}\vec{r})} \quad (18)$$

Exemples :

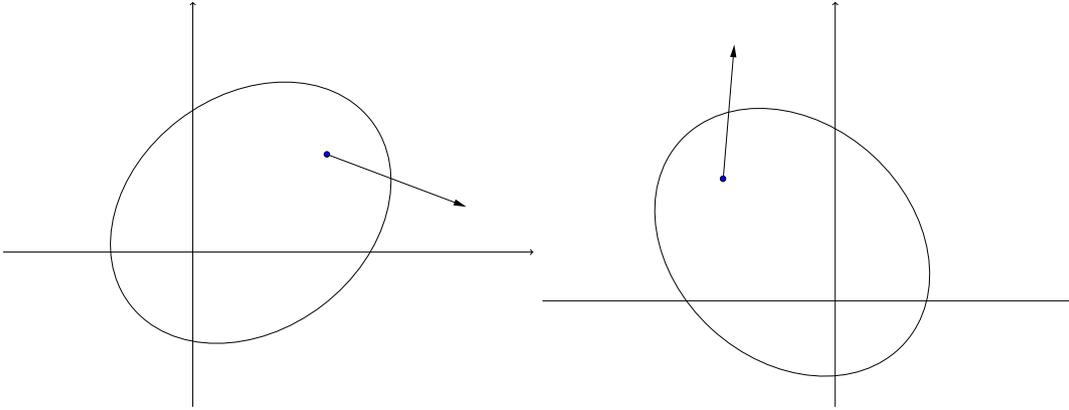
- $j = 0$: on retrouve la transformation d'une grandeur scalaire par rotation, par exemple une densité de charges : ${}^R\rho(\vec{r}) = \rho(R^{-1}\vec{r})$
- $j = 1$: on considère une particule de spin 1 et on note les états ψ_{10} , ψ_{11} et ψ_{1-1} .
On introduit V_x , V_y et V_z définis par :

$$\psi_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y) \quad \psi_{10} = V_z \quad \psi_{1-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y)$$

On peut donc écrire la relation de transformation des V_i :

$$V_i^R(\vec{r}) = R_{ij}V_j(R^{-1}\vec{r})$$

Ce qui décrit la rotation d'un champ de vecteur de \mathbb{R}^3 : $\vec{r}' = R\vec{r}$ et rotation du vecteur au point \vec{r} .



2.7.3 Illustration : désintégration de particules

Considérons la désintégration d'un objet de spin s en deux objets de spin 0. Par exemple, considérons la désintégration d'un méson ρ^0 de spin 2 en deux pions :

$$\rho^0 \rightarrow \pi^+\pi^-$$

On regarde la distribution angulaire des particules dans l'état final. L'état initial est polarisé dans une direction connue, par exemple selon Oz : $|jm\rangle$

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

On mesure le nombre de particules émises par unité de temps et d'angle solide : $\frac{dN}{d\Omega dt}$

On note \vec{p}_1 et \vec{p}_2 les quantités de mouvement des particules dans l'état final. La conservation de l'impulsion implique alors, dans le référentiel de centre de masse.

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = 0$$

Notons alors $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2 = \lambda\vec{n}$ où \vec{n} est un vecteur unitaire.

En mécanique classique, l'état de moment cinétique dans l'état final est donné par :

$$\vec{L} = \vec{r}_1 \wedge \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \wedge \vec{p}_2 = \lambda(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \wedge \vec{n}$$

Donc $\vec{L} \cdot \vec{n} = 0$

L'état final est décrit par $|f\rangle$:

$$\begin{cases} \vec{L}^2|f\rangle = l(l+1)|f\rangle \\ \vec{L} \cdot \vec{n}|f\rangle = 0 \end{cases}$$

La conservation du moment cinétique implique : $\vec{J} = \vec{L}$

Donc $|\pi^+\pi^-\rangle = |j0\rangle_{\vec{n}}$

L'amplitude de désintégration est donnée par $\langle \pi^+\pi^- | H | \rho^0 \rangle$

Si l'on s'intéresse seulement à la dépendance angulaire, cette expression devient : $\langle j0|\vec{n}H|jm\rangle$
 Or nous avons établi que :

$$|j0\rangle_{\vec{n}} = \sum_{m'} D_{m'0}^j(U) |lm'\rangle_z$$

Avec U une rotation telle que $U\vec{k} = \vec{n}$. On peut aussi écrire en bra :

$$\langle j0|\vec{n} = \sum_{m'} D_{m'0}^{j*}(U) \langle jm'|_z$$

On peut alors calculer :

$$\langle j0|\vec{n}H|jm\rangle = \sum_{m'} D_{m'0}^{j*}(U) \langle jm'|H|jm\rangle$$

On en déduit alors :

$$\langle \pi^+ \pi^- | H | \rho^0 \rangle \propto D_{m0}^j(U)$$

$$\boxed{\frac{d^2 N}{d\Omega dt} \propto |D_{m0}^j|^2}$$

2.8 Groupes dynamiques

Il existe des potentiels particuliers pour lesquels une dégénérescence supplémentaire apparaît. On considère une particule plongée dans un potentiel V central :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) ; [H, \vec{L}] = 0$$

Les L_i forment l'algèbre de Lie de $SO(3)$: $[L_i, L_j] = \epsilon_{ijk} L_k$ Nous avons vu que dans ce cas les états $\{|l m\rangle\}_{-l \leq m \leq l}$ sont dégénérés.

Pour certaines classes de potentiels, des dégénérescences supplémentaires apparaissent. C'est par exemple le cas pour des potentiels électrostatiques ou harmoniques.

Cas d'un potentiel en $\frac{1}{r}$:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{k}{r}$$

Le moment cinétique est une constante du mouvement, mais il doit en exister une autre. Montrons alors que le vecteur de Runge-Lens \vec{M} est une constante du mouvement.

$$\vec{M} = \vec{v} \wedge \vec{L} - k \frac{\vec{r}}{r}$$

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \frac{d\vec{v}}{dt} \wedge \vec{L} + \vec{v} \wedge \frac{d\vec{L}}{dt} - k \frac{\vec{v}}{r} + k \frac{\vec{r}}{r^2} \frac{dr}{dt}$$

Or le moment cinétique est conservé, donc :

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \frac{d\vec{v}}{dt} \wedge (\vec{r} \wedge m\vec{v}) - k \frac{\vec{v}}{r} + k \frac{\vec{r}}{r^2} \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{v}$$

Or on sait que $m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla}(-\frac{k}{r}) = -\frac{k\vec{r}}{r^3}$

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\frac{k\vec{r}}{r^3} \wedge (\vec{r} \wedge \vec{v}) - \frac{k\vec{v}}{r} + k \frac{\vec{r}}{r^3} (\vec{r} \cdot \vec{v})$$

On peut alors développer le double produit vectoriel :

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -k \frac{\vec{r} \cdot \vec{v}}{r^3} \vec{r} + \frac{k}{r} \vec{v} - \frac{k\vec{v}}{r} + k \frac{\vec{r} \cdot \vec{v}}{r^3} \vec{r}$$

$$\boxed{\frac{d\vec{M}}{dt} = 0}$$

Ce résultat permet d'intégrer algébriquement les équations du mouvement : \vec{M} est dans le plan de la trajectoire. On appelle θ l'angle entre \vec{r} et \vec{M} .

$$\vec{r} \cdot \vec{M} = \vec{r} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{L}) - kr = \vec{L} \cdot (\vec{r} \wedge \vec{v}) - kr = \frac{L^2}{m} - kr$$

Or $\vec{r} \cdot \vec{M} = Mr \cos \theta$ donc :

$$r(k + M \cos \theta) = \frac{L^2}{m}$$

$$r = \frac{L^2/Mk}{1 + \frac{M}{k} \cos \theta}$$

En mécanique analytique :

$$\{q_i, q_j\} = 0 ; \{p_i, p_j\} = 0 ; \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \text{ et } \{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L_k$$

On a de plus : $\{L_i, M_j\} = \epsilon_{ijk} M_k$ ainsi que $\{H, L_i\} = 0$ et $\{H, M_i\} = 0$

$$\{M_i, M_j\} = -\frac{2H}{m} \epsilon_{ijk} L_k$$

Pour des états liés, ie d'énergie négative, on définit :

$$A_i = \frac{1}{2} \left(L_i + \sqrt{\frac{-m}{2E}} M_i \right) \text{ et } B_i = \frac{1}{2} \left(L_i - \sqrt{\frac{-m}{2E}} M_i \right)$$

On a alors $\{A_i, B_j\} = 0$, $\{A_i, A_j\} = \epsilon_{ijk} A_k$ et $\{B_i, B_j\} = \epsilon_{ijk} B_k$.

On a donc deux algèbres de Lie de $SU(2)$ indépendantes. Le problème a une invariance $SU(2) \times SU(2) = SO(4)$.

En mécanique quantique :

On définit l'opérateur hermitien

$$\vec{M} = \frac{1}{2m} (\vec{p} \wedge \vec{L} - \vec{L} \wedge \vec{p}) - \frac{k\vec{r}}{r}$$

On retrouve les mêmes relations qu'en mécanique classique avec cette fois des commutateurs. E correspond à une valeur propre de H négative.

On peut donc former les opérateurs \vec{A} et \vec{B} comme précédemment. Chacun donne une algèbre de Lie de $SU(2)$.

Considérons \vec{A}^2 un casimir, $\vec{A}^2 = j_1(j_1 + 1)\mathbb{I}$

De même $\vec{B}^2 = j_2(j_2 + 1)\mathbb{I}$

La représentation est caractérisée par (j_1, j_2) .

Or $\vec{M} \cdot \vec{L} = 0$ donc $(\vec{A} - \vec{B})(\vec{A} + \vec{B}) = 0$ ce qui donne $\vec{A}^2 = \vec{B}^2$. On en déduit alors que $j_1 = j_2 = j$

On a vu en classique que $\vec{M}^2 - k^2 = \frac{2H}{m} \vec{L}^2$. Ici :

$$\vec{M}^2 - k^2 = \frac{2H}{m} (\vec{L}^2 + 1)$$

On a également les relations :

$$A_i - B_i = \sqrt{\frac{-m}{2E}} M_i \text{ et } A_i + B_i = L_i$$

$$-\frac{2E}{m} \sum_i (A_i - B_i)^2 - k^2 = \frac{2E}{m} \left[\sum_i (A_i + B_i)^2 + 1 \right]$$

$$\Rightarrow -\frac{4E}{m} (\vec{A}^2 + \vec{B}^2) - \frac{2E}{m} = k^2$$

Or $\vec{A}^2 = \vec{B}^2 = j(j + 1)\mathbb{I}$ donc :

$$-\frac{2E}{m} [4j(j + 1) + 1] = k^2$$

$$\Rightarrow E = \frac{mk^2}{2(2j + 1)^2}$$

Notons $n = 2j + 1$, la représentation est de dimension n^2 . On a donc obtenu les énergies et les dégénérescences associées.

3 Groupe de Lorentz

3.1 Contexte physique

En mécanique classique, les référentiels inertiels sont équivalents, ce qui se traduit par l'existence d'un groupe, appelé groupe de Galilée, dont l'action des éléments laisse le problème invariant. Mais cette invariance par translation rectiligne uniforme n'est plus valable en électromagnétisme à cause du terme en $\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ dans l'équation de Maxwell-Ampère.

Dans le vide, les équations de Maxwell donnent des ondes lumineuses qui se propagent à la vitesse $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$ dans tous les référentiels inertiels, ce qui viole la loi d'additivité des vitesses. Un nouveau cadre cinématique est alors nécessaire pour décrire correctement ces phénomènes.

On définit un **événement** comme un phénomène localisé dans l'espace-temps.

Il est donc nécessaire de posséder des outils de mesure de distance et aussi de synchroniser des horloges. Ce qui est effectué par des envois de signaux lumineux à partir d'un point A repéré par (t_A, \vec{x}_A) . Ces signaux sont reçus en un point B repéré par (t_B, \vec{x}_B) . On a alors la relation suivante :

$$t_B - t_A = \frac{|\vec{x}_B - \vec{x}_A|}{c}$$

On définit alors l'**intervalle** d'espace temps qui sépare A et B par :

$$s_{AB}^2 = c^2(t_B - t_A)^2 - (\vec{x}_B - \vec{x}_A)^2 \quad (19)$$

Cet intervalle est invariant par changement de référentiel inertielle pour tout couple d'événements A et B.

Pour deux événements causalement liés, l'intervalle est nul : $s_{AB}^2 = 0$

On considère un référentiel en translation à la vitesse v par rapport à un référentiel fixe.

- Dans le référentiel fixe, l'intervalle entre deux événements A et B s'écrit :

$$c^2(t_B - t_A)^2 - (x_B - x_A)^2 = c^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) (t_B - t_A)^2$$

- Dans le référentiel en mouvement, il s'écrit :

$$c^2(t'_B - t'_A)^2$$

L'égalité de ces intervalles nous permet d'exprimer le **temps propre** τ défini comme le temps mesuré par un observateur dans son référentiel :

$$\tau = t \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (20)$$

Si la vitesse n'est pas constante, on écrit :

$$d\tau = dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (21)$$

3.2 Groupe de Lorentz

On représente les événements par des quadri-vecteurs :

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) \quad (22)$$

La quadri-vitesse est définie par :

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} = \left(\frac{c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \frac{\vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right) \quad (23)$$

On a également la relation :

$$u^{02} - \vec{u}^2 = c^2 \quad (24)$$

On introduit alors la quadri-impulsion :

$$p^\mu = m u^\mu \quad (25)$$

On obtient alors :

$$\boxed{\frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2} \quad (26)$$

On munit l'espace-temps du produit scalaire :

$$(x, y) = x^0 y^0 - \vec{x} \cdot \vec{y} = {}^t x g y \quad (27)$$

Avec g le tenseur métrique :

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

Définition : Le groupe de Lorentz $O(1,3)$ est le groupe des transformations linéaires qui laissent invariant le produit scalaire :

$$\Lambda \in O(1,3) \Leftrightarrow \forall x, y, (\Lambda x, \Lambda y) = (x, y)$$

Ce que l'on peut réécrire sous la forme ${}^t x \Lambda g \Lambda y = {}^t x g y$ donc on en déduit :

$$\boxed{{}^t \Lambda g \Lambda = g} \quad (29)$$

Remarque : Pour $g = \mathbb{I}$, on retrouve le groupe des rotations.

Comme g est inversible, en prenant le déterminant de la relation précédente, on obtient

$$\boxed{(\det \Lambda)^2 = 1} \quad (30)$$

De plus, $g^2 = \mathbb{I}$, donc en multipliant la relation (29) par g , on en déduit que tout élément du groupe de Lorentz est inversible et

$$\boxed{\Lambda^{-1} = g^t \Lambda g} \quad (31)$$

Définition : On définit $SO(1,3)$ le sous-groupe du groupe de Lorentz formé des matrices de déterminant $+1$:

$$\boxed{\Lambda \in SO(1,3) \Leftrightarrow {}^t \Lambda g \Lambda = g \text{ et } \det \Lambda = 1}$$

3.2.1 Générateurs

Intéressons-nous aux transformations proches de l'unité : $\Lambda = \mathbb{I} + \omega$

La relation (29) implique alors $(1 + {}^t \omega)g(1 + \omega) = g$, ce qui donne au premier ordre :

$${}^t \omega = -g \omega g$$

La solution générale de cette équation est donnée par :

$$\boxed{\omega = \theta n_i L_i + \lambda m_i M_i} \quad (32)$$

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (33)$$

$$M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (34)$$

Cette solution dépend de 6 paramètres : θ , λ et deux vecteurs unitaires \vec{m} et \vec{n} .

Remarque : On pouvait attendre une telle dépendance car avec $g = \mathbb{I}$, on retrouve le groupe des rotations de \mathbb{R}^4 dont on a vu précédemment qu'il est engendré par des matrices antisymétriques, donc ayant 6 paramètres.

NB : $SO(3)$ est un sous-groupe de $SO(1,3)$ donc on retrouve les résultats déjà obtenu pour les matrices L_i , qui donnent pour $\Lambda = \mathbb{I} + \omega$ des rotations infinitésimales.

Les matrices M_i correspondent à des "boost" : transformation de Lorentz selon chaque direction de l'espace.

On peut réécrire le résultat précédent en terme de générateurs hermitiens et antihermitiens :

$$\boxed{\omega = -i\theta n_i J_i - i\lambda m_i K_i} \quad (35)$$

Avec $J_i = iL_i$ et $K_i = iM_i$.

3.2.2 Algèbre de Lie

L'algèbre de Lie du groupe de Lorentz est donnée par :

$$\begin{aligned} [J_i, J_j] &= i\epsilon_{ijk}J_k \\ [J_i, K_j] &= i\epsilon_{ijk}K_k \\ [K_i, K_j] &= -i\epsilon_{ijk}J_k \end{aligned}$$

Étudions l'action d'une transformation infinitésimale Λ donnée par

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & \lambda m_1 & \lambda m_2 & \lambda m_3 \\ \lambda m_1 & 1 & -\theta n_3 & \theta n_2 \\ \lambda m_2 & \theta n_3 & 1 & -\theta n_1 \\ \lambda m_3 & -\theta n_2 & \theta n_1 & 1 \end{pmatrix}$$

sur un vecteur $x \rightarrow x' = \Lambda x$. Notons $\vec{\beta} = -\lambda\vec{m}$. On a alors :

$$\begin{cases} x'^0 = x^0 - \vec{\beta} \cdot \vec{x} \\ \vec{x}' = \vec{x} - x^0 \vec{\beta} + \theta \vec{n} \wedge \vec{x} \end{cases}$$

On peut montrer que ces transformations infinitésimales sont associées aux transformations de Lorentz et aux rotation :

$$\begin{cases} x'^0 = \gamma(x^0 - \vec{\beta} \cdot \vec{x}) \\ \vec{x}' = \vec{x} - \gamma x^0 \vec{\beta} + \frac{\gamma-1}{\gamma} \vec{\beta}(\vec{\beta} \cdot \vec{x}) \end{cases}$$

$$\vec{x}' = \vec{n}(\vec{x} \cdot \vec{n}) + \cos \theta [\vec{x} - \vec{n}(\vec{x} \cdot \vec{n})] + \sin \theta \vec{n} \wedge \vec{x}$$

3.2.3 Représentations de l'algèbre

On introduit :

$$\begin{cases} J_i^+ = \frac{1}{2}(J_i + iK_i) \\ J_i^- = \frac{1}{2}(J_i - iK_i) \end{cases} \quad (36)$$

Ce qui nous donne alors les relations de commutation suivantes :

$$\begin{aligned} [J_i^+, J_j^+] &= i\epsilon_{ijk}J_k^+ \\ [J_i^-, J_j^-] &= i\epsilon_{ijk}J_k^- \\ [J_i^+, J_j^-] &= 0 \end{aligned}$$

On obtient donc deux algèbres indépendantes qui sont chacune étiquetées par un demi-entier. On a donc des représentations non unitaires de $SU(2) \times SU(2)$ données par (j, j') . Ces représentations ne sont pas unitaires car les J_i^\pm ne sont pas hermitiens.

Exemples :

1. $j = \frac{1}{2}$ et $j' = 0$: représentation $(1/2, 0)$ de dimension 2 avec $J_i^+ = \frac{1}{2}\sigma_i$ et $J_i^- = 0$.

$$J_i = \frac{\sigma_i}{2} \text{ et } K_i = -i\frac{\sigma_i}{2}$$

Les éléments du groupe sont représentés par :

$$U(\Lambda) = e^{-i\theta \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{n}}{2} - \lambda \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{m}}{2}}$$

Ces éléments agissent sur des spineurs à deux composantes qui peuvent représenter des particules de spin 1/2 de masse nulle, par exemple les neutrinos.

2. $j = \frac{1}{2}$ et $j' = \frac{1}{2}$: représentation de Dirac :

$$\vec{J} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \text{ et } \vec{K} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} -\vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

Cette représentation agit sur des spineurs de Dirac à 4 composantes.

4 Mécanique quantique relativiste

Nous allons tenter d'obtenir une équation relativiste qui régit l'évolution d'objets quantiques. Pour cela nous allons suivre la démarche historique de Klein et Gordon puis de Dirac.

4.1 Équation de Klein-Gordon

Pour obtenir l'équation de Schrödinger, on part de la relation de dispersion $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ et on applique le principe de correspondance :

$$\begin{cases} E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \end{cases}$$

Pour obtenir une équation relativiste, on part de la relation :

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

et l'on applique le principe de correspondance :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = mc^2 \sqrt{1 - \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \Delta} \psi$$

On obtient une équation non locale car elle fait intervenir des puissances du laplacien et il n'y a pas de symétrie espace-temps comme attendu.

Partons donc de la relation quadratique :

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

On obtient alors l'équation de Klein-Gordon :

$$\boxed{\square \psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0} \quad (37)$$

L'opérateur d'alembertien qui apparaît conserve la symétrie relativiste et est invariant sous la transformation de Lorentz.

Cherchons des solutions en onde plane : $\psi = e^{\frac{i p x}{\hbar}}$

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0 \Rightarrow -p_\mu p^\mu \psi + m^2 c^2 \psi = 0$$

Donc on en déduit :

$$p^2 = p^{02} - \vec{p}^2 = m^2 c^2 \Rightarrow E = \pm \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

On obtient alors des solutions d'énergie positive avec la bonne relation de dispersion mais aussi des solutions d'énergie négative. Tentons de retrouver une interprétation probabiliste des solutions comme dans le cas non relativiste. Pour cela nous allons faire apparaître une équation de continuité :

Multiplions par ψ^* l'équation de Klein-Gordon et faisons la différence avec son conjugué :

$$\begin{aligned} \psi^* \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi \right] &= 0 \text{ et } \psi \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} - \Delta \psi^* + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi^* \right] = 0 \\ \Rightarrow \frac{1}{c^2} \left[\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} \right] - [\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*] &= 0 \end{aligned}$$

On peut alors faire apparaître une dérivée temporelle et une divergence :

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(-\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) + \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = 0$$

Notons alors :

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \\ \vec{j} &= \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \end{aligned}$$

On obtient alors une équation de continuité :

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0} \quad (38)$$

Cependant ρ n'est plus positif comme dans le cas non relativiste et ne peut donc plus être interprété comme une densité de probabilité.

De plus, l'équation de Klein-Gordon est une équation du second ordre alors que celle de Schrödinger est du premier ordre et nécessite donc des conditions initiales supplémentaires.

4.2 Équation de Dirac

Nous allons suivre l'approche de Dirac qui consiste à rechercher une équation du premier ordre dont le carré redonne l'équation de Klein-Gordon. Ce qui revient à rechercher à écrire une forme quadratique comme le carré d'une forme linéaire :

$$c^2t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = (\beta ct + \alpha^1 x + \alpha^2 y + \alpha^3 z)^2$$

Il est donc nécessaire que les coefficients α et β anticommulent. Nous allons les chercher dans un espace de matrices. Postulons une équation de la forme :

$$\boxed{-\frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_{k=1}^3 \alpha^k \frac{\partial \psi}{\partial x^k} + \frac{imc}{\hbar} \beta \psi} \quad (39)$$

Avec α et β matrices de taille $N \times N$. Itérons cette équation et imposons de retrouver l'équation de Klein-Gordon :

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left(\sum_{k=1}^3 \alpha^k \frac{\partial}{\partial x^k} + \frac{imc}{\hbar} \beta \right) \left(\sum_{l=1}^3 \alpha^l \frac{\partial}{\partial x^l} + \frac{imc}{\hbar} \beta \right) \psi$$

On obtient alors les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = 2\delta^{kl} \mathbb{I} \\ \beta \alpha^k + \alpha^k \beta = 0 \\ \beta^2 = \alpha^k \alpha^k = \mathbb{I} \end{cases} \quad (40)$$

Écrivons alors l'équation (39) sous forme Hamiltonienne :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi$$

Le hamiltonien s'écrit alors sous la forme :

$$\boxed{H = -i\hbar c \alpha^k \frac{\partial}{\partial x^k} + mc^2 \beta = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + mc^2 \beta} \quad (41)$$

On impose au hamiltonien d'être hermitien, donc on en déduit que les matrices α^k et β sont hermitiennes, donc diagonalisables, de valeurs propres réelles. Or les carrés de ces matrices donne l'identité, donc leurs valeurs propres sont ± 1 . De plus, la relation $\beta \alpha^k + \alpha^k \beta = 0$ donne en multipliant par β :

$$\alpha^k = -\beta \alpha^k \beta$$

Prenons la trace de cette relation :

$$Tr[\alpha^k] = -Tr[\beta \alpha^k \beta] = -Tr[\beta^2 \alpha^k] = -Tr[\alpha^k] \Rightarrow Tr[\alpha^k] = 0$$

Donc la somme des valeurs propres ± 1 de α^k doit être nulle, on en déduit que N doit être pair : $N = 2n$. Pour $n = 1$, les matrices de Pauli satisfont la condition sur les matrices α . La matrice β doit alors anticommuter avec les trois matrices de Pauli : c'est impossible. Il n'y a pas de solution.

Pour $n = 2$, on peut trouver la solution particulière suivante :

$$\boxed{\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}} \quad (42)$$

ψ est alors une fonction d'onde à quatre composantes :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Tentons de retrouver une équation de continuité comme dans le cas non relativiste. Notons alors :

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)$$

On a alors :

$$\psi^\dagger i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi^\dagger (-i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \psi + mc^2 \beta \psi)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi = (-i\hbar c \vec{\nabla} \psi^\dagger \vec{\alpha} - mc^2 \psi^\dagger \beta) \psi$$

En sommant ces équations, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) = -c \vec{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi)$$

On obtient donc une équation de continuité avec :

$$\begin{cases} \rho & = \psi^\dagger \psi > 0 \\ j^i & = c \psi^\dagger \alpha^i \psi \end{cases} \quad (43)$$

On retrouve bien une densité positive comme dans le cas non relativiste.

4.2.1 Limite non relativiste

On considère le couplage à un champ électromagnétique décrit par le potentiel scalaire Φ et le potentiel vecteur \vec{A} .

Dans le cas classique, le lagrangien d'une particule de masse m et de charge q s'écrit :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m v^2 - q\Phi - q\vec{v} \cdot \vec{A} \quad (44)$$

Pour en déduire le hamiltonien, il faut effectuer une transformation de Legendre :

$$\vec{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} - q\vec{A}$$

$$H = \vec{p} \cdot \vec{v} - \mathcal{L} = \frac{1}{2} m v^2 + q\Phi = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\Phi$$

Dans ce cas quantique, on a passé de même au cas sans champ au cas avec champ par les relations :

$$\boxed{\begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \\ \vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A} \end{array}} \quad (45)$$

Notons $A = (A^0, \vec{A}) = (\Phi/c, \vec{A})$ et $\vec{\Pi} = \vec{p} - q\vec{A}$. L'équation de Dirac donne :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - qcA^0 \psi &= [(-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A})c\vec{\alpha} + \beta mc^2] \psi \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= [(\vec{p} - q\vec{A})c\vec{\alpha} + \beta mc^2 + qcA^0 \mathbb{I}] \psi \end{aligned}$$

On découple alors ψ en deux vecteurs à deux composantes : $\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$ pour correspondre à la structure en blocs des matrices α et β . On obtient alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (mc^2 + qcA^0) \mathbb{I} & c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} & (-mc^2 + qcA^0) \mathbb{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

On se place dans le cas où le champ électromagnétique est indépendant du temps. On cherche alors des solutions sous la forme :

$$\begin{pmatrix} \phi(\vec{r}) \\ \chi(\vec{r}) \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar}$$

On obtient alors :

$$E \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (mc^2 + qcA^0) \mathbb{I} & c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} & (-mc^2 + qcA^0) \mathbb{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

Ce que l'on peut réécrire sous forme d'un système d'équations :

$$\begin{cases} E\phi = (mc^2 + qcA^0)\phi + c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}\chi \\ E\chi = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}\phi + (qcA^0 - mc^2)\chi \end{cases}$$

On s'intéresse à la limite non relativiste où les énergies sont proches de l'énergie de masse. On écrit alors $E = mc^2 + \epsilon$. Dans la deuxième équation, on néglige ϵ et qcA^0 devant l'énergie de masse et on obtient :

$$(2mc^2 - qcA^0)\chi \approx c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}\phi \Rightarrow \chi \approx \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}}{2mc^2} \phi$$

La première équation donne :

$$\epsilon\phi = qcA^0\phi + c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}\chi$$

En combinant les deux dernières équations, on obtient une équation sur ϕ :

$$\boxed{\epsilon\phi = qcA^0\phi + \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{2m}\phi} \quad (46)$$

Et dans le cas où il n'y a qu'un champ magnétique :

$$\epsilon\phi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{2m}\phi$$

On rappelle que les matrices de Pauli vérifient :

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbb{I} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (47)$$

On en déduit alors :

$$\begin{aligned} (\sigma_i a_i)(\sigma_j b_j) &= (a_i b_j)\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}(a_i b_j)\sigma_k \\ \Rightarrow (\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) &= \vec{a} \cdot \vec{b}\mathbb{I} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b}) \end{aligned}$$

Si \vec{a} n'est pas un opérateur, on a donc $(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})^2 = a^2\mathbb{I}$. Mais dans notre cas, $\vec{\Pi}$ est un opérateur et donc cela ne s'applique pas. On doit donc calculer :

$$\begin{aligned} \epsilon_{ijk}\Pi_i\Pi_j &= \epsilon_{ijk}(p_i - qA_i)(p_j - qA_j) \\ &= -q\epsilon_{ijk}(p_i A_j + A_i p_j) \\ &= -q\epsilon_{ijk}p_i A_j + q\epsilon_{ijk}A_j p_i \\ &= -q\epsilon_{ijk}[p_i, A_j] \\ &= -q\epsilon_{ijk}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial A_j}{\partial x_i} \\ &= i\hbar q B^k \end{aligned}$$

On en déduit donc finalement :

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2 = \vec{\Pi}^2 - q\hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

En récrivant l'équation (46), on obtient l'équation de Pauli :

$$\boxed{\epsilon\phi = \left(\frac{1}{2m}\vec{\Pi}^2 - \frac{q\hbar}{2m}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right)\phi = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2\phi - \frac{q\hbar}{2m}\vec{\sigma} \cdot \vec{B}\phi} \quad (48)$$

On se place dans le cas d'un champ magnétique constant et on prend le potentiel vecteur $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \wedge \vec{r}$. On peut alors écrire le hamiltonien sous la forme :

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m}(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{1}{2m}q^2\vec{A}^2 - \frac{q\hbar}{2m}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m}([\vec{p}, \vec{A}] + 2\vec{A} \cdot \vec{p}) + O(\vec{B}^2) - \frac{q\hbar}{2m}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \end{aligned}$$

Or le commutateur $[\vec{p}, \vec{A}] \propto \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, donc la partie d'interaction du hamiltonien s'écrit :

$$\begin{aligned} H_I &= -\frac{q}{2m}(\vec{B} \wedge \vec{r}) \cdot \vec{p} - \frac{q\hbar}{2m}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \\ H_I &= -\frac{q}{2m}\vec{B} \cdot (\vec{r} \wedge \vec{p}) - \frac{q}{m}\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \\ H_I &= -\frac{q}{2m}\vec{B} \cdot \vec{L} - \frac{q}{m}\vec{B} \cdot \vec{S} \end{aligned}$$

Interprétation du terme $-\frac{q}{2m}\vec{B} \cdot \vec{L}$:

En mécanique classique, le couplage d'une boucle de courant à un champ magnétique s'écrit :

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Où $\mu = iS$ est le moment magnétique généré par cette boucle de surface S . Exprimons le courant i :

$$i = \frac{q}{T} = \frac{q}{2\pi r/v} = \frac{qv}{2\pi r}$$

Le moment magnétique s'écrit alors :

$$\mu = iS = \frac{q|v|}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{q}{2m} mrv = \frac{q}{2m} L$$

De manière vectorielle, on a :

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

Et donc le hamiltonien d'interaction donne :

$$H_I = -\frac{q}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B}$$

Ce terme décrit donc le couplage entre le champ magnétique extérieur et le moment magnétique de l'atome engendré par la rotation de l'électron sur son orbite.

Interprétation du terme $-\frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$

Ce terme décrit l'interaction entre le spin de l'électron et le champ magnétique extérieur. On peut l'écrire sous la forme générale :

$$\vec{\mu} = g \frac{q}{2m} \vec{S}$$

Où l'on a introduit le **facteur gyromagnétique** g . Dans le cadre de la théorie de Dirac, on trouve $g = 2$. Dans le cadre de l'électrodynamique quantique, les corrections radiatives donnent le développement :

$$g = 2 \left[1 + \frac{\alpha}{2\pi} + C_1 \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^2 + C_2 \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^3 + \dots \right]$$

Les constantes C_1 et C_2 font intervenir des corrections radiatives venant en plus des interactions faibles et fortes. On dispose actuellement d'un développement à l'ordre 5 en α la constante de structure fine.

4.2.2 Invariance par rotation

On considère une rotation $R \in SO(3)$, qui agit sur les variables d'espace-temps :

$$\begin{cases} \vec{x} \mapsto \vec{x}' = R\vec{x} \\ t \mapsto t' = t \end{cases}$$

Cette rotation transforme une solution de l'équation de Dirac de la façon suivante :

$$\psi(\vec{r}, t) \mapsto \psi'(\vec{r}', t) = S\psi(\vec{r}, t)$$

Pour qu'il y ait invariance par rotation, ψ' doit vérifier l'équation :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\vec{r}', t) = -i\hbar \alpha^k \frac{\partial}{\partial x'^k} \psi'(\vec{r}', t) + \beta mc^2 \psi'(\vec{r}', t) \quad (49)$$

Or $\psi = S^{-1}\psi'$ est solution de l'équation de Dirac donc :

$$i\hbar S^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\vec{r}', t) = -i\hbar \alpha^k \frac{\partial}{\partial x^k} S^{-1} \psi'(\vec{r}', t) + \beta mc^2 S^{-1} \psi'(\vec{r}', t)$$

On a également la relation $x'_i = R_{ik} x_k$ donc on peut exprimer les dérivées spatiales :

$$\frac{\partial}{\partial x^k} = \frac{\partial}{\partial x'^i} \frac{dx'^i}{dx^k} = \frac{\partial}{\partial x'^i} R_{ik}$$

On obtient alors pour l'équation de Dirac :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\vec{r}', t) = -i\hbar S \alpha^k S^{-1} R_{ik} \frac{\partial}{\partial x'^i} \psi'(\vec{r}', t) + S \beta mc^2 S^{-1} \psi'(\vec{r}', t) \quad (50)$$

En égalisant les équations (49) et (50), on obtient les conditions :

$$\boxed{S\beta S^{-1} = \beta} \quad \text{et} \quad \boxed{S\alpha^k S^{-1} R_{ik} = \alpha^i} \quad (51)$$

On se place dans la base où les matrices α et β s'écrivent :

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{I} \\ -\mathbb{I} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

On cherche alors S sous la forme

$$S = \begin{pmatrix} \mathcal{U} & 0 \\ 0 & \mathcal{U} \end{pmatrix} \quad (52)$$

On vérifie alors aisément que $S\beta S^{-1} = \beta$. La condition sur α donne :

$$\begin{pmatrix} \mathcal{U} & 0 \\ 0 & \mathcal{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma^k & 0 \\ 0 & \sigma^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{U}^{-1} & 0 \\ 0 & \mathcal{U}^{-1} \end{pmatrix} R_{ik} = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}$$

Ce qui s'écrit alors

$$\mathcal{U}\sigma^k\mathcal{U}^{-1}R_{ik} = \sigma^i \quad (53)$$

Or nous avons vu précédemment que la représentation \mathcal{V} dans $SU(2)$ d'une rotation R de $SO(3)$ vérifie :

$$\mathcal{V}\vec{\sigma} \cdot \vec{x}\mathcal{V}^{-1} = \vec{\sigma} \cdot \vec{x}'$$

Ce que l'on peut réécrire :

$$\mathcal{V}\sigma_j x_j \mathcal{V}^{-1} = \sigma_i R_{ij} x_j \Rightarrow \mathcal{V}\sigma_j \mathcal{V}^{-1} = \sigma_i R_{ij}$$

On obtient en multipliant par R_{kj} :

$$\mathcal{V}\sigma_j \mathcal{V}^{-1} R_{kj} = \sigma_i R_{ij} R_{kj} = \sigma_i R_{ij} ({}^t R)_{jk} = \sigma_i (R^t R)_{ij} = \sigma_i \delta_{ij} = \sigma_j$$

Donc on prend pour \mathcal{U} la matrice de $SU(2)$ qui représente la rotation R . L'invariance de l'équation de Dirac par rotation impose alors :

$$\boxed{\psi'(\vec{x}) = \exp\left(-i\theta \frac{\vec{\Sigma} \cdot \vec{n}}{2}\right) \psi(R^{-1}\vec{x})} \text{ avec } \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad (54)$$

Interférométrie de neutrons :

On fait tourner des neutrons de 2π avec un champ magnétique bien choisi.

$$\mathcal{U} = \exp\left(-i\theta \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{n}}{2}\right) = \cos \frac{\theta}{2} - i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin \frac{\theta}{2}$$

Pour $\theta = 2\pi$, $\mathcal{U}(2\pi) = -\mathbb{I}$ et donc $\psi \mapsto -\psi$.

On a vu que dans la limite non relativiste, le hamiltonien d'interaction s'écrit :

$$H_{NR} = -g \frac{q}{2m} \vec{S} \cdot \vec{B} = -g \frac{q\hbar}{4m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

Pour des objets élémentaires, Dirac donne $g = 2$. Pour des neutrons, on trouve expérimentalement $g = -3,82$. Pour les degrés de liberté de spin, on a donc :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -g \frac{q\hbar}{4m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = ig \frac{q}{4m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \psi$$

On en déduit alors l'expression de ψ :

$$\psi(t) = \exp\left(ig \frac{qt}{4m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}\right) \psi(0)$$

Or $\exp\left(ig \frac{qt}{4m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}\right) \in SU(2)$ et correspond à une rotation d'angle :

$$\theta(t) = -\frac{gqBt}{2m}$$

4.2.3 Invariance de Lorentz

On a vu précédemment l'équation de continuité :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger \psi) + c\vec{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) = 0$$

Écrivons cette équation de manière relativiste : $\partial_\mu j^\mu = 0$, ce qui nous donne :

$$j^0 = \psi^\dagger \psi \text{ et } \vec{j} = \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi$$

Ceci implique donc que $\psi^\dagger\psi$ n'est pas invariant par transformation de Lorentz car c'est la première composante d'un quadri-vecteur. On a $\beta^2 = \mathbb{I}$. On introduit $\bar{\psi} = \psi^\dagger\beta$. On peut alors écrire :

$$j^0 = \bar{\psi}\beta\psi \text{ et } j^i = \bar{\psi}\beta\alpha^i\psi$$

Notons alors $\boxed{\gamma^0 = \beta}$ et $\boxed{\gamma^i = \beta\alpha^i}$ on obtient :

$$\boxed{j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi} \quad (55)$$

Les relations d'anticommutations sont équivalentes à :

$$\boxed{\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}} \quad (56)$$

L'équation de Dirac peut alors se réécrire :

$$\boxed{\left(-i\gamma^\mu\partial_\mu + \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0} \quad (57)$$

Construisons maintenant des invariants ou covariants à partir de ψ et $\bar{\psi}$:

- $j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ se transforme comme un quadri-vecteur :

$$j^\mu(x) \mapsto j'^\mu(x') = \Lambda^\mu_\nu j^\nu(x)$$

- $\bar{\psi}\psi$ est invariant sous la transformation de Lorentz : c'est un scalaire.
- $\bar{\psi}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]\psi$ se transforme comme le tenseur $F_{\mu\nu}$.
- $\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi$ où $\gamma^5 = \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ est un pseudo-scalaire : il est invariant par transformation de Lorentz mais pas par la parité.

On cherche la forme générale d'une équation invariante relativiste couplée à un champ électromagnétique. Nous avons vu que sans champ, elle s'écrit :

$$-i\gamma^\mu\partial_\mu\psi + \frac{mc}{\hbar}\psi = 0$$

En présence de champ, elle s'écrit :

$$\boxed{-i\gamma^\mu\left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar}A_\mu\right)\psi + \frac{mc}{\hbar}\psi = 0} \quad (58)$$

Ce qui prédit $g = 2$ comme nous l'avons vu précédemment. Elle ne peut donc pas décrire par exemple le neutron. On écrit alors :

$$\boxed{-i\gamma^\mu\left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar}A_\mu\right)\psi + bF_{\mu\nu}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]\psi + \frac{mc}{\hbar}\psi = 0} \quad (59)$$

Cette équation est invariante par transformation de Lorentz car tous les indices sont saturés : c'est un scalaire. De plus, en prenant la limite non relativiste, on trouve $g = 2 + \lambda b$

4.2.4 Construction des états propres d'énergie et d'impulsion fixée

On cherche les états propres d'énergie E et d'impulsion \vec{p} fixées :

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\psi(\vec{p})$$

On déduit alors de l'équation de Dirac :

$$\boxed{E\psi(\vec{p}) = c\alpha^k p^k\psi + mc^2\beta\psi} \quad (60)$$

Où l'on s'est placé dans une base où :

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \text{ et } \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

On peut alors réécrire l'équation (60) sous forme matricielle :

$$E\psi = \begin{pmatrix} mc^2\mathbb{I} & c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -mc^2\mathbb{I} \end{pmatrix}\psi$$

On décompose ψ en deux blocs de deux composantes : $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ et on obtient donc :

$$\begin{pmatrix} (mc^2 - E)\mathbb{I} & c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -(mc^2 + E)\mathbb{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0$$

Cette équation a des solutions non nulles si son déterminant est nul, ce qui donne :

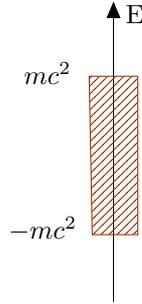
$$-(mc^2 - E)(mc^2 + E) - (c\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = 0$$

Et on obtient alors la relation :

$$\boxed{E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (61)$$

On a donc des solutions d'énergie positive et des solutions d'énergie négative données par :

$$\begin{cases} E_+ = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \\ E_- = -\sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \end{cases}$$



Il y a une bande d'énergie interdite entre $-mc^2$ et mc^2 .

Intéressons-nous aux solutions d'énergie positive. Elles vérifient :

$$\begin{cases} (mc^2 - E)\psi_1 + c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\psi_2 = 0 \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\psi_1 - (mc^2 + E)\psi_2 = 0 \end{cases}$$

Ces deux équations ne sont pas indépendantes. De la deuxième on déduit :

$$\psi_2 = \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{mc^2 + E}\psi_1$$

Et donc finalement ψ :

$$\psi = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{mc^2 + E}\psi_1 \end{pmatrix}$$

On prend alors la **normalisation covariante** $\bar{\psi}\psi = 1$ et on déduit \mathcal{N} :

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{mc^2 + E}{2mc^2}}$$

$$\Rightarrow \psi = \sqrt{\frac{mc^2 + E}{2mc^2}} \begin{pmatrix} \phi \\ \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{mc^2 + E}\phi \end{pmatrix} \text{ avec } \phi^\dagger \phi = 1$$

On s'intéresse maintenant aux solutions d'énergie négative.

Considérons un atome hydrogénoïde. Les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$E_D = \pm \left\{ mc^2 - \frac{mc^2 Z^2 \alpha^2}{2n^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \right\}$$

L'énergie minimale est alors $-\infty$. Ce qui pose problème pour expliquer la stabilité de l'atome.

L'idée de Dirac consiste à remplir tous les états d'énergie négative et de définir ainsi l'état fondamental : c'est la mer de Dirac. On renormalise alors les énergies par rapport à ce nouvel état.

Si on fournit de l'énergie à cet état, on peut créer une lacune et occuper un état d'énergie positive : on peut créer des paires particule-antiparticule. Mais il y a un problème d'absence de symétrie entre particule et antiparticule.

5 L'intégrale de chemin

La mécanique classique peut être formulée de trois façons :

- formulation Newtonienne
- formulation Lagrangienne : c'est une approche globale. On considère des familles de trajectoires possibles auxquelles on associe une action. La trajectoire classique est celle qui minimise l'action.
- formulation Hamiltonienne : on se place dans un espace plus grand : l'espace des phases, et l'évolution temporelle est décrite par l'opérateur hamiltonien :

$$\dot{x}_i = \{x_i, H\} \text{ et } \dot{p}_i = \{p_i, H\} \text{ avec } H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i)$$

Le passage à la mécanique quantique est basé sur un formalisme Hamiltonien avec un point de vue opératoire : x_i et p_i sont des opérateurs autoadjoints. Les crochets de Poisson sont remplacés par $i\hbar[\cdot, \cdot]$. Mais on perd alors la notion de trajectoire. Nous allons donc nous baser sur un formalisme Lagrangien pour trouver une autre formulation de la mécanique quantique.

5.1 Le propagateur de Feynman

On se place dans un espace de dimension d .

Dans la représentation de Schrödinger, l'évolution dans le temps des états est donnée par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

Si le hamiltonien est indépendant du temps, on peut alors intégrer cette équation :

$$|\psi(t')\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right] |\psi(t)\rangle$$

En projetant sur un état $|\vec{q}'\rangle$, on obtient :

$$\langle \vec{q}' | \psi(t') \rangle = \langle \vec{q}' | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right] |\psi(t)\rangle$$

On peut alors insérer la relation de fermeture des états position :

$$\langle \vec{q}' | \psi(t') \rangle = \int d^d \vec{q} \langle \vec{q}' | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right] |\vec{q}\rangle \langle \vec{q} | \psi(t)\rangle$$

On définit alors le propagateur de Feynman par :

$$\boxed{K(\vec{q}'t' | \vec{q}t) = \langle \vec{q}' | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right] |\vec{q}\rangle} \quad (62)$$

On obtient alors la relation entre la fonction d'onde évaluée aux points (\vec{q}, t) et (\vec{q}', t') :

$$\boxed{\psi(\vec{q}', t') = \int K(\vec{q}'t' | \vec{q}t) \psi(\vec{q}, t) d^d \vec{q}} \quad (63)$$

5.2 Expression du propagateur de la particule libre

On considère le hamiltonien d'une particule libre :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Les états propres sont les états $|\vec{p}\rangle$:

$$\langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{d/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{p}\right)$$

En insérant une relation de fermeture dans l'expression du propagateur, on obtient :

$$\begin{aligned}
K_0(\vec{q}'t'|\vec{q}t) &= \int d^d\vec{p}\langle\vec{q}'|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\exp\left(-\frac{i\vec{p}^2}{2m\hbar}(t'-t)\right)|\vec{q}\rangle \\
&= \int\langle\vec{q}'|\vec{p}\rangle\exp\left(-\frac{i\vec{p}^2}{2m\hbar}(t'-t)\right)\langle\vec{p}|\vec{q}\rangle d^d\vec{p} \\
&= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^d \int \exp\left[i\frac{\vec{p}}{\hbar}(\vec{q}'-\vec{q})-\frac{i\vec{p}^2}{2m\hbar}(t'-t)\right] d^d\vec{p} \\
&= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^d \left[\frac{2\pi m\hbar}{i(t'-t)}\right]^{d/2} \exp\frac{im(\vec{q}'-\vec{q})^2}{2\hbar(t'-t)} \\
\boxed{K_0(\vec{q}'t'|\vec{q}t)} &= \boxed{\left[\frac{m}{2i\pi\hbar(t'-t)}\right]^{d/2} \exp\frac{im(\vec{q}'-\vec{q})^2}{2\hbar(t'-t)}} \tag{64}
\end{aligned}$$

Pour le chemin q' parcouru dans le temps $t' - t$, la vitesse est constante et donnée par :

$$v = \frac{\vec{q}' - \vec{q}}{t' - t}$$

Le lagrangien est $\mathcal{L} = \frac{mv^2}{2}$ et l'action vaut :

$$S = \int \mathcal{L}dt = \frac{mv^2}{2}(t' - t) = \frac{m(\vec{q}' - \vec{q})^2}{2(t' - t)}$$

L'argument de l'exponentielle précédente est alors iS/\hbar avec S l'action classique.

5.3 Construction générale du propagateur

On utilise la formule de Trotter :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[e^{\frac{t}{n}A} e^{\frac{t}{n}B} \right]^n = e^{t(A+B)}$$

Notons alors $A = \frac{1}{\hbar}\hat{H}_0$, $B = \frac{1}{\hbar}\hat{V}$ et $t = -i(t' - t) = -iT$. On a alors :

$$\langle\vec{q}'|e^{-iT(\hat{H}_0+\hat{V})/\hbar}|\vec{q}\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle\vec{q}'|\left(e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}e^{-iT\hat{V}/n\hbar}\right)^n|\vec{q}\rangle$$

$$\langle\vec{q}'|e^{-iT(\hat{H}_0+\hat{V})/\hbar}|\vec{q}\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle\vec{q}'|\left(e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}e^{-iT\hat{V}/n\hbar}\right)\dots\left(e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}e^{-iT\hat{V}/n\hbar}\right)|\vec{q}\rangle$$

Insérons alors $n - 1$ relations de fermeture : $\int d\vec{q}_i|\vec{q}_i\rangle\langle\vec{q}_i| = \mathbb{1}$. On obtient alors $n - 1$ intégrales contenant des termes du type :

$$\langle\vec{q}_i|e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}e^{-iT\hat{V}/n\hbar}|\vec{q}_{i+1}\rangle$$

\hat{V} est diagonale dans la base des $|\vec{q}\rangle$, insérons alors une relation de fermeture entre les exponentielles :

$$\begin{aligned}
\langle\vec{q}_i|e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}e^{-iT\hat{V}/n\hbar}|\vec{q}_{i+1}\rangle &= \int \langle\vec{q}_i|e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}|\vec{q}\rangle\langle\vec{q}|e^{-iT\hat{V}/n\hbar}|\vec{q}_{i+1}\rangle d\vec{q} \\
&= \langle\vec{q}_i|e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}|\vec{q}_{i+1}\rangle e^{-iT\mathbf{V}(\vec{q}_{i+1})/n\hbar}
\end{aligned}$$

On remplace alors le premier terme par le propagateur libre et on obtient :

$$\langle\vec{q}_i|e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}e^{-iT\hat{V}/n\hbar}|\vec{q}_{i+1}\rangle = \left(\frac{m}{2i\pi\frac{T}{n}}\right)^{d/2} \exp\frac{im(\vec{q}_{i+1}-\vec{q}_i)^2}{2\hbar\frac{T}{n}} \exp-\frac{iT}{n}\frac{V(\vec{q}_{i+1})}{\hbar}$$

On peut alors exprimer le propagateur comme la limite d'une intégrale multiple :

$$\langle\vec{q}'|\exp-\frac{iT}{\hbar}(\hat{H}_0+\hat{V})|\vec{q}\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \langle\vec{q}'|e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}e^{-iT\hat{V}/n\hbar}|\vec{q}_1\rangle\dots\langle\vec{q}_{n-1}|e^{-iT\hat{H}_0/n\hbar}e^{-iT\hat{V}/n\hbar}|\vec{q}\rangle d\vec{q}_1\dots d\vec{q}_{n-1}$$

On renomme $\vec{q}' = \vec{q}_0$ et $\vec{q} = \vec{q}_n$, on a alors :

$$\langle\vec{q}'|\exp-\frac{iT}{\hbar}\hat{H}|\vec{q}\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\frac{T}{n}}\right)^{nd/2} \int \exp\frac{i}{\hbar}S(\vec{q}_0,\dots,\vec{q}_n)d\vec{q}_1\dots d\vec{q}_{n-1}$$

où on a noté :

$$S(\vec{q}_0, \dots, \vec{q}_n) = \sum_{i=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2\frac{T}{n}} (\vec{q}_i - \vec{q}_{i+1})^2 - \frac{T}{n} V(\vec{q}_{i+1}) \right]$$

Dans la limite $n \rightarrow \infty$, on a $\frac{\vec{q}_i - \vec{q}_{i+1}}{T/n} \rightarrow \dot{\vec{q}}_{i+1}$ donc :

$$S(\vec{q}_0, \dots, \vec{q}_n) = \frac{T}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}_{i+1}^2 - V(\vec{q}_{i+1}) \right]$$

Ce qui tend vers une intégrale :

$$S(\vec{q}', \vec{q}) = \int_t^{t'} \left[\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}(\tau)^2 - V(\vec{q}(\tau)) \right] d\tau$$

On introduit alors la **mesure de Feynman** définie par :

$$\mathcal{D}\vec{q}(\tau) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\frac{T}{n}} \right)^{nd/2} d\vec{q}_1 \cdots d\vec{q}_{n-1} \quad (65)$$

On obtient donc l'expression formelle du propagateur :

$$K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}(\tau)^2 - V(\vec{q}(\tau)) \right) d\tau \right] \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \quad (66)$$

Où l'on intègre sur tous les chemins qui relient \vec{q} et \vec{q}' . Chaque terme est donné par une phase proportionnelle à l'action classique.

5.4 Propriétés du propagateur

- Le propagateur de Feynman est solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial K}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{q}} + V(\vec{q}) \right) K$$

avec la condition initiale :

$$\lim_{t' \rightarrow t} K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) = \delta^d(\vec{q}' - \vec{q})$$

- Considérons les états propres du Hamiltonien : $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. On peut alors utiliser la relation de fermeture sur ses états :

$$K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) = \sum_n \langle \vec{q}'|n\rangle \langle n|\vec{q}\rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t) \right] |\vec{q}\rangle = \sum_n \psi_n(\vec{q}') \psi_n^*(\vec{q}) e^{-iE_n(t' - t)/\hbar}$$

Prenons $\vec{q}' = \vec{q}$ et intégrons sur \vec{q} , on obtient une fonction de $t' - t$:

$$\phi(t' - t) = \int K(\vec{q}t'|\vec{q}t) d\vec{q} = \sum_n e^{-iE_n(t' - t)/\hbar}$$

Calculons alors la transformée de Fourier de $\phi(t)$ en $E + i\epsilon$ pour assurer la convergence de l'intégrale :

$$\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \phi(t) e^{it(E+i\epsilon)/\hbar} dt = \sum_n \frac{1}{E_n - E - i\epsilon}$$

Introduisons alors la résolvante : $G(z) = (\hat{H} - z\mathbb{I})^{-1}$ qui existe sauf pour z dans le spectre de \hat{H} . Sa trace vaut :

$$Tr[G(E + i\epsilon)] = \sum_n \frac{1}{E_n - E - i\epsilon}$$

Les pôles de la résolvante donnent les états liés du système.

La connaissance du propagateur permet d'accéder au spectre du hamiltonien.

- Principe de superposition :

$$K(\vec{q}'t'|\vec{q}t) = \int K(\vec{q}'t'|\vec{q}_1\tau) K(\vec{q}_1\tau|\vec{q}t) d\vec{q}_1 \quad (67)$$

5.5 Propagateur euclidien

La physique statistique des systèmes quantiques à l'équilibre fait intervenir la fonction de partition définie par :

$$Z = \text{Tr} [e^{-\beta H}] = \int \langle \vec{q} | e^{-\beta H} | \vec{q} \rangle$$

et l'opérateur densité dont les éléments de matrice s'écrivent dans la base $\{|\vec{q}\rangle\}$:

$$\rho(\vec{q}, \vec{q}') = \frac{1}{Z} \langle \vec{q}' | e^{-\beta H} | \vec{q} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \psi_n(\vec{q}') \psi_n^*(\vec{q}) e^{-\beta E_n / \hbar}$$

On a vu que le propagateur peut s'écrire :

$$K(\vec{q}'t | \vec{q}0) = \langle \vec{q}' | e^{itH/\hbar} | \vec{q} \rangle = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}(\tau)^2 - V(\vec{q}(\tau)) \right) d\tau \right] \mathcal{D}\vec{q}(\tau)$$

Remplaçons alors t par $-iT$:

$$\langle \vec{q}' | e^{-TH/\hbar} | \vec{q} \rangle = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{-iT} \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}(\tau)^2 - V(\vec{q}(\tau)) \right) d\tau \right] \mathcal{D}\vec{q}(\tau)$$

Ce que l'on peut réécrire en effectuant le changement de variable $\tau' = -i\tau$:

$$\langle \vec{q}' | e^{-TH/\hbar} | \vec{q} \rangle = \int \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^T \left(-\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}(\tau')^2 - V(\vec{q}(\tau')) \right) d\tau' \right] \mathcal{D}^E \vec{q}(\tau')$$

On pose alors $T = \beta\hbar$ et on obtient :

$$\langle \vec{q}' | e^{-\beta H} | \vec{q} \rangle = \int \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}(\tau)^2 + V(\vec{q}(\tau)) \right) d\tau \right] \mathcal{D}^E \vec{q}(\tau)$$

Où l'on a introduit $\mathcal{D}^E \vec{q}(\tau)$ une mesure euclidienne sur les chemins. On peut alors en déduire la fonction de partition :

$$Z = \int \langle \vec{q}' | e^{-\beta H} | \vec{q} \rangle = \int d\vec{q} \int_{\vec{q}(0)=\vec{q}}^{\vec{q}(\beta\hbar)=\vec{q}'} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{q}}(\tau)^2 + V(\vec{q}(\tau)) \right) d\tau \right] \mathcal{D}^E \vec{q}(\tau)$$

Plaçons nous dans le cas libre ($V = 0$) et intéressons-nous aux chemins issus de l'origine. On prend $\hbar = m = 1$ pour simplifier les expressions. On montre qu'un chemin quelconque issu de l'origine peut être représenté sous la forme d'une série de Fourier :

$$q(\tau) = \sqrt{\beta} \left(\xi_0 \frac{\tau}{\beta} + \sqrt{2} \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n \frac{\sin(n\pi\tau/\beta)}{n\pi} \right) \quad (68)$$

La donnée d'un chemin est alors équivalente à la donnée des coefficients de Fourier $\{\xi_n\}$. On a alors

$$\dot{q}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left(\xi_0 + \sqrt{2} \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n \cos \frac{n\pi\tau}{\beta} \right)$$

L'intégrale du terme cinétique donne donc

$$\frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} \dot{q}^2(\tau) d\tau = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n^2$$

On définit alors la mesure euclidienne par :

$$\boxed{\mathcal{D}^E q(\tau) = \prod_{n=0}^{\infty} \frac{d\xi_n}{\sqrt{2\pi}}} \quad (69)$$

De telle sorte que l'on obtient

$$\exp -\frac{1}{2} \int_0^{\beta} \dot{q}(\tau) d\tau \mathcal{D}^E q(\tau) = \prod_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp -\frac{\xi_n^2}{2} d\xi_n$$

En prenant des valeurs de ξ_n distribuées selon la loi gaussienne $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp -\frac{\xi_n^2}{2}$, on retombe sur la mesure de Feynman. On peut maintenant exprimer le propagateur d'une particule libre partant de l'origine en arrivant en $q(\beta) = \xi_0 \sqrt{\beta}$, ce qui fixe ξ_0 .

$$\langle q | e^{-\beta H_0} | 0 \rangle = \int \prod_{n=0}^{\infty} \frac{d\xi_n}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{\xi_n^2}{2} \right) \delta(q - q(\beta))$$

On sépare alors les intégrales sur ξ_0 et ξ_n et on obtient le propagateur de Feynman en euclidien :

$$\boxed{\langle q | e^{-\beta H_0} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp -\frac{q^2}{2\beta}} \quad (70)$$

$q(\tau)$ définit une famille de fonctions aléatoires sur $[0, \beta]$ qui est équivalente à la famille des mouvements browniens issus de l'origine. Il s'agit de limites de marches aléatoires.

5.6 Intégrale de chemin sur un espace multiplement connexe

Considérons 2 particules identiques et indiscernables repérées par \vec{r}_1 et \vec{r}_2 dans un espace à deux dimensions. On introduit $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ et $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$. Les particules étant indiscernables, on doit identifier \vec{r} et $-\vec{r}$. On enroule le plan pour former un cône sur lequel les vecteurs \vec{r} et $-\vec{r}$ sont identiques. De plus, on impose que les particules ne peuvent pas se trouver au même point dont on retire l'origine du cône. Cet espace de configuration est multiplement connexe.

Notons C_n l'espace de configuration de n particules identiques en dimension d . Il s'agit donc de $(\mathbb{R}^d)^n$ dont on retire les éléments de Δ où deux vecteurs sont égaux. De plus on doit retirer toutes les permutations d'un même n-uplet. Donc

$$C_n = \frac{(\mathbb{R}^d)^n - \Delta}{S_n}$$

Rappels sur la notion d'homotopie :

On se place dans un espace topologique C .

Définition : Un chemin d'extrémités x et y est une application continue $f : I = [0; 1] \rightarrow C$ telle que $f(0) = x$ et $f(1) = y$.

Un chemin est dit fermé si $x = y$

On définit une loi de composition interne des chemins qui consiste à "recoller" deux chemins d'extrémités x, y et y, z :

$$f \circ g(t) = \begin{cases} f(2t) & \text{si } t \in [0; \frac{1}{2}] \\ g(2t - 1) & \text{si } t \in [\frac{1}{2}; 1] \end{cases}$$

Définition : Deux chemins f et g de mêmes extrémités x et y sont dits **homotopes** s'il existe une application continue $\phi : [0; 1] \times [0; 1] \rightarrow C$ telle que :

$$\phi(t, 0) = f(t) ; \phi(t, 1) = g(t) ; \phi(0, u) = x ; \phi(1, u) = y$$

Définition : On appelle **groupe fondamental** le groupe formés des chemins fermés issus de x considérés à une homotopie près. On le note $\pi_1(C, x)$.

On montre que le point x peut être choisi arbitrairement et donc on note $\pi_1(C)$.

Exemples :

- Le groupe fondamental du cercle S_1 est l'ensemble des entiers : une classe d'homotopie est définie par le nombre de tours effectués. $\pi_1(S_1) = \mathbb{Z}$.
- Sur la sphère S_2 , tous les chemins sont équivalents à un chemin trivial.
- Sur un tore, on peut effectuer des tours de deux façons différentes : autour du trou central ou autour d'une section. Donc $\pi_1 = \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$

On regroupe les chemins de C en classes d'homotopies g . On peut alors exprimer le propagateur comme une somme sur les classes d'homotopies :

$$K(\vec{q}'t' | \vec{q}t) = \sum_{g \in \pi_1(C)} \chi(g) \int_{\vec{q}(t)=\vec{q}}^{\vec{q}(t)=\vec{q}'} e^{iS} \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \quad (71)$$

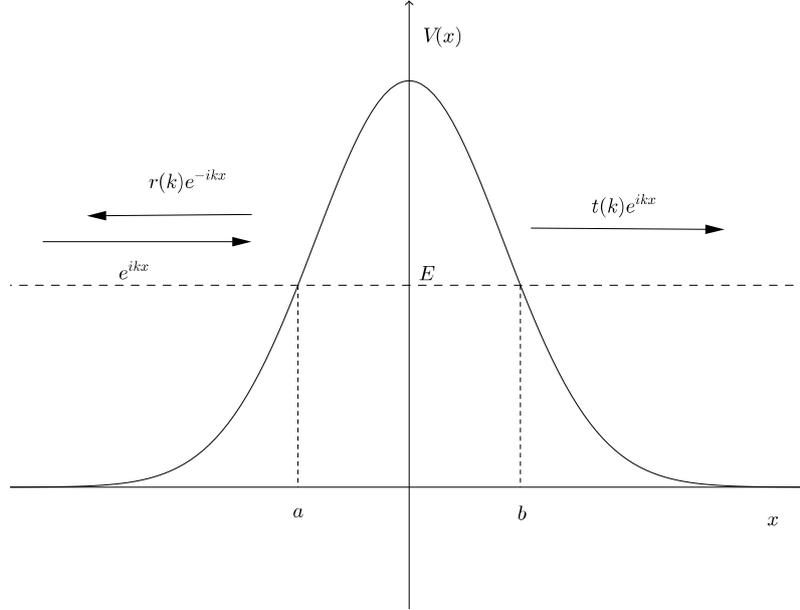
Où $\chi(g)$ représente une phase associée à chaque classe de chemin. Le principe de superposition impose alors :

$$\chi(g)\chi(h) = \chi(g \circ h) \quad (72)$$

5.7 Méthodes semi-classiques

En relativité, on peut effectuer un développement en puissances de $\frac{1}{c}$ à la limite $c \rightarrow \infty$ qui permet de retrouver la limite classique. On voudrait pouvoir faire de même en mécanique quantique pour obtenir un développement en puissances de \hbar à la limite $\hbar \rightarrow 0$. Mais ce développement est impossible car $\hbar = 0$ est un point singulier.

Prenons l'exemple du coefficient de transmission par une barrière de potentiel $V(x)$.



Le calcul donne alors :

$$t(k) \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{V(x) - E} dx\right)$$

avec $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. On voit alors que $t(k)$ n'est pas analytique en $\hbar = 0$ et ne peut donc être obtenu avec un développement perturbatif.

De même le propagateur de Feynman $K(q't'|qt) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q(\tau)]\right) \mathcal{D}q(\tau)$ n'est pas analytique en $\hbar = 0$. Nous allons donc utiliser la méthode de la phase stationnaire.

5.7.1 Méthode WKB

Suivons l'approche traditionnelle qui n'utilise pas la méthode de la phase stationnaire.

Posons $\psi = ae^{\frac{iS}{\hbar}}$ avec $S \gg \hbar$. ψ est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r})\psi$$

En réinjectant l'expression précédente et en identifiant les parties réelles et imaginaires on obtient le système d'équations aux dérivées partielles suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a} \\ \frac{\partial a^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(a^2 \frac{\vec{\nabla} S}{m} \right) = 0 \end{cases} \quad (73)$$

Si l'on néglige le second membre de la première équation qui est d'ordre 2 en \hbar , on obtient une équation d'Hamilton-Jacobi satisfaite par l'action classique. En effet :

$$\mathcal{L} = \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - H \Rightarrow S = \int_{t_0}^t \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} d\tau - E(t - t_0)$$

On en déduit alors les dérivées suivantes :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -E ; \quad \frac{\partial S}{\partial t_0} = E ; \quad \vec{\nabla}_{\vec{q}} S = \vec{p}(t) ; \quad \vec{\nabla}_{\vec{q}_0} S = -\vec{p}(t_0)$$

Or $E = \frac{p^2}{2m} + V$ donc on obtient :

$$\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V(\vec{q}) = -\frac{\partial S}{\partial t} \quad (74)$$

En se plaçant à une dimension, on en déduit :

$$\frac{\partial S}{\partial x} = \sqrt{2m(E - V(x))} \Rightarrow S(x) = \int \sqrt{2m(E - V(y))} dy$$

Et l'autre équation donne :

$$a^2 \frac{\partial S}{\partial x} = \text{Cte} \Rightarrow a^2 = \frac{\text{Cte}}{\sqrt{2m(E - V(x))}}$$

De plus, $\frac{p^2}{2m} + V = E$ donc on en déduit l'impulsion :

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

On peut alors écrire la fonction d'onde :

$$\psi_{SC}(x) = \frac{1}{p(x)^{1/4}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(y) dy\right)$$

Dans l'intervalle $[a, b]$ où $E > V(x)$, ψ_{SC} donne des oscillations. En dehors, $p \in i\mathbb{R}$ donc ψ_{SC} décroît exponentiellement. Aux bords de cet intervalle, ψ_{SC} diverge. En écrivant des conditions de raccordement, on en déduit la **condition WKB** :

$$\boxed{\int_a^b \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)} \quad (75)$$

Qui est une très bonne approximation pour n grand.

5.7.2 Calcul du propagateur semi-classique

Commençons par la méthode de Laplace, pour des exponentielles réelles.

On considère une fonction f convexe ayant un seul minimum en x_0 . On veut approximer l'intégrale :

$$I(\hbar) = \int_a^b \exp\left(-\frac{1}{\hbar} f(x)\right) dx$$

Effectuons le changement de variable $t = \frac{1}{\hbar}$. On veut alors l'expression de $I(t)$ pour $t \rightarrow \infty$. La fonction tf est alors très piquée au voisinage de x_0 de telle sorte que la contribution principale de e^{-tf} à l'intégrale provient du voisinage de x_0 . Développons la fonction f au voisinage de x_0 :

$$f(x) \approx f(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2} f''(x_0) + \dots$$

Posons alors $\xi = (x - x_0)\sqrt{t}$, on obtient :

$$\begin{aligned} I(t) &= \int_{(a-x_0)\sqrt{t}}^{(b-x_0)\sqrt{t}} \exp\left[-tf(x_0) + \frac{\xi^2}{2} f''(x_0) + \dots\right] \frac{d\xi}{\sqrt{t}} \\ &= \exp[-tf(x_0)] \frac{1}{\sqrt{t}} \int_{(a-x_0)\sqrt{t}}^{(b-x_0)\sqrt{t}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2} f''(x_0)\right) d\xi \\ &\approx \frac{e^{-tf(x_0)}}{\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2} f''(x_0)\right) d\xi \end{aligned}$$

On en déduit le premier terme du développement à la limite $t \rightarrow \infty$:

$$\boxed{\int_a^b e^{-tf(x)} dx \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-tf(x_0)}}{\sqrt{t}} \sqrt{\frac{2\pi}{f''(x_0)}}} \quad (76)$$

Application : Formule de Stirling

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} dt \underset{t=xu}{=} x^x \int_0^\infty e^{-x(u - \ln u)} du$$

On applique le résultat précédent avec $f(u) = u - \ln u$ convexe et minimale en 1 avec $f''(1) = 1$ donc on en déduit la formule de Stirling :

$$n! = \Gamma(n + 1) = n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}$$

Calculons alors le propagateur en dimension 1, à la limite $\hbar \rightarrow 0$:

$$\langle q' | e^{-i\hat{H}(t'-t)/\hbar} | q \rangle = \int \mathcal{D}q(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2(\tau) - V(q(\tau)) \right] d\tau \right\}$$

Pour utiliser la méthode de la phase stationnaire, il nous faut trouver les solutions $q_C(\tau)$ qui rendent stationnaires l'action classique :

$$S[q(\tau)] = \int_t^{t'} \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2(\tau) - V(q(\tau)) \right] d\tau$$

avec les conditions aux limites $q(t) = q$ et $q(t') = q'$. Les solutions sont les trajectoires classiques. Posons :

$$q(\tau) = q_C(\tau) + \sqrt{\hbar} \eta(\tau)$$

Avec $\eta(t) = \eta(t') = 0$. On effectue une translation de la variable d'intégration, donc $\mathcal{D}q(\tau) = \mathcal{D}\eta(\tau)$. Développons autour de q_C au second ordre, on obtient

$$S[q(\tau)] = S[q_C(\tau)] + \hbar \int_t^{t'} \left[\frac{m}{2} \dot{\eta}^2(\tau) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^2}(q_C(\tau)) \eta^2 \right] d\tau + \mathcal{O}(\hbar^3)$$

Avec une intégration par parties, on obtient :

$$\int \dot{\eta}^2 d\tau = [\dot{\eta}\eta]_t^{t'} - \int_t^{t'} \eta \ddot{\eta} d\tau = - \int_t^{t'} \eta \ddot{\eta} d\tau$$

On en déduit alors le propagateur au second ordre :

$$\boxed{\langle q' | e^{-i\hat{H}(t'-t)/\hbar} | q \rangle = e^{iS_C/\hbar} \int \mathcal{D}\eta(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{2} \int_t^{t'} \eta(\tau) M \eta(\tau) d\tau \right\}} \quad (77)$$

Cette expression fait intervenir une intégrale gaussienne. On peut en déduire la formule de Van-Vleck :

$$\boxed{K(q't'|qt) = \sum \frac{1}{\sqrt{2i\pi\hbar}} e^{-iM\pi/2} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 S}{\partial q \partial q'} \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S(q, q', t' - t)}} \quad (78)$$

Où la somme s'effectue sur toutes les trajectoires classiques et $M \in \mathbb{N}$ est le nombre de points de la trajectoire où l'approximation semi-classique est mise en défaut.