TROISIEME CYCLE DE LA PHYSIQUE

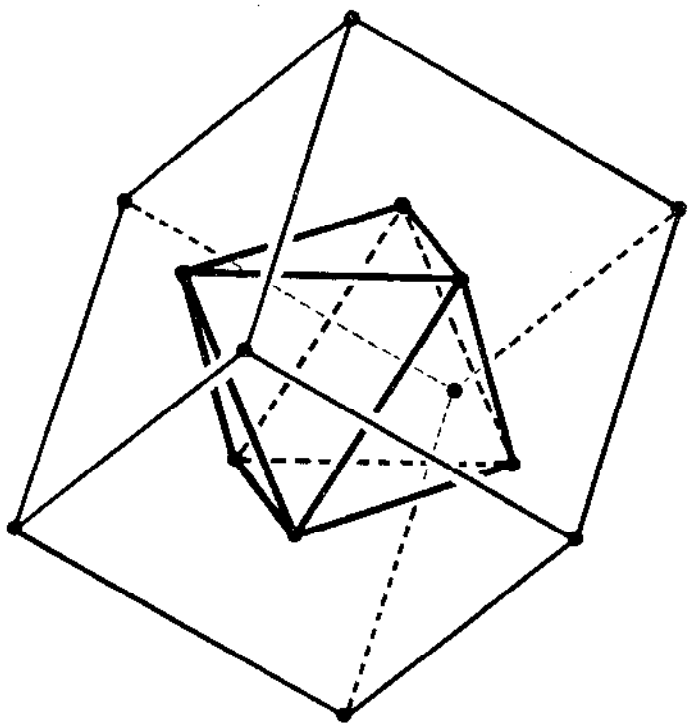
EN SUISSE ROMANDE

LA THEORIE DES GROUPES ET SES APPLICATIONS EN PHYSIQUE

par

F. REUSE
Université de Genève

H. BECK
Université de Neuchâtel



Deuxième édition, revue et corrigée, 1983

Dans les exemples précédents, les transformations étaient considérées du point de vue passif : On change de systèmes de références laissant fixes les points de l'espace, les événements ou le système physique envisagé. Par opposition, le point de vue actif consiste à considérer ces transformations comme agissant sur les points de l'espace, les événements ou le système physique. Dans ce cas, relativement à un système de référence donné, elles transforment les coordonnées d'un point dans les coordonnées du point-image. Par exemple, on peut ainsi effectuer des translations et des rotations des points de l'espace. Le groupe euclidien agissant du point de vue actif, transforme un point P de l'espace en un point P' de coordonnées $A\vec{x} + \vec{a}$, $\vec{x}$ étant les coordonnées de P.

Lorsqu'on étudie les propriétés de symétrie d'un atome, d'une molécule ou d'un cristal, c'est le point de vue actif qui est adopté. Par exemple, une symétrie moléculaire est caractérisée par une transformation de $O_3(\mathbb{R})$ qui applique la molécule (dont les ions sont assimilés à des points) sur elle-même en préservant le caractère chimique des ions. L'ensemble de ces transformations constitue un groupe et plus précisément un sous-groupe du groupe $O_3(\mathbb{R})$, appelé le groupe de symétrie de la molécule.

Similairement, le groupe de symétrie d'un cristal : le groupe cristallographique est un sous-groupe du groupe $\mathbb{E}_3^c$ dont les transformations appliquent le réseau cristallin sur lui-même en préservant le caractère chimique des ions. Comme exemple, considérons un cristal monoatomique cubique dont le réseau $\mathcal{L}$ est donné par

$$\mathcal{L} = \{\vec{x} = n^1 \vec{e}_1 + n^2 \vec{e}_2 + n^3 \vec{e}_3 \,|\, n^1, n^2, n^3 \in \mathbb{Z}\}$$

où $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ sont orthogonaux et tels que $|\vec{e}_1| = |\vec{e}_2| = |\vec{e}_3| = \ell$, ($\ell$ = longueur de l'arête d'une maille élémentaire). Les transformations de $\mathbb{E}_3^c$ appliquant $\mathcal{L}$ sur lui-même sont de la forme $(\vec{a},A)$ où $\vec{a} \in \mathcal{L}$ et A tel que $A\mathcal{L} = \mathcal{L}$. De telles transformations A de $O_3(\mathbb{R})$ forment un sous-groupe appelé le groupe ponctuel. Ici il contient 48 éléments et consiste (Exercice) en toutes les transformations engendrées par les deux rotations

$$R(\pi/2, \vec{e}_1) \qquad \text{et} \qquad R(\pi/2, \vec{e}_2)$$

et par la réflexion P_3 par rapport au plan $(\vec{e}_1, \vec{e}_2)$.

Avant de clore ce paragraphe, faisons encore les quelques remarques suivantes. D'une manière générale, les groupes que l'on rencontre en physique, s'ils ne sont pas déjà donnés comme tels, agissent dans l'espace des états des systèmes physiques. A titre d'exemple, considérons une particule classique dont l'espace des états (l'espace de phase) est constitué par l'ensemble

$$\Gamma = \{\vec{q},\vec{p}\} \equiv \mathbb{R}^6$$

où $\vec{q}$ caractérise la position et $\vec{p}$ la quantité de mouvement de cette particule. A chaque transformation $(\vec{a},A)$ du groupe $\mathbb{E}_3^c$ définissant un changement de référentiel, on peut faire correspondre une transformation $S(\vec{a},A)$ de l'espace des états Γ définie par :

$$S(\vec{a},A) : \begin{cases} \vec{q} \longmapsto \vec{q}' = A\vec{q} + \vec{a} \\ \vec{p} \longmapsto \vec{p}' = A\vec{p} \end{cases} \qquad (I.1.8)$$

Du point de vue passif, cette transformation $S(\vec{a},A)$ associe à chaque état de la particule décrit par rapport à l'ancien référentiel, l'état de la même particule décrit par rapport au nouveau.

Il est apparent que l'ensemble de telles transformations de l'espace de phase Γ vérifient la condition

$$S(\vec{a},A) \circ S(\vec{a}',A') = S((\vec{a},A) \circ (\vec{a}',A')) \qquad (I.1.9)$$

Plus généralement, nous dirons que l'espace de phase Γ d'un système classique est un G-espace si l'on a un groupe G dont les éléments agissent sur Γ par des permutations (applications bijectives)

$$S(g) : \Gamma \longrightarrow \Gamma$$

vérifiant la condition

$$S(g) \circ S(g') = S(gg') \qquad (I.1.10)$$

Si pour les systèmes classiques les considérations précédentes sont parfaitement évidentes, les systèmes quantiques en revanche demandent une discussion plus approfondie. Nous y consacrons le paragraphe suivant qui débute par un bref rappel de certains aspects de la physique quantique.

§2. Les symétries en physique quantique

En physique quantique, le système étudié est décrit à l'aide d'un espace d'Hilbert H. Plus précisément, l'ensemble $\mathcal{F}(H)$ de tous les sous-espaces fermés de H correspond à un ensemble de propriétés possibles du système, chacune associée à une (ou plusieurs) expériences, en principe réalisables, dont le résultat s'exprime par l'alternative "oui" ou "non". Pratiquement, cet ensemble de propriétés résulte d'une idéalisation du système qui dépendra de l'intérêt et des moyens d'investigation du physicien. Par exemple, il ne s'intéressera qu'au "spin" de telle particule et ne prendra pas en considération sa position, etc.

Parmi les sous-espaces fermés de H, les rayons (sous-espaces de dimension 1) décrivent tous les états possibles du système. Pratiquement, il est souvent commode de caractériser un état par un vecteur $\psi \in H$ (choisi normalisé) engendrant le rayon correspondant.

Une propriété possible du système associée à un certain sous-espace fermé $E \in \mathcal{F}(H)$ est actuellement "vraie" pour le système si dans l'expectative d'une expérience la réponse "oui" est certaine. En fait, si $\psi \in H$ décrit l'état du système, une expérience relative à la propriété E donne la réponse "oui" avec une probabilité,

$$p_E(\psi) = \|P_E \psi\|^2$$

où P_E désigne le projecteur (orthogonal) sur E. En particulier

$$E \text{ "vraie"} \quad \Leftrightarrow \quad E \ni \psi$$

et la réponse "non" est certaine ssi $E \perp \psi$ autrement dit ssi $E^{\perp} \ni \psi$.

Les considérations qui précèdent ont pour conséquences les faits suivants. Pour $E, F \in \mathcal{F}(H)$

i) $E \subset F \quad \Leftrightarrow \quad$ (E "vraie" $\Rightarrow$ F "vraie")

ii) E "vraie" et F "vraie" $\Leftrightarrow$ $E \cap F$ "vraie"

iii) E "vraie" ou F "vraie" $\Rightarrow$ $\overline{E+F}$ "vraie"

Du point de vue de la consistance, le sous-espace H correspond à la propriété triviale toujours "vraie", pour le système et le sous-espace $\{0\}$, à la propriété absurde qui ne l'est jamais.

Illustrons ce qui précède avec l'exemple bien connu d'une particule sans spin dont les états sont décrits par des fonctions d'onde $\psi(\vec{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \equiv H$.

Soit Δ un sous-ensemble (borel) de $\mathbb{R}^3$ associé à une certaine région de l'espace. Soit $\chi_\Delta(\vec{x})$ la fonction caractéristique correspondante

$$\chi_\Delta(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad \vec{x} \in \Delta \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

L'application $P_\Delta : H \longrightarrow H$ définie par :

$$\psi(\vec{x}) \longmapsto P_\Delta \psi(\vec{x}) = \chi_\Delta(\vec{x}) \psi(\vec{x})$$

est un projecteur (orthogonal) de H sur le sous-espace (fermé) E_Δ des (classes associées aux) fonctions $\phi \in H$, telles que $\phi(\vec{x}) = 0$ si $\vec{x} \notin \Delta$.

Le sous-espace E_Δ est associé ici à la propriété de la particule, d'être dans la région Δ. En effet, si l'état est donné par la fonction d'onde normalisée $\psi(\vec{x})$, alors la probabilité d'obtenir la réponse "oui" (c'est-à-dire de l'observer dans Δ) est donnée par l'expression

$$p_{E_\Delta}(\psi) = \|P_{E_\Delta} \psi\|^2 = \langle \psi, P_{E_\Delta} \psi \rangle =$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{x}) \chi_\Delta(\vec{x}) \psi(\vec{x}) d^3x = \int_\Delta |\psi(\vec{x})|^2 d^3x$$

Notamment E_Δ est "vraie", c'est-à-dire $p_{E_\Delta}(\psi) = 1$, si et seulement si $E_\Delta \ni \psi$.

En physique quantique, les observables sont usuellement définies par des opérateurs autoadjoints. Soit $A = A^+$ un tel opérateur. Supposons pour simplifier la discussion qui suit, l'espace d'Hilbert $\mathcal{H}$ de dimension finie. Dans ces conditions, la décomposition spectrale de l'opérateur A s'écrit

$$A = \sum_{\nu=1}^{n} a_\nu P_{E_\nu}$$

où a_ν, $\nu = 1, \ldots, n \leq \dim \mathcal{H}$ désigne les valeurs propres de A et E_ν les sous-espaces propres correspondants. Tous les a_ν sont réelles et les E_ν orthogonaux entre eux. L'opérateur A définit ainsi une correspondance entre certaines valeurs numériques a_ν et certains sous-espaces orthogonaux E_ν formant une "partition" de $\mathcal{H}$

$$\bigoplus_{\nu=1}^{n} E_\nu = \mathcal{H}$$

Supposons, pour fixer les idées, que cette correspondance associe à chacun des E_ν une certaine valeur de l'énergie a_ν pouvant être attribuée au système lorsque son état $\psi \in E_\nu$. On dira alors que A définit l'observable énergie du système. Dans ces conditions, lorsque E_ν est "vraie", l'énergie du système est a_ν et la réponse "non" est certaine pour toute expérience associée à une autre valeur de l'énergie. On a notamment

$$A\psi = a_\nu \psi$$

Une nouvelle observable

$$B = \sum_{\mu=1}^{m} b_\mu P_{F_\mu}$$

est dite compatible avec A si $[P_{E_\nu}, P_{F_\mu}] = 0 \quad \forall\, \nu$ et μ, ce qui évidemment implique la relation de commutation

$$[A, B] = 0$$

Ainsi les sous-espaces $E_\nu \cap F_\mu \neq \{0\}$ sont orthogonaux et forment une partition de $\mathcal{H}$. A chacun de ces sous-espaces est associé un certain couple de valeurs (a_ν, b_μ) . Autrement dit, les grandeurs physiques associées aux opérateurs A et B sont simultanément mesurables (et ceci seulement si A et B sont compatibles.)

Ce bref rappel de certains aspects de la physique quantique avait surtout pour but de nous fournir un langage faisant apparaître clairement le contenu physique de l'importante notion de symétrie que nous allons maintenant introduire et qui joue un rôle fondamental dans toute la physique.

Nous l'introduisons par le biais des considérations suivantes : D'une manière générale, la description d'un système physique nécessite certaines conventions, par exemple le choix d'un système de coordonnées (d'un référentiel) de l'espace permettant de situer le système, etc.

A deux conventions différentes, il correspond deux descriptions $\mathcal{P}(\mathcal{H}_1)$ et $\mathcal{P}(\mathcal{H}_2)$ équivalentes du même système. Autrement dit, il existe une correspondance biunivoque

$$S : \mathcal{P}(\mathcal{H}_1) \longrightarrow \mathcal{P}(\mathcal{H}_2)$$

telle que

1) $\mathcal{P}(\mathcal{H}_1) \ni E_1$ "vraie" $\Leftrightarrow$ $S(E_1) = E_2$ "vraie"

2) "non" certain pour E_1 $\Leftrightarrow$ "non" certain pour E_2 .

En conséquence, l'application S jouit des propriétés suivantes $\forall\, E_1, F_1 \in \mathcal{P}(\mathcal{H}_1)$:

i) $$E_1 \subset F_1 \quad \Leftrightarrow \quad S(E_1) \subset S(F_1)$$

puisque $S(E_1)$ "vraie" $\Leftrightarrow$ E_1 "vraie" $\Rightarrow$ F_1 "vraie" $\Leftrightarrow$ $S(F_1)$ "vraie" d'où $S(E_1) \subset S(F_1)$.

ii) $$E_1 \perp F_1 \quad \Leftrightarrow \quad S(E_1) \perp S(F_1)$$

puisque $S(E_1)$ "vraie" $\Leftrightarrow$ E_1 "vraie" $\Rightarrow$ "non" certain pour F_1 $\Leftrightarrow$ "non" certain pour $S(F_1)$ d'où $S(E_1) \perp S(F_1)$.

En particulier S préserve la compatibilité

$$[P_{E_1}, P_{F_1}] = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad [P_{S(E_1)}, P_{S(F_1)}] = 0 ,$$

comme il est aisé de le vérifier.

Une telle application bijective

$$S : \quad \mathcal{P}(H_1) \longrightarrow \mathcal{P}(H_2)$$

préservant l'inclusion (propriété i)) et l'orthogonalité (propriété ii)) s'appelle une symétrie.

Pour les symétries, Wigner)* a énoncé le théorème suivant :

Théorème (Wigner) : Toute symétrie $S : \mathcal{P}(H_1) \longrightarrow \mathcal{P}(H_2)$ est caractérisé par un opérateur unitaire ou antiunitaire

$$U : H_1 \longrightarrow H_2$$

défini à une phase près.

Autrement dit, pour toute symétrie S il existe un opérateur (anti)-unitaire U tel que $\forall\ E_1 \in \mathcal{P}(H_1)$

$$S(E_1) = \{U\psi | \psi \in E_1\} \equiv E_2$$

En particulier, l'image par S d'un état $\psi_1 \in H_1$ est l'état $U\psi_1 = \psi_2 \in H_2$.

Comme conséquence importante du théorème de Wigner, on notera la "conservation" des probabilités. En effet, pour tout $E_1 \in \mathcal{P}(H_1)$ et quel que soit l'état $\psi_1 \in H_1$ on a :

---

*) Varadarajan V.S. : "Geometry of Quantum Theory", Vol. I, Van Nostrand Company, Inc. Princeton, 1968.

$$P_{E_1}(\psi_1) = \langle \psi_1, P_{E_1} \psi_1 \rangle = \langle U\psi_1, UP_{E_1} U^{-1} U \psi_1 \rangle$$

$$= \langle \psi_2, P_{S(E_1)} \psi_2 \rangle = \langle \psi_2, P_{E_2} \psi_2 \rangle = P_{E_2}(\psi_2)$$

La démonstration du théorème précédent sort du cadre du présent exposé. Le point essentiel de la démonstration consiste à prouver que toute symétrie S est caractérisée par une application $U : H_1 \longrightarrow H_2$ additive, c'est-à-dire telle que

$$U(\psi + \phi) = U(\psi) + U(\phi)$$

Ce point étant acquis, l'(anti)unitarité se démontre aisément.

Dans le présent contexte, nous nous contenterons de constater que tout opérateur (anti)unitaire définit bien une symétrie, ce qui se voit sans difficulté.

Illustrons maintenant ce qui précède par l'exemple suivant d'une particule sans spin décrite par rapport à deux systèmes de coordonnées cartésiennes $\mathcal{R}$ et $\mathcal{R}'$ reliés par une transformation

$$(\vec{a}, R) : \quad \vec{x} \longmapsto \vec{x}' = R\vec{x} + \vec{a}$$

du groupe euclidien $\mathbb{E}_3$. Ici $\vec{x}$ et $\vec{x}'$ désignent un même point géométrique de l'espace dans $\mathcal{R}$ et $\mathcal{R}'$ respectivement.

Relativement à chacun des systèmes de coordonnées, la particule est décrite à l'aide de l'espace d'Hilbert des (classes de) fonctions d'onde $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$.

Soient alors ψ et ψ' deux fonctions d'onde dans $\mathcal{R}$ et $\mathcal{R}'$ décrivant une même particule. Supposons (naïvement) que

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x})$$

Il en résulte immédiatement la relation suivante

$$\psi'(\vec{x}') = \psi(R^{-1}(\vec{x}' - \vec{a}))$$

qui définit une application $\psi \longmapsto \psi'$ de $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ sur lui-même. Cette application qui met en correspondance les deux descriptions relativement à $\mathcal{R}$ et $\mathcal{R}'$ de la particule doit se traduire par une symétrie. Or, en effet, cette application $\psi \longmapsto \psi' = U\psi$ définit bien un opérateur unitaire de $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ car $\forall\, \psi$ et ϕ on a :

$$\langle \psi', \phi' \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi'^*(\vec{x}')\, \phi'(\vec{x}')\, d^3x' =$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(R^{-1}(\vec{x}' - \vec{a}))\, \phi(R^{-1}(\vec{x}' - \vec{a}))\, d^3x' =$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{x})\, \phi(\vec{x})\, d^3x = \langle \psi, \phi \rangle$$

où l'on a effectué le changement de variables d'intégration de $\vec{x}'$ en $\vec{x} = R^{-1}(\vec{x}' - \vec{a})$ et utilisé le fait que le jacobien correspondant vaut 1.

Notons $U(\vec{a},R)$ cet opérateur unitaire.

$$\psi'(\vec{x}) = U(\vec{a},R)\psi(\vec{x}) \equiv \psi(R^{-1}(\vec{x} - \vec{a})) \qquad (I.2.1)$$

Considérons maintenant dans la description relative à $\mathcal{R}$ un sous-espace E_Δ associé à une certaine région de l'espace qui correspond dans les coordonnées $\mathcal{R}$ à une partie (borel) $\Delta \subset \mathbb{R}^3$. Quelle est l'image de E_Δ par la symétrie $S_{(\vec{a},R)}$ définie par $U(\vec{a},R)$? Nous avons :

$$S_{(\vec{a},R)}(E_\Delta) = \{U(\vec{a},R)\psi \,|\, \psi \in E_\Delta\} = U(\vec{a},R)E_\Delta = E_{\Delta'},$$

où $\Delta' = \{R\vec{x} + \vec{a} \,|\, \vec{x} \in \Delta\} \equiv R\Delta + \vec{a}$ désigne la même région de l'espace que Δ mais cette fois dans les coordonnées $\mathcal{R}'$. Ici, trivialement, E_Δ "vraie" ssi $E_{\Delta'}$ "vraie", etc.

$$\begin{array}{lccc} (\mathcal{R}): & \mathbb{R}^3 \supset \Delta & \longrightarrow & E_\Delta \subset \mathcal{S}(L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)) \\ & \Big\downarrow (\vec{a},R) & & \Big\downarrow S_{(\vec{a},R)} \\ (\mathcal{R}'): & \mathbb{R}^3 \supset \Delta' & \longrightarrow & E_{\Delta'} \subset \mathcal{S}(L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)) \end{array}$$

Considérons toujours dans le même exemple deux transformations $(\vec{a}_1,R_1)$ et $(\vec{a}_2,R_2)$ du groupe euclidien. Alors $\forall\, \psi$

$$(U(\vec{a}_1,R_1)U(\vec{a}_2,R_2)\psi)(\vec{x}) = (U(\vec{a}_2,R_2)\psi)(R_1^{-1}(\vec{x} - \vec{a}_1))$$

$$= \psi(R_2^{-1}(R_1^{-1}(\vec{x} - \vec{a}_1) - \vec{a}_2)) = \psi(R_2^{-1}R_1^{-1}(\vec{x} - \vec{a}_1 - R_1\vec{a}_2))$$

$$= U(\vec{a}_1 + R_1\vec{a}_2, R_1R_2)\psi(\vec{x}) = U((\vec{a}_1,R_1)(\vec{a}_2,R_2))\psi(\vec{x})$$

Autrement dit, la correspondance

$$\mathbb{E}_3 \ni (\vec{a},R) \longmapsto U(\vec{a},R)$$

est telle que le produit des opérateurs associés à deux transformations de $\mathbb{E}_3$ coïncide, avec l'opérateur unitaire associé, au produit de ces transformations.

$$U(\vec{a}_1,R_1)U(\vec{a}_2,R_2) = U((\vec{a}_1,R_1)(\vec{a}_2,R_2)) \qquad (I.2.2)$$

Une telle application U de $\mathbb{E}_3$ dans l'ensemble des opérateurs unitaires d'un espace d'Hilbert H s'appelle une <u>représentation unitaire</u> du groupe $\mathbb{E}_3$ dans H.

La relation (I.2.2) ci-dessus traduit le fait que les symétries correspondantes $S(\vec{a},R)$ satisfont la condition,

$$S(\vec{a}_1,R_1) \circ S(\vec{a}_2,R_2) = S((\vec{a}_1,R_1)(\vec{a}_2,R_2)) \qquad (I.2.3)$$

qui veut que la composition des symétries associées à deux changements successifs de systèmes de coordonnées

$$\mathcal{R} \xrightarrow{(\vec{a}_2,R_2)} \mathcal{R}' \xrightarrow{(\vec{a}_1,R_1)} \mathcal{R}''$$

soit identique à la symétrie associée au composé de ceux-ci

$$\mathcal{R} \xrightarrow{(\vec{a}_2,R_2)(\vec{a}_1,R_1)} \mathcal{R}''$$

comme l'exige l'interprétation physique.

Inversément, la condition (I.2.3) qui bien entendu doit être satisfaite quel que soit le système physique considéré (autre type de particule, systèmes de plusieurs particules, etc.), n'implique pas dans le cas général que des opérateurs $U(\vec{a},R)$ caractérisant les symétries $S(\vec{a},R)$ vérifient la relation (I.2.2). En effet, selon le théorème de Wigner, une symétrie donnée caractérise un opérateur (anti)unitaire à une phase près. En conséquence, la condition (I.2.3) implique en toute généralité que

$$U(\vec{a}_1,R_1)U(\vec{a}_2,R_2) = \omega((\vec{a}_1,R_1),\ (\vec{a}_2,R_2))U((\vec{a}_1,R_1)(\vec{a}_2,R_2)) \qquad (I.2.4)$$

où ω désigne un facteur de phase qui "a priori" dépendra de $(\vec{a}_1,R_1)$ et $(\vec{a}_2,R_2)$.

Dans ce cas plus général, l'application U de $\mathbb{E}_3$ dans les opérateurs (anti)unitaires de H constitue une représentation <u>à une phase près</u> de $\mathbb{E}_3$ dans H. Nous dirons aussi que U constitue une représentation <u>projective</u> de $\mathbb{E}_3$ dans H, <u>unitaire</u> si de plus tous les opérateurs $U(\vec{a},R)$ sont unitaires.

Avec l'exemple précédent de la particule sans spin, nous étions en présence d'un cas où les opérateurs $U(\vec{a},R)$ pouvaient être choisis (en utilisant l'arbitraire de la phase) de telle manière que tous les facteurs ω soient égaux à 1. Ce fait est d'ailleurs propre aux particules de spin <u>entier</u>.

Un exemple de systèmes où un tel choix n'est plus possible est celui des particules dont le spin est <u>demi-entier</u>. Nous considérerons plus loin, à titre illustratif, le cas de la particule de spin 1/2.

Au préalable, formulons quelques remarques d'ordre général concernant les représentation projectives.

Dans ce but, considérons un groupe G et une représentation projective U de ce groupe dans un espace d'Hilbert H.

En vertu de l'associativité de la loi de groupe et de la condition (I.2.4), nous avons, d'une part,

$$U(g_1)U(g_2)U(g_3) = \omega(g_1,g_2)U(g_1g_2)U(g_3)$$

$$= \omega(g_1,g_2)\omega(g_1g_2,g_3)U(g_1g_2g_3), \qquad \forall g_1,g_2,g_3 \in G$$

et, d'autre part,

$$U(g_1)U(g_2)U(g_3) = U(g_1)\omega(g_2,g_3)U(g_2g_3)$$

$$= \omega^{(*)}(g_2,g_3)\omega(g_1,g_2g_3)U(g_1g_2g_3)$$

où (*) est la conjugaison complexe si $U(g_1)$ est antiunitaire.

En conséquence, les facteurs de phase ω vérifient la relation suivante :

$$\omega(g_1,g_2)\omega(g_1g_2,g_3) = \omega(g_1,g_2g_3)\omega^{(*)}(g_2,g_3) \qquad (I.2.5)$$

Pour un autre choix

$$U'(g) = X(g)\,U(g), \qquad g \in G$$

(où $X(g)$ est un facteur de phase) des opérateurs représentatifs des symétries $S(g)$, les nouveaux facteurs ω' sont donnés par la relation

$$\omega'(g_1,g_2) = \omega(g_1,g_2)\,\frac{X(g_1)\,X^{(*)}(g_2)}{X(g_1,g_2)} \qquad (I.2.6)$$

et lorsqu'il existe un choix des $X(g)$, $g \in G$ tel que $\omega'(g_1,g_2) = 1$ quels que soient g_1 et $g_2 \in G$, le facteur $\omega(g_1,g_2)$ est dit <u>trivial</u>.

Une autre remarque importante dans les applications concerne les représentations projectives des groupes "continus" (précisément, topologiques et en particulier de Lie, (voir Chapitre II, §5)) comme par exemple le

groupe euclidien $\mathbb{E}_3$. En physique, on ne considère que les représentations projectives pour lesquelles le module $|\langle\psi,U(g)\phi\rangle|$ est une fonction continue sur le groupe pour tous $\psi,\phi \in \mathcal{H}$. D'une manière plus imagée, ceci revient à exiger que les "probabilités de transition" $|\langle\psi,U(g)\psi\rangle|^2$ soient des fonctions continues des paramètres du groupe si ce dernier est un groupe de Lie (comme ce sera toujours le cas pour nous). Dans ces conditions, on énonce alors le théorème suivant : Toute représentation projective "continue" (au sens précédent) d'un groupe connexe est unitaire.

La notion de connexité pour les groupes de Lie est discutée à la fin du §5, Chapitre II. Pour l'instant, nous nous bornerons à citer le groupe des rotations $SO_3(\mathbb{R})$, le groupe euclidien $\mathbb{E}_3$, le groupe propre orthochrone de Lorentz $L_+^\uparrow$, le groupe propre de Poincaré et tous les groupes $SU(n)$ comme des exemples de groupes connexes d'intérêt évident en physique.

Complétons encore ce qui précède en notant le fait suivant. Chaque fois que le groupe G est tel que pour tout $g \in G$ il existe $h \in G$ tel que $h^2 = g$ alors tous les opérateurs $U(g)$ de la représentation projective sont unitaires.

En effet, dans ce cas là

$$U(g) = \omega(h,h)U(h)U(h), \qquad \forall g \in G$$

Or que $U(h)$ soit unitaire ou antiunitaire, $U(g)$ sera toujours unitaire.

Considérons maintenant un exemple (très important pour la suite) de représentation unitaire projective non triviale. Le groupe qui sera considéré ici est celui des rotations et l'exemple que nous proposons s'obtient tout naturellement en considérant les rotations d'un spin 1/2 décrit à l'aide de l'espace d'Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

Soit $\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi < 2\pi$ un vecteur unité caractérisant une direction de l'espace. Considérons l'opérateur hermitien $\vec{n}\vec{\sigma}$ de $\mathbb{C}^2$ où $\vec{\sigma}$ désigne les trois matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Ses valeurs propres sont ± 1. Le vecteur propre normalisé $\psi_{\vec{n}}$ (défini à une phase près) associé à la valeur propre $+1$,

$$\vec{n}\vec{\sigma}\,\psi_{\vec{n}} = \psi_{\vec{n}} \qquad (I.2.7)$$

décrit un état pour lequel le spin 1/2 est orienté selon $\vec{n}$. Une expression pour $\psi_{\vec{n}}$ est aisément obtenue en résolvant l'équation (I.2.7). On trouve, à une phase près,

$$\psi_{\vec{n}} = \begin{bmatrix} \cos\theta/2\, e^{-i\phi/2} \\ \sin\theta/2\, e^{i\phi/2} \end{bmatrix}$$

Il est alors bien évident que n'importe quel vecteur normalisé $\psi \in \mathbb{C}^2$, s'écrit univoquement sous la forme ci-dessus, moyennant un choix judicieux de sa phase. Autrement dit, chaque état correspond à une direction $\vec{n}$ du spin. Il y a une correspondance biunivoque entre les états du spin et les directions de l'espace. En particulier à des direction opposées du spin correspondent des états orthogonaux

$$\psi_{-\vec{n}} \perp \psi_{\vec{n}}, \qquad \forall \vec{n}$$

Dans $\mathcal{P}(\mathbb{C}^2)$, hormis les sous-espaces triviaux $\{0\}$ et $\mathbb{C}^2$, on a les rayons $E_{\vec{n}}$ engendrés par chaque $\psi_{\vec{n}}$. Faire subir au spin une rotation $R \in SO_3(\mathbb{R})$ revient à transformer son état $\psi_{\vec{n}}$ en l'état $\psi_{R\vec{n}}$. Cette correspondance se traduit par une symétrie

$$S_R : E_{\vec{n}} \longmapsto E_{R\vec{n}}$$

l'orthogonalité étant préservée par le fait que les images par rotation de deux directions opposées restent opposées.

$$S_R(E_{\vec{n}}^\perp) = S_R(E_{-\vec{n}}) = E_{R(-\vec{n})} = E_{-R\vec{n}} = E_{R\vec{n}}^\perp = S_R(E_{\vec{n}})^\perp$$

En vertu du théorème de Wigner, il existe donc un opérateur unitaire (le cas antiunitaire étant exclu) noté D(R), tel que $\forall \vec{n}$,

$$D(R)\psi_{\vec{n}} = \psi_{R\vec{n}} \qquad \text{à une phase près.}$$

Vu la définition de $\psi_{\vec{n}}$, nous avons :

$$D(R)\vec{n}\vec{\sigma}\,\psi_{\vec{n}} = D(R)\psi_{\vec{n}} = \vec{\sigma}(R\vec{n})D(R)\psi_{\vec{n}}$$

Or, l'égalité entre le premier et le dernier membre est encore vraie lorsqu'on remplace $\psi_{\vec{n}}$ par $\psi_{-\vec{n}}$, qui rappelons-le, est orthogonal à $\psi_{\vec{n}}$.

$$D(R)\vec{n}\vec{\sigma}\,\psi_{-\vec{n}} = -D(R)\psi_{-\vec{n}} = \vec{\sigma}(R\vec{n})D(R)\psi_{-\vec{n}}$$

En conséquence, elle a lieu pour tout $\psi \in \mathbb{C}^2$, d'où la relation

$$D(R)\vec{n}\vec{\sigma} = \vec{\sigma}(R\vec{n})D(R)$$

qui, ayant lieu quel que soit $\vec{n}$, implique finalement que

$$D(R)\sigma_j D(R)^{-1} = \sigma_k R^k{}_j \qquad \text{(I.2.8)}$$

où $R^k{}_j$ désignent les éléments de matrice de la rotation R.

Inversément, tout opérateur unitaire D(R) vérifiant la relation (I.2.8) applique, à une phase près, chaque $\psi_{\vec{n}}$ sur $\psi_{R\vec{n}}$. Il est donc évident que tous les opérateurs unitaires D(R) qui vérifient (I.2.8) pour R donné ne vont différer que par une phase puisqu'ils définissent tous la même symétrie S_R. Une solution de (I.2.8) est donnée par l'expression

$$D(R) = \exp(-\frac{i}{2}\vec{\omega}\vec{\sigma}) \qquad \text{(I.2.9)}$$

où $\vec{\omega} = \alpha\vec{k}$, le vecteur unité $\vec{k}$ caractérisant l'axe de la rotation R et $\alpha \in [0,\pi]$ son angle. On notera que le vecteur $\vec{\omega}$ est univoquement défini par la rotation R sauf si cette dernière est une rotation d'angle π auquel cas on a deux vecteurs $\vec{\omega}$ qui sont opposés. Moyennant un critère

qui lève cette ambiguité de choix, l'expression (I.2.9) définit une application du groupe des rotations dans les opérateurs unitaires de $\mathbb{C}^2$ qui constitue une représentation unitaire projective puisque

$$S_{R_1} \circ S_{R_2} = S_{R_1R_2}$$

ou encore (à une phase près)

$$D(R_1)D(R_2)\psi_{\vec{n}} = D(R_1)\psi_{R_2\vec{n}} = \psi_{R_1R_2\vec{n}} = D(R_1R_2)\psi_{\vec{n}}$$

Ainsi

$$D(R_1)D(R_2) = \omega(R_1,R_2)D(R_1R_2) \qquad \text{(I.2.10)}$$

où $\omega(R_1,R_2)$ est un facteur de phase prenant les valeurs +1 et -1 comme nous allons le vérifier. Il résulte en effet de la relation précédente que

$$\det D(R_1)\cdot\det D(R_2) = \omega^2(R_1,R_2)\det D(R_1R_2)$$

Or $\det D(R) = \exp \mathrm{Tr}(-i\frac{1}{2}\vec{\omega}\vec{\sigma}) = 1$, d'où $\omega^2(R_1,R_2) = 1$.

Pour R_1 ou R_2 l'identité, on voit dans la relation (I.2.10) que $\omega(\mathbb{1},R_2) = \omega(R_1,\mathbb{1}) = 1$ car D(identité) = $\mathbb{1}$.

Pour $R_1 = R_2 = R(\alpha,\vec{k})$, on a $D(R_1) = D(R_2) = \pm i\vec{k}\vec{\sigma}$ selon la convention choisie. Dans les deux cas $D(R_1)D(R_2) = -\mathbb{1} = \omega(R_1,R_2)D(R_1R_2) = \omega(R_1,R_2)\mathbb{1}$ puisque R_1R_2 = identité. Il en résulte $\omega(R_1,R_2) = -1$.

Le facteur de phase $\omega(R_1,R_2)$ prend bien les deux valeurs +1 et -1, et il est impossible par un choix approprié d'une phase X(R) dans la définition de D(R) d'éliminer la valeur -1. Ainsi ω est non trivial et l'application $R \longrightarrow D(R)$ une vraie représentation projective.

Considérons maintenant l'exemple d'une particule de spin 1/2. Ses états sont décrits par des fonctions d'onde à deux composantes de l'espace d'Hilbert

$$H = \mathbb{C}^2 \otimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$$

Un changement de système de coordonnées

$$\mathcal{R} \xrightarrow{(\vec{a},R)} \mathcal{R}' , \qquad (\vec{a},R) \in \mathbb{E}_3$$

se traduit dans la description des états par une symétrie qui, par analogie avec le cas sans spin, est définie par l'opérateur unitaire $U(\vec{a},R)$ de $\mathbb{C}^2 \bigotimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$:

$$\psi'(\vec{x}) = U(\vec{a},R)\psi(\vec{x}) = D(R)\psi(R^{-1}(\vec{x}-\vec{a})) \qquad (I.2.11)$$

où D(R) est la représentation projective de $SO_3(\mathbb{R})$ dans $\mathbb{C}^2$ considérée précédemment (ici interprétée du point de vue passif). L'unitarité, comme dans le cas sans spin, se vérifie aisément. De même on vérifie sans difficulté que l'application

$$(\vec{a},R) \longmapsto U(\vec{a},R)$$

constitue une représentation unitaire projective qui, vu les remarques précédentes concernant D(R), apparaît comme non triviale. On notera encore dans cet exemple que les translations $(\vec{a},\mathbb{1})$ agissent trivialement sur la partie spinorielle de la fonction d'onde.

Après avoir examiné deux exemples physiquement importants de représentations unitaires projectives (spin 0 et 1/2), considérons un exemple de symétrie associée à un opérateur antiunitaire. L'exemple choisi est physiquement très important et connu sous le nom de "renversement du temps". Nous le présentons pour la particule de spin 1/2. Il correspond à une symétrie qui ne "change" pas la position mais qui inverse la quantité de mouvement et l'orientation du spin. Autrement dit, notant $\vec{q}$ et $\vec{p}$ les opérateurs autoadjoints

$$\vec{q}\psi(\vec{x}) = \vec{x}\psi(\vec{x}), \quad \vec{p}\psi(\vec{x}) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{x})$$

associés à la position et la quantité de mouvement, l'opérateur (anti)-unitaire T qui caractérise le "renversement du temps" doit vérifier les relations

$$\left.\begin{aligned} T\vec{q}T^{-1} &= \vec{q} \\ T\vec{p}T^{-1} &= -\vec{p} \\ T\vec{\sigma}T^{-1} &= -\vec{\sigma} \end{aligned}\right\} \qquad (I.2.12)$$

La solution (à une phase près) de ce problème est l'opérateur

$$T : \psi \longmapsto T\psi(\vec{x}) = \sigma_2\psi^*(\vec{x}) \qquad (I.2.13)$$

dont l'antiunitarité est évidente. En outre

$$T^{-1} = -T$$

puisque $\forall \psi \in \mathcal{H}$

$$(T(T\psi))(\vec{x}) = \sigma_2(T\psi(\vec{x}))^* = \sigma_2(\sigma_2\psi^*(\vec{x}))^* = -\psi(\vec{x})$$

Finalement nous avons bien

i) $$(T\vec{q}T^{-1}\psi)(\vec{x}) = -(T\vec{q}T\psi)(\vec{x}) = -\sigma_2(\vec{q}T\psi(\vec{x}))^*$$
$$= -\sigma_2(\vec{x}\sigma_2\psi^*(\vec{x}))^* = -\sigma_2\vec{x}\sigma_2^*\psi(\vec{x}) = \vec{x}\psi(\vec{x})$$
$$= \vec{q}\psi(\vec{x})$$

ii) $$(T\vec{p}T^{-1}\psi)(\vec{x}) = -(T\vec{p}T\psi)(\vec{x}) = -\sigma_2(-i\hbar\vec{\nabla}\sigma_2\psi^*(\vec{x}))^*$$
$$= -\sigma_2 i\hbar\vec{\nabla}\sigma_2^*\psi(\vec{x}) = i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{x}) = -\vec{p}\psi(\vec{x})$$

iii) $$(T\vec{\sigma}T^{-1}\psi)(\vec{x}) = -(T\vec{\sigma}T\psi)(\vec{x}) = -\sigma_2(\vec{\sigma}\sigma_2\psi^*(\vec{x}))^*$$
$$= -\sigma_2\vec{\sigma}^*\sigma_2^*\psi(\vec{x}) = -\vec{\sigma}\psi(\vec{x})$$

car $\vec{\sigma}^* = (\sigma_1, -\sigma_2, \sigma_3)$. Notons encore que la correspondance

$$\{1, -1\} \longmapsto \{\mathbb{1}, T\}$$

constitue une représentation projective non triviale (et non unitaire) du groupe à deux éléments $(1, -1)$ dans H puisque $T^2 = -\mathbb{1}$.

Le "renversement du temps" pour une particule de spin 0 est manifestement décrit par l'opérateur antiunitaire $T\psi(\vec{x}) = \psi^*(\vec{x})$ (à une phase près).