Zeitschrift: Archives des sciences [1948-1980]

Herausgeber: Société de Physique et d'Histoire Naturelle de Genève

Band: 18 (1965)

Heft: 3

Artikel: Sur l'étude des transitions dans les sytèmes quantiques par l'emploi de «superopérateurs»

Autor: Ravatin, Jacques / Mesnard, Guy

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-739217

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 07.08.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

SUR L'ÉTUDE DES TRANSITIONS DANS LES SYSTÈMES QUANTIQUES PAR L'EMPLOI DE « SUPEROPÉRATEURS »

PAR

Jacques RAVATIN et Guy MESNARD

INTRODUCTION

Une méthode de calcul s'appuyant sur la notion de super-opérateur [1, 2] a été présentée récemment par Banwell et Primas [3] et appliquée à la résonance magnétique nucléaire.

Banwell et Primas ont traité des problèmes dits d'ordre 1 et 2 dans lesquels les algèbres d'opérateurs sont construites sur des espaces vectoriels de dimensions 1 et 2 [4, 5, 6]. Ils utilisent le superopérateur $\overline{\mathscr{K}} = \overline{\mathscr{H}^D} - \rho$, ρ appartenant au corps des complexes et $\overline{\mathscr{H}^D}$ étant le superopérateur de dérivation correspondant à l'hamiltonien $\mathscr{H}$ (les opérateurs seront désignés par des lettres majuscules et les superopérateurs par des lettres majuscules surlignées). Ceci ne permet pas de traiter les problèmes d'ordre 3 et plus.

Nous allons envisager le problème d'ordre 3.

On part des développements représentés par l'équation matricielle:

$$\overline{\mathscr{H}^D}\begin{pmatrix}\mathscr{A}\\ \mathscr{B}\\ \mathscr{C}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha_1 & \beta_1 & \gamma_1\\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2\\ \alpha_3 & \beta_3 & \gamma_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathscr{A}\\ \mathscr{B}\\ \mathscr{C}\end{pmatrix}, \tag{1}$$

les éléments tels que α_i appartenant au corps des complexes et l'on se propose, en vue du calcul de fonctions de corrélation, d'évaluer $e^{i\overline{\mathscr{H}^D}t}\,\mathscr{X}$ ($\mathscr{X}$ désignant $\mathscr{A}$, $\mathscr{B}$ ou $\mathscr{C}$), par application de la formule de Hausdorff [7], qui exige le calcul de $(\overline{\mathscr{H}^D})^n\,\mathscr{X}$.

MÉTHODE DE CALCUL

Nous introduirons le superopérateur $\overline{\mathscr{K}} = \overline{\mathscr{H}^D} - \overline{\mathscr{E}_A} - \overline{\mathscr{E}_B} - \overline{\mathscr{E}_C}$, les quantités $\overline{\mathscr{E}_x}$ (x désignant A, B ou C) étant telles que

$$\overline{\mathscr{E}_x}\,\mathscr{X} = m_x\,\delta_{xx'}\,\mathscr{X}'\,, \tag{2}$$

où δ est le symbole de Kronecker.
En posant

$$\alpha_1 - m_A = \mu \quad \beta_2 - m_B = \nu \quad \gamma_3 - m_C = \tau \tag{3}$$

l'équation (1) se ramène à

$$\overline{\mathscr{K}}\begin{pmatrix}\mathscr{A}\\ \mathscr{B}\\ \mathscr{C}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mu & \beta_1 & \gamma_1\\ \alpha_2 & \nu & \gamma_2\\ \alpha_3 & \beta_3 & \tau\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathscr{A}\\ \mathscr{B}\\ \mathscr{C}\end{pmatrix}. \tag{4}$$

Nous allons voir que l'on peut choisir les paramètres de façon que l'on ait soit

$$\overline{\mathscr{K}}^2\,\mathscr{X} = \lambda_x^2\,\mathscr{X}\,, \tag{5}$$

soit

$$\overline{\mathscr{K}}^3\,\mathscr{X} = \lambda_x^3\,\mathscr{X}\,, \tag{6}$$

ce qui facilite ensuite les calculs.

Cas de l'équation (5)

L'action de $\overline{\mathscr{K}}$ sur les deux membres de l'équation (4) donne pour les $\overline{\mathscr{K}}^2\,\mathscr{X}$ un système d'équations qui, après identification avec la forme (5), conduit à l'ensemble des relations:

$$\left.\begin{aligned}
(\mu+\nu)\,\beta_1 + \gamma_1\,\beta_3 &= 0\\
(\mu+\nu)\,\alpha_2 + \gamma_2\,\alpha_3 &= 0\\
(\mu+\tau)\,\gamma_1 + \beta_1\,\gamma_2 &= 0\\
(\mu+\tau)\,\alpha_3 + \beta_3\,\alpha_2 &= 0\\
(\nu+\tau)\,\gamma_2 + \alpha_2\,\gamma_1 &= 0\\
(\nu+\tau)\,\beta_3 + \alpha_3\,\beta_1 &= 0
\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

ce qui entraîne, si $\beta_1, \alpha_2, \gamma_1, \alpha_3, \gamma_2, \beta_3$ sont différents de zéro (nous excluons les cas particuliers, que l'on pourra traiter directement, où l'une au moins de ces quantités est nulle):

$$\frac{\beta_3}{\alpha_3}\,\frac{\alpha_2}{\gamma_2}\,\frac{\gamma_1}{\beta_1} = 1\,. \tag{8}$$

On voit aisément que la relation (8) est la condition nécessaire et suffisante pour que l'on ait l'équation (5).

On a alors

$$\left.\begin{aligned} \mu + \nu &= -\frac{\gamma_1 \beta_3}{\beta_1} \\ \mu + \tau &= -\frac{\beta_1 \gamma_2}{\gamma_1} \\ \nu + \tau &= -\frac{\alpha_2 \gamma_1}{\gamma_2} \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

d'où l'on tire

$$\left.\begin{aligned} \mu &= \tfrac{1}{2}\left(\frac{\alpha_2 \gamma_1}{\gamma_2} - \frac{\gamma_1 \beta_3}{\beta_1} - \frac{\beta_1 \gamma_2}{\gamma_1}\right) \\ \nu &= \tfrac{1}{2}\left(\frac{\beta_1 \gamma_2}{\gamma_1} - \frac{\gamma_1 \beta_3}{\beta_1} - \frac{\alpha_2 \gamma_1}{\gamma_2}\right) \\ \tau &= \tfrac{1}{2}\left(\frac{\gamma_1 \beta_3}{\beta_1} - \frac{\beta_1 \gamma_3}{\gamma_1} - \frac{\alpha_2 \gamma_1}{\gamma_2}\right) \end{aligned}\right\}. \tag{10}$$

Les superopérateurs $\overline{\mathscr{K}}$ étant associatifs, on doit avoir en outre

$$\lambda_A = \lambda_B = \lambda_C = \lambda\,, \tag{11}$$

ce qui est bien vérifié par le calcul direct.

On obtient alors facilement les $e^{i\overline{\mathscr{K}D}t}\,\mathscr{X}$. Par exemple:

$$\begin{aligned} e^{i\overline{\mathscr{K}D}t}\,\mathscr{A} &= e^{im_A t} \cos \lambda t \times \mathscr{A} \\ &+ \frac{i}{\lambda}\left(\mu e^{im_A t}\,\mathscr{A} \sin \lambda t + \beta_1 e^{im_B t}\,\mathscr{B} \sin \lambda t + \gamma_1 e^{im_C t}\,\mathscr{C} \sin \lambda t\right), \end{aligned} \tag{12}$$

où m_A, m_B et m_C sont donnés par les équations (3) et (10) et où

$$\lambda^2 = \mu^2 + \beta_1 \alpha_2 + \gamma_1 \alpha_3 = \alpha_2 \beta_1 + \nu^2 + \gamma_2 \beta_3 = \alpha_3 \gamma_1 + \beta_3 \gamma_2 + \tau^2\,.$$

Cas de l'équation (6)

On calcule les $\overline{\mathscr{K}}^3\,\mathscr{X}$ et on identifie avec la forme (6).

Posons:

$$\left.\begin{aligned} S &= \mu + \nu + \tau \\ A(x, y) &= x^2 + xy + y^2 \\ P &= \beta_1 \alpha_2 + \gamma_1 \alpha_3 + \gamma_2 \beta_3 \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

On est conduit aux formules:

$$\left.\begin{aligned}
A(\mu, \nu) + S\frac{\gamma_2\,\alpha_3}{\alpha_2} + P &= 0\\
A(\mu, \nu) + S\frac{\gamma_1\,\beta_3}{\beta_1} + P &= 0\\
A(\mu, \tau) + S\frac{\beta_3\,\alpha_2}{\alpha_3} + P &= 0\\
A(\mu, \tau) + S\frac{\beta_1\,\gamma_2}{\gamma_1} + P &= 0\\
A(\tau, \nu) + S\frac{\alpha_2\,\gamma_1}{\gamma_2} + P &= 0\\
A(\tau, \nu) + S\frac{\alpha_3\,\beta_1}{\beta_2} + P &= 0
\end{aligned}\right\}. \tag{14}$$

On voit immédiatement que, si la relation (8) est vérifiée, on retrouve le résultat (5). Sinon, en prenant toujours α_2, β_1, γ_2, γ_1, β_3 et α_3 différents de zéro, l'ensemble des équations (14) se ramène à

$$S = 0 \text{ et } P + \mu^2 + \mu\nu + \nu^2 = 0\,. \tag{15}$$

On peut se fixer par exemple τ à volonté et en déduire μ et ν. Un calcul assez long donne alors sans difficulté:

$$\begin{aligned}
e^{i\overline{\mathscr{H}D}t}\,\mathscr{A} = \frac{1}{\lambda^2}\big[(\mu^2+\beta_1\,\alpha_2+\gamma_1\,\alpha_3)\,e^{im_A t}\,\mathscr{A} + (\mu\beta_1+\nu\beta_1+\gamma_1\,\beta_3)\,\mathscr{B}\,e^{im_B t}\\
+ (\mu\gamma_1+\beta_1\,\gamma_2+\gamma_1\,\tau)\,e^{im_C t}\,\mathscr{C}\big]\big[F_1(\lambda t) + iG_1(\lambda t)\big]\\
+ \frac{1}{\lambda}\big[\mu e^{im_A t}\,\mathscr{A} + \beta_1\,e^{im_B t}\,\mathscr{B} + \gamma_1\,e^{im_C t}\,\mathscr{C}\big]\big[F_2(\lambda t) + iG_2(\lambda t)\big]\\
+ e^{im_A t}\,\mathscr{A}\big[F_3(\lambda t) + iG_3(\lambda t)\big],
\end{aligned} \tag{16}$$

μ, ν, τ, m_A, m_B, et m_C étant donnés par les formules (15) et λ par la formule (6) explicitée, et en posant:

$$F_1(\lambda t) = -\tfrac{1}{3}\left(\cos\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{ch}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t + \sqrt{3}\sin\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{sh}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t - \cos\lambda t\right)$$

$$G_1(\lambda t) = -\tfrac{1}{3}\left(-\sin\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{ch}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t + \sqrt{3}\cos\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{sh}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t - \sin\lambda t\right)$$

$$F_2(\lambda t) = -\tfrac{1}{3}\left(\cos\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{ch}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t - \sqrt{3}\sin\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{sh}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t - \cos\lambda t\right)$$

$$G_2(\lambda t) = \tfrac{1}{3}\left(\sin\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{ch}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t + \sqrt{3}\cos\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{sh}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t + \sin\lambda t\right)$$

$$F_3(\lambda t) = \tfrac{1}{3}\left(2\cos\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{ch}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t + \cos\lambda t\right)$$

$$G_3(\lambda t) = -\tfrac{1}{3}\left(2\sin\frac{\lambda t}{2}\,\mathrm{ch}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\lambda t - \sin\lambda t\right).$$

Applications

1) Considérons l'algèbre associative des opérateurs $\mathscr{F}_x$, $\mathscr{F}_y$ et $\mathscr{F}_z$, projections d'un moment cinétique. Elle possède une structure d'algèbre de Lie [8], par la définition du crochet $[\mathscr{F}_x, \mathscr{F}_y] = i\,\mathscr{F}_z$.

Un hamiltonien de la forme $\mathscr{H} = a\mathscr{F}_x + b\mathscr{F}_y + c\mathscr{F}_z$ intervient dans de nombreux problèmes de physique atomique.

L'évaluation d'une fonction de corrélation se ramène au calcul d'expressions telles que

$$e^{i\mathscr{H}t}\,\mathscr{F}_x\,e^{-i\mathscr{H}t} = e^{i\overline{\mathscr{H}D}t}\,\mathscr{F}_x\,,$$

ce qui se traite par la formule (16) en prenant

$$\mathscr{A} = \mathscr{F}_x\,,\quad \mathscr{B} = \mathscr{F}_y\,,\quad \mathscr{C} = \mathscr{F}_z\,,$$

avec ici

$$\alpha_1 = \beta_2 = \gamma_3 = 0\,.$$

2) Nous allons présenter un cas particulier.

Considérons deux particules de spin $\frac{1}{2}$, d'opérateurs de spin respectifs

$$\vec{\mathscr{I}}_j(\mathscr{I}_{jx}, \mathscr{I}_{jy}, \mathscr{I}_{jz}) \quad (j = 1 \text{ et } 2)$$

tels que

$$\mathscr{I}_{jx}\,|j, \pm\tfrac{1}{2}> \;=\; \tfrac{1}{2}\,|j, \mp\tfrac{1}{2}>$$
$$\mathscr{I}_{jy}\,|j, \pm\tfrac{1}{2}> \;=\; \pm\tfrac{i}{2}\,|j, \mp\tfrac{1}{2}>$$
$$\mathscr{I}_{jz}\,|j, \pm\tfrac{1}{2}> \;=\; \pm\tfrac{1}{2}\,|j, \pm\tfrac{1}{2}>\,.$$

Soient, parmi les opérateurs de spin pour l'ensemble de 2 particules qui correspondent au nombre quantique $m = 0$, les 3 opérateurs:

$$\mathscr{S}_1 = \tfrac{i}{2}(\mathscr{I}_{1+}\mathscr{I}_{2-} - \mathscr{I}_{1-}\mathscr{I}_{2+})$$
$$\mathscr{S}_2 = \tfrac{1}{2}(\mathscr{I}_{1+}\mathscr{I}_{2-} + \mathscr{I}_{1-}\mathscr{I}_{2+})$$
$$\mathscr{S}_3 = \tfrac{1}{2}(\mathscr{I}_{1z} - \mathscr{I}_{2z})\,,$$

avec

$$\mathscr{I}_{j\pm} = \mathscr{I}_{jx} \pm i\mathscr{I}_{jy}\,.$$

L'hamiltonien $\mathscr{H} = a\,\mathscr{S}_1 + b\mathscr{S}_2 + c\mathscr{S}_3$ intervient dans certains problèmes. Il conduit à

$$\overline{\mathscr{H}^D}\begin{pmatrix}\mathscr{S}_1\\ \mathscr{S}_2\\ \mathscr{S}_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & \beta_1 & \gamma_1\\ 0 & 0 & \gamma_2\\ \alpha_3 & \beta_3 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathscr{S}_1\\ \mathscr{S}_2\\ \mathscr{S}_3\end{pmatrix}.$$

Nous avons ici $\alpha_2 = 0$; la forme (5) ne pourra pas être obtenue et, pour la forme (6), on ne peut écrire toutes les relations (14).

On voit directement que $S = 0$, et l'on peut prendre $\tau = 0$ et $\mu = -\nu = \sqrt{-P}$.

Manuscrit reçu le 1er juin 1964.

Laboratoire d'Electronique et de Physique du Solide
de l'Université de Lyon.

RÉFÉRENCES

1. J. A. Crawford. 1958. *Nuovo Cimento*, 10, 698.
2. A. Meckler. 1959. *Nuovo Cimento*, 12, 1.
3. C. N. Banwell et H. Primas. 1963. *Molecular Physics*, t. 6, p. 225.
4. P. Holmes, *Finite Dimensional vector spaces*. Van Nostrand, 1958.
5. M. Zamansky, *Introduction à l'Algèbre et à l'Analyse modernes*, p. 40. Dunod, 1re édition, 1958.
6. J. Dixmier, *Algèbres d'opérateurs dans l'espace hilbertien*. Gauthier-Villars, 1957.
7. F. Hausdorff, Leipzig. *Ber. Ges. Wiss., math. phys. Kl.*, 58, 1906, 19.
8. T. Kahan, *Théorie des groupes en physique classique et quantique*. Dunod, tome 1, fasc. 1 et 2