Quaternions-Rotations et Spin

On a vu que les nombres complexes sont étroitement associés aux rotations dans le plan. Un rotation plane d'angle θ autour d'un point se représente par l'opération de multiplication par le nombre complexe $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$.

On voudrait maintenant disposer d'un procédé analogue pour les rotations dans l'espace: il s'agit de trouver un ensemble de nombres, muni d'une addition et d'une mutiplication, de sorte qu'une rotation dans l'espace revienne à faire une mutiplication.

Une rotation dans l'espace est déterminée par un axe (l'axe de la rotation) et par un angle. En supposant une origine fixée, une rotation autour d'un point dépend de 3 paramètres réels.

C'est en cherchant à décrire les rotations de l'espace, ainsi que le produit vectoriel qui lui est associé, que Hamilton inventa en 1843 les quaternions.
Il y a plusieurs manières équivalentes de les présenter.
Commençons par imiter la représentation des nombres complexes par des matrices 2×2 en la modifiant légèrement.

$$q = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}, \quad a, b \in \mathbb{C}$$

En l'honneur de Hamilton, on désigne par $\mathbb{H}$ l'ensemble de ces matrices q.

On va voir que $\mathbb{H}$ est un espace vectoriel réel de dimension 4 ($\mathbb{C}$ est un espace réel de dimension 2) et on va en exhiber une base particulière.
On a $a = x + iy$, $b = u + iv$. On en déduit alors que

$$q = xE + yI + uJ + vK \tag{1}$$

Les 4 matrices E, I, J, K étant

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

$\{E, I, J, K\}$ constitue une base de $\mathbb{H}$.

Ces quatre matrices sont voisines des matrices de Pauli, introduites par Pauli pour décrire le spin. On verra plus loin que ce n'est pas fortuit. Ces matrices sont notées σ_0, $\sigma_1 = \sigma_x$, $\sigma_2 = \sigma_y$, $\sigma_3 = \sigma_z$ et sont reliées à E, I, J, K,

$$E = \sigma_0 =, \;\; I = i\sigma_3, \;\; J = i\sigma_2, \;\; K = i\sigma_1 \tag{4}$$

On vérifie que les 4 matrices σ_j, $0 \leq j \leq 3$ sont Hermitiennes.
Les opérations sur $\mathbb{H}$ sont les opérations définies pour les matrices: on a donc une addition et une mutiplication. (Attention: la multiplication n'est pas commutative).

On a une conjuguaison analogue à la conjugaison complexe:
$q \mapsto q^\star$ ($q^\star$ est la matrice conjuguée hermitienne de q).
Calculons le produit $q^\star.q$. On trouve

$$\boxed{q^\star.q = q.q^\star = (|a|^2 + |b|^2)E} \tag{5}$$

Or $q = 0$ si et seulement si $a = b = 0$. Posons $|q| = \sqrt{|a|^2 + |b|^2}$ (module du quaternion q). On en déduit que tout quaternion non nul a un inverse noté q^{-1}

$$q^{-1} = \frac{q^\star}{|q|^2} \tag{6}$$

On dit qu'un quaternion est **réel** si $q^\star = q$ et qu'il est pure si $q^\star = -q$. Un quaternion pur est l'équivalent d'un nombre complexe imaginaire pur.
q est réel équivaut à $a \in \mathbb{R}$ et $b = 0$ ou encore à $q = xE$.
q est pur équivaut à $a = iy$ (a imaginaire pur) ou encore à $q = yI + uJ + vK$.
Notons que $\{E, I, J, K\}$ est une base orthonormée de $\mathbb{H}$ pour le produit scalaire

$$\langle q, q' \rangle = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(q^\star q')$$

Notons par $\mathbb{H}_R$ l'ensemble des quaternions réels et $\mathbb{H}_P$ l'ensemble des quaternions purs. les sous-espaces $\mathbb{H}_R$ et $\mathbb{H}_P$ sont orthogonaux et on a $\mathbb{H} = \mathbb{H}_R \oplus \mathbb{H}_P$.

Les générateurs E, I, J, K de l'ensemble des quaternions vérifient les relations suivantes, qui servent parfois de point de départ pour leur construction

$$\begin{aligned} I^2 &= J^2 = & K^2 = -E \\ IJ &= K = & -JI \\ JK &= I = & -KJ \\ KI &= J = & -IK \end{aligned}$$

Si q est un quaternion pur de norme 1 on trouve $q^2 = -1$. Il y a plein de racines carrée de -1 dans les quaternions!

Ces propriétés des générateurs des quaternions se traduisent par les suivantes pour les matrices de Pauli

$$\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 2\delta_{j,k}, \qquad [\sigma_j, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{j,k,\ell}\sigma_\ell \tag{7}$$

où $[\sigma_j, \sigma_k] \equiv \sigma_j\sigma_k - \sigma_k\sigma_j$ est le commutateur de σ_j et σ_k et $\varepsilon_{j,k,\ell}$ est égal à 0, 1, -1 suivant que pour (j, k, ℓ) 2 des indices sont égaux, une permutation paire ou une permutation impaire de $1, 2, 3$.
Les relations de commutation jouent un rôle important en mécanique quantique. On verra plus loin que l es relations (7) sont analogues aux relations vérifiées par les générateurs des rotations de l'espace (c'est l'explication donnée par Pauli pour décrire le spin).

L'ensemble des quaternions purs $\mathbb{H}_P$ est un espace de dimension 3 (sur $\mathbb{R}$) qui représente donc un modèle pour l'espace euclidien dans lequel nous vivons, que l'on notera E_3. Tout quaternion pur, noté v s'écrit $v = xI + yJ + zK$, (x, y, z) représente les coordonnées d'un point de E_3. Calculons le produit de 2 quaternions purs $v = xI + yJ + zK$, $v' = x'I + y'J + z'K$. En utilisant les règles précédentes, avec un peu de patience, on obtient

$$\begin{aligned} v.v' &= -(xx' + yy' + zz')E + \\ &\quad (yz' - y'z)I + (x'z - z'x)J + (xy' - x'y)K \end{aligned} \tag{8}$$

Le produit de 2 quaternions purs donnent en même temps le produit scalaire $\langle v, v' \rangle$ et le produit vectoriel $v \wedge v'$ dont les composantes sont données par la règle :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} yz' - y'z \\ x'z - z'x \\ xy' - x'y \end{pmatrix} \tag{9}$$

Si q est un quaternion, on peut le décomposer en une somme $q = a + v$ où a est réel et v un quaternion pur. On vérifie que

$$a = \frac{q + q^\star}{2}, \quad v = \frac{q - q^\star}{2}$$

On a alors pour le produit de 2 quaternions q et q', la formule

$$\boxed{q.q' = aa' - \langle v, v' \rangle + av' + a'v + v \wedge v'}$$

Le produit vectoriel apparait également dans la formule suivante, appelée formule du produit mixte

$$\det[v, v', w] = \langle v \wedge v', w \rangle \tag{10}$$

On démontre cette formule en développant le déterminant.
Il en résulte que si v et v' sont linéairement indépendants, alors $\{v, v', v \wedge v'\}$ est un repère directe ("règle du bonhomme d'Ampère") et que $v \wedge v'$ est orthogonal à v et à v'.

Par analogie avec la formule de Euler-Moivre pour les nombres complexes, calculons $\mathrm{e}^{\theta q}$, q étant un quaternion imaginaire de norme 1. On a vu que $q^2 = -1$ donc $q^3 = -q$, $q^4 = 1$, $q^5 = 1$ et plus généralement $q^{n+4} = q^n$. On obtient alors

$$\mathrm{e}^{\theta q} = \sum_{n \geq 0} \frac{\theta^n q^n}{n!} = \cos\theta + \sin\theta . q \tag{11}$$

On rappelle les développements infinis des fonctions $\cos\theta, \sin\theta$ obtenus en prenant les parties réelles et imaginaires de $\mathrm{e}^{i\theta}$

$$
\begin{aligned}
\cos\theta &= \sum_{n\geq 0}(-1)^n \frac{\theta^{2n}}{(2n)!} \\
\sin\theta &= \sum_{n\geq 0}(-1)^n \frac{\theta^{2n+1}}{(2n+1)!}
\end{aligned}
$$

On vérifie que $\|\mathrm{e}^{\theta q}\| = 1$. Tout quaternion de norme 1 est de cette forme (exercice).

Lien entre quaternions et rotations.

Une rotation dans l'espace d'angle θ autour d'un axe de vecteur unitaire v s'exprime par la formule

$$\boxed{R(\theta, v)u = (1 - \cos\theta)\langle v, u\rangle v + \cos\theta u + \sin\theta v \wedge u}. \qquad (12)$$

Démontrons la formule (12). On se ramène à une rotation dans le plan orthogonal à v. On pose $u^{\perp} = u - \langle u, v\rangle v$. On a alors $R(\theta, v)u = R(\theta, v)u^{\perp} + \langle u, v\rangle v$.
On peut se ramener au cas où $\|u^{\perp}\| = 1$. Mais alors $\{v, u^{\perp}, v \wedge u^{\perp}\}$ est un repère orthonormé directe et $v \wedge u = v \wedge u^{\perp}$. On en déduit

$$R(\theta, v)u^{\perp} = \cos\theta u^{\perp} + \sin\theta(v \wedge u)$$

En regroupant les termes on obtient la formule cherchée.

Nous allons maintenant interpéter la formule précédente à l'aide des quaternions. Soit q un quaternion pur de norme 1 et u un quaternion pur quelconque. Calculons $\mathrm{e}^{-\theta q/2} u \mathrm{e}^{\theta q/2}$. En utilisant ce qui précéde, on obtient

$$
\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\theta q/2} u \mathrm{e}^{\theta q/2} = {} & \cos^2 \frac{\theta}{2} u + \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} u.q \\
& - \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} q.u - \sin^2 \frac{\theta}{2} q.u.q
\end{aligned}
\tag{13}
$$

$$
\begin{aligned}
q.u &= -\langle q, u \rangle + q \wedge u \\
q.u.q &= -\langle q, u \rangle q + (q \wedge u) \wedge q
\end{aligned}
\tag{14}
$$

On utilise alors la formule du double produit vectoriel

$$(u \wedge v) \wedge w = \langle u, w \rangle v - \langle v, w \rangle u \tag{15}$$

Ce qui donne finalement

$$\boxed{\mathrm{e}^{-\theta q/2} u \mathrm{e}^{\theta q/2} = \cos\theta u - \sin\theta q \wedge u + (1 - \cos\theta)\langle q, u \rangle q} \tag{16}$$

Comparons maintenant cette formule avec celle trouvée pour les rotations :

$$\boxed{R(\theta, v)x = (1 - \cos\theta)\langle v, x \rangle v + \cos\theta x + \sin\theta v \wedge x}$$

Dans la première formule q, u sont des quaternions purs alors que dans la deuxième v, x sont des vecteurs de $\mathbb{R}^3$. Voyons comment on passe de l'une à l'autre.

Dans ce qui suit, on convient de représenter les points x de l'espace $\mathbb{R}^3$ par la matrice hermitienne $\sigma(x) = x_1\sigma_1 + x_2\sigma_2 + x_3\sigma_3$. C'est possible car $x \mapsto \sigma(x)$ est une bijection linéaire (et une isométrie) de $\mathbb{R}^3$ sur son image notée $\mathcal{H}_0$. On peut caractériser $\mathcal{H}_0$ comme étant l'ensemble des matrices 2×2 hermitiennes, de trace nulle (exercice).
Si $v \in \mathbb{R}^3$ alors $q = i\sigma(v)$ est une quaternion pur, de norme 1 si v est de norme 1. De même, si $x \in \mathbb{R}^3$, $u = i\sigma(x)$ est un quaternion. On déduit de la formule (**??**) que l'on a

$$\mathrm{e}^{-i\theta\sigma(v)/2}(\sigma(x))\mathrm{e}^{i\theta\sigma(v)/2} = \\ \cos\theta\sigma(x) + \sin\theta\sigma(v\wedge x) + (1-\cos\theta)\langle x, v\rangle\sigma(v). \tag{17}$$

Le membre de droite s'écrit sous la forme $\sigma(y)$ avec $y = x\cos\theta + v\wedge x\sin\theta + (1-\cos\theta)\langle v, x\rangle v$. y est donc le transformé de x par la rotation d'angle θ et d'axe v. Autrement dit

$$\sigma(x) \mapsto \mathrm{e}^{-i\theta\sigma(v)/2}(\sigma(x))\mathrm{e}^{i\theta\sigma(v)/2}$$

définit une transformation de $\mathcal{H}_0$ dans $\mathcal{H}_0$ de telle sorte que les coordonnées de $\sigma(x)$, considéré comme vecteur de $\mathcal{H}_0$, sont transformées selon la rotation d'axe v et d'angle θ.
Il est parfois commode d'utiliser la notation $\sigma(x) = \langle x, \sigma\rangle$ où σ désigne le triplet de matrices $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$.

conclusion.

On peut représenter toute rotation spatiale par un quaternion ($\mathrm{e}^{\theta q/2}$). Cela peut faciliter certains calculs et c'est utilisé dans la conception de jeux vidéos, le contrôle des satellites et des fusées. On montre facilement que tout quaternion de norme 1, noté U peut s'écrire sous la forme $U = \mathrm{e}^{\theta q/2}$ où $\theta \in [0, 4\pi[$ et q est une quaternion pur de norme 1. Cette écriture est unique. On a donc une correspondance $U \mapsto R(U)$ qui à tout quaternion unitaire U associe une rotation de l'espace d'angle θ et d'axe v, vecteur dont les composantes (v_1, v_2, v_3) sont les composantes de q dans la base $\{I, J, K\}$ des quaternions purs.

L'ensemble $\mathbb{H}_1$ des quaternions unitaires s'identifie avec l'ensemble des transformations unitaires de l'espace de Hilbert $\mathbb{C}^2$ noté $SU(2)$, l'ensemble de rotations de l'espace est noté $SO(3)$.
L'application R de $SU(2)$ dans $SO(3)$ vérifie la propriétés suivantes

$$\begin{aligned} R(U_1.U_2) &= R(U_1).R(U_2), \ \forall U_1, U_2 \in SU(2) \\ R[SU(2)] &= SO(3) \\ R(U) &= R(V) \Leftrightarrow U = \pm V \end{aligned} \tag{18}$$

Le codage des rotations par les quaternions n'est pas parfait! Il y a une ambigüité de signe qui est inévitable pour des raisons géométriques que l'on retrouvera avec le spin.

Exercices

1. Démontrer la formule du double produit vectoriel.

2. On considère une rotation d'angle θ d'axe v et une rotation d'angle ϕ d'axe w, que l'on effectue dans cet ordre. Le résultat est une rotation d'angle ω d'axe t. En utilisant la représentation à l'aide des quaternions, calculer $\cos\frac{\omega}{2}$.

3. Dans l'espace $\mathbb{R}^3$ muni d'un repére orthonormé $\{e_1, e_2, e_3\}$ montrer que toute rotation $R(\theta, v)$ peut se décomposer en un produit de 3 rotations du type suivant.

$$R(\theta, v) = R_3(\theta_3').R_2(\theta_2).R_3(\theta_3)$$

où $R_j(\alpha)$ désigne la rotation d'angle α, d'axe e_j.

Exercices

(suite)
4. déduire de 3. que toute matrice unitaire $U \in SU(2)$ se décompose comme suit

$$U = \pm \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i\theta_3'/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\theta_3'/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta_2/2) & -\sin(\theta_2/2) \\ \sin(\theta_2/2) & \cos(\theta_2/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i\theta_3/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\theta_3/2} \end{pmatrix} \tag{19}$$

5. Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres des matrices de Pauli et montrer que $\sigma_j = U_j D_j U_j^\star$ avec D_j matrice diagonale et U_j unitaire, $j = 1, 2, 3$.

Rotations et matrices de Pauli

Pour comprendre le lien profond entre ces deux objets on fait appel à la notion de **groupe** et à ses **représentations**.
Un groupe G est un ensemble muni d'une opération (ou loi) que l'on notera souvent multiplicativement $x.y$ si $x, y \in G$. Cette loi possède les propriétés suivantes

- Associativité : $x.(y.z) = (x.y).z$, $\forall x, y, z \in G$
- Il existe un élément neutre noté e, $e.x = x.e = x$, $\forall x \in G$
- Tout élément x de G admet un inverse noté x^{-1} tel que $x.x^{-1} = x^{-1}.x = e$.

Exemples: $\mathbb{Z}$, $\mathbb{Q}$, $\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$ sont des groupes pour l'addition habituelle.
$\mathbb{R}\backslash\{0\}$, $\mathbb{C}\backslash\{0\}$ sont des groupes pour la multiplication habituelle.
Ces goupes sont commutatifs ($x.y = y.x$, $\forall x, y \in G$).

Exemples (suite)

- L'ensemble $\mathcal{S}_n$ des permutations de $\{1, 2, \cdots, n\}$ est un groupe (fini à $n!$ éléments) pour la composition des permutations. Ce groupe s'appelle le groupe symétrique d'ordre n.
- Le groupe à 2 éléments $G = \{0, 1\}$.
- Si E est un espace vectoriel de dimension finie, on note par $GL(E)$ l'ensemble des opérateurs inversibles de E. C'est un groupe pour la composition des opérateurs, appelé groupe linéaire de E. Si $E = \mathbb{R}^n$ on note $GL(\mathbb{R}^n) = GL(n, \mathbb{R})$.
- Si $E = \mathbb{R}^3$ on désigne par $O(3)$ le groupe des transformations orthogonales et par $SO(3)$ le groupe des rotations.
- si $E = \mathbb{C}^2$, $SU(2)$ désigne le groupe des opérateurs unitaires de déterminant $+1$ de $\mathbb{C}^2$

Exemples (suite)

- L'ensemble des nombre complexes de module 1 est un groupe noté $U(1)$; il s'identifie au groupe des rotations du plan noté $SO(2)$
- L'ensemble des quaternions de norme 1, noté $\mathbb{H}_1$ s'identifie à $SU(2)$. En effet les éléments de $SU(2)$ ont pour matrice

$$Q = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}, \quad a, b \in \mathbb{C}, \ \ |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

On vérifie que $Q^\star = Q^{-1}$ et $\det Q = 1$ qui sont les 2 relations qui définissent $SU(2)$.

Pour analyser les relations entre $SO(3)$ et $SU(2)$ ont fait appel à la théorie des groupes.
La théorie des groupes est un domaine vaste des mathématiques. Nous allons seulement l'effleurer ici. Cette théorie a des applications importantes en physique pour l'étude des symétries. Elle a permis par exemple à Pauli d'expliquer l'origine du spin et à Gelmann de prédire l'existence des quarks.
L'un des fondateurs de la théorie des groupes est le mathématicien légendaire E. Galois qui s'en servit pour démontrer l'impossibilité de résoudre en général par radicaux les équations de degré ≥ 5.
Voici 2 notions utiles.
Un sous-groupe d'un groupe G est une partie H de G contenant l'élément neutre et stable par la loi du groupe. Par exemple $SO(3)$ est un sous-groupe de $GL(3, \mathbb{R})$.

Un **morphisme de groupe** est une application ρ d'un groupe G dans un groupe H qui respecte les lois de G et H, c'est à dire telle que

$$\begin{aligned} \rho(e) &= \epsilon && (20)\\ \rho(g_1.g_2) &= \rho(g_1)\star\rho(g_2), \quad \forall g_1, g_2 \in G. && (21)\end{aligned}$$

ϵ est l'élément neutre de H, $\star$ est le loi de H.
Exemples:
1) $x \mapsto \mathrm{e}^x$ est de morphisme de $(\mathbb{R}, +)$ dans $(\mathbb{R}^\star, \times)$
2) Si A est une matrice $n \times n$, $t \mapsto \mathrm{e}^{tA}$ est un morphisme de $(\mathbb{R}, +)$ dans $GL(n, \mathbb{R})$ (ou $GL(n, \mathbb{C})$). $\{\mathrm{e}^{tA},\ t \in \mathbb{R}\}$ est un sous-groupe de $GL(n, \mathbb{R})$, appelé sous-groupe à un paramètre de générateur A.

Lors de l'étude des rotations on a construit un morphisme du groupe $\mathbb{H}_1$ dans le groupe $SO(3)$ c'est à dire de $SU(2)$ dans $SO(3)$. Reprenons cette étude on a identifié l'ensemble des quaternions purs à l'espace vectoriel $\mathcal{H}_0$ engendré par $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$. $\mathcal{H}_0$ est aussi l'espace des matrices complexes A, 2×2 hermitiennes et de trace nulle. Cet espace est souvent noté $su(2)$

Si $v \in \mathbb{R}^3$, $v = (v_1, v_2, v_3)$ on a noté $\sigma(v) = v_1\sigma_1 + v_2\sigma_2 + v_3\sigma_3$.
L'application σ est une isométrie de $\mathbb{R}^3$ sur $su(3)$ muni du produit scalaire $\langle A, B\rangle = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(AB^\star)$.
La relation établie entre quaternions et rotations de l'espace s'exprime de la manière suivante : à tout élement U de $SU(2)$ on associe une rotation $R(U)$ de l'espace suivant la formule

$$\boxed{R(U)v = \sigma^{-1}(U\sigma(v)U^{-1})} \tag{22}$$

R est un morphisme surjectif (tout élément de $SO(3)$ provient, via R d'un élément de $SU(2)$). Il n'est pas injectif. On montre en effet que tout élément de $SO(3)$ provient de 2 éléments distincts de $SU(2)$. Il suffit de regarder le cas de la transformation identité $\mathbb{I}_{\mathbb{R}^3}$.
On constate alors que $R(U) = \mathbb{I}_{\mathbb{R}^3}$ si et seulement si $U = \pm\mathbb{I}_{\mathbb{C}^2}$.

Le groupe $SO(3)$ agit naturellement dans $\mathbb{R}^3$ mais il agit aussi dans d'autres espaces. Il agit par exemple sur les fonctions ψ de $\mathbb{R}^3$ dans $\mathbb{C}$ suivant la formule $\rho(U)\psi(x) = \psi(R(U)^\star x)$. On constate alors qu'il s'agit également d'une action de $SU(2)$. $SU(2)$ agit naturellement sur $\mathbb{C}^2$. L'observation clé de Pauli pour expliquer le spin consiste à calculer les générateurs infinitésimaux de ces actions et remarquer qu'ils vérifient des mêmes relations de commutation.

On désigne par $R_j(\theta)$ la rotation d'angle θ autour de l'axe Ox_j, $j = 1, 2, 3$. Calculons $\frac{\partial}{\partial\theta}\psi(R_j(\theta)x)|_{\theta=0}$. On trouve

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\psi(R_j(\theta)x))|_{\theta=0} = L_j\psi(x) \tag{23}$$

où les L_j sont les opérateurs différentiels :

$$\begin{aligned} L_1 &= x_2\frac{\partial}{\partial x_3} - x_3\frac{\partial}{\partial x_2} \\ L_2 &= x_3\frac{\partial}{\partial x_1} - x_1\frac{\partial}{\partial x_3} \\ L_3 &= x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1} \end{aligned}$$

Ce qu'on résume par la formule $\boxed{L = x \wedge \nabla}$.

Pour une particule en rotation le moment angulaire est une quantité conservée. Reprenons les calculs précédents pour un axe quelconque de vecteur directeur unitaire v. On préfère avoir des opérateurs hermitiens dans l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$. Pour cela on pose $\hat{L}_j = \frac{1}{i} L_j$ Pour toute fonction dérivable ψ de 3 variables $x = (x_1, x_2, x_3)$ on a alors :

$$i \frac{\partial}{\partial \theta} \psi(R(-\theta, v)x)|_{\theta=0} = i \langle \nabla \psi(x), x \wedge v \rangle = \langle v, \hat{L} \rangle \psi(x)$$

Faisons maintenant agir les rotations précédentes dans $\mathbb{C}^2$.

Pour cela à la rotation d'angle θ et d'axe v on associe la transformation de $SU(2)$: $U(\theta, v) = \mathrm{e}^{-i\theta\sigma(v)/2}$. D'après les calculs précédents effectués via les quaternions, aux rotations $R_1(\theta), R_2(\theta), R_3(\theta)$ sont associés les matrices de $SU(2)$ suivantes

$$
\begin{aligned}
U_3(\theta) &= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{i\theta/2} \end{pmatrix} \\
U_2(\theta) &= \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & \sin(\theta/2) \\ -\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \\
U_1(\theta) &= \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -i\sin(\theta/2) \\ -i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Comme précédemment, on calcule les générateurs infinitésimaux de ces actions dans $\mathbb{C}^2$, On obtient alors, pour $j = 1, 2, 3$,

$$i\frac{\partial U_j(\theta)}{\partial \theta}|_{\theta=0} = \frac{1}{2}\sigma_j \tag{24}$$

Posons $S_j = \frac{1}{2}\sigma_j$. Alors $\hat{L}_j$ et S_j vérifient les mêmes relations de commutation, à savoir

$$\boxed{\frac{1}{i}[\Lambda_j, \Lambda_k] = \varepsilon_{j,k,\ell}\Lambda_\ell}$$

Ce qui laisse penser que les matrices S_j jouent un rôle de même nature qu'un moment angulaire. On verra plus loin que les opérateurs $\hat{L}_j$ sont les analogues quantiques du moment angulaire classique pour une particule en rotation.

Remplaçons maintenant la fonction ψ par un vecteur $a = (a_1, a_2)$ de $\mathbb{C}^2$ et faisons agir $R(\theta, v)$ par son représentant $\mathrm{e}^{-\theta q/2}$ ($q = i\sigma(v)$) dans $SU(2)$. On a alors $q = i(v_1\sigma_1 + v_2\sigma_2 + v_3\sigma_3)$ et on obtient

$$i\frac{\partial}{\partial\theta}\mathrm{e}^{-\theta q/2}a|_{\theta=0} = (v_1S_1 + v_2S_2 + v_3S_3)a = \langle v, S\rangle a.$$

Or $\langle v, S\rangle$ est une matrice hermitienne dont le carré est $\frac{1}{4}\mathbb{I}$ (cela résulte des propriétés des matrices de Pauli). Donc $\langle v, S\rangle$ a pour valeurs propres $\pm 1/2$.

De plus $\langle v, S\rangle$ est unitairement équivalente à la matrice $\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$. Il suffit par une rotation de transformer le vecteur v en le vecteur $(0,0,1)$ en utilisant la formule

$$\mathrm{e}^{\theta q/2}\langle v, S\rangle \mathrm{e}^{-\theta q/2} = \langle R(\mathrm{e}^{\theta q/2})v, S\rangle.$$

En effet les matrices $\langle v, S\rangle$ et $\langle R(\mathrm{e}^{\theta q/2})v, S\rangle$ ont mêmes valeurs propres.

conclusion: $\langle v, S\rangle$ s'interprète comme un moment angulaire intrinsèque prenant les valeurs $\pm 1/2$ indépendamment de l'axe de rotation. On a ainsi décrit géométriquement le spin $1/2$. Alors que $\langle v, L\rangle$ s'interprète comme un moment angulaire orbital dépendant de l'axe de rotation v.

Comme on le verra dans la suite, pour expliquer le spin électronique, Pauli associe à l'électron une paire de fonctions d'onde (ψ_1, ψ_2). Donc pour tout $x \in \mathbb{R}^3$, $(\psi_1(x), \psi_2(x)) \in \mathbb{C}^2$. Le groupe des rotations agit sur (ψ_1, ψ_2) en combinant son action sur $x \in \mathbb{R}^3$ et son action sur la variable discrète $s = 1, 2$.

Une rotation $R(\theta, v)$ agit sur le "spineur" (ψ_1, ψ_2) selon la formule suivante

$$\rho_{1/2}(\theta, v) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} (x) = U(\theta, v) \begin{pmatrix} \psi_1(R(-\theta, v)x) \\ \psi_2(R(-\theta, v)x) \end{pmatrix} \tag{25}$$

On obtient alors

$$i \frac{\partial}{\partial \theta} \rho_{1/2}(\theta, v) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \Big|_{\theta=0} = (\hat{L} + S) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{26}$$

Le spin S s'ajoute donc au moment angulaire qui se trouve ainsi modifié. Le plus surprenant est que cette modification se fasse par un décalage de $\pm 1/2$.

W. Pauli a obtenu le prix Nobel en 1945 pour l'ensemble de ses travaux. Il a publié "General Principles of Quantum Mechanics" (Springer-Verlag) qui contient d'intéressantes notes historiques. On y verra en particulier que Pauli connaissait la théorie des quaternions et ainsi que bien d'autres domaines des mathématiques comme la théorie des représentations des groupes. C'est sans doute grâce à ces connaissances qu'il a pu proposer un modèle théorique cohérent pour expliquer les phénomènes mis en évidence par l'expérience de Stern et Gerlag (1921) et dans l'effet Zeeman (1896) "anormal". Pour cela Pauli a introduit le spin en 1924.