Chapitre 1

Couplage de moments cinétiques

On suppose que $\boldsymbol{j}_1$ et $\boldsymbol{j}_2$ sont les moments cinétiques respectifs de deux systèmes distincts 1 et 2. On dispose d'une base complète de vecteurs propres

$$|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \tag{1.1}$$

communs à $\boldsymbol{j}_1^2$, $\boldsymbol{j}_2^2$, j_{1z} et j_{2z}, α représentant l'ensemble des autres nombres quantiques nécessaires pour spécifier complètement l'état du système formé par la réunion des systèmes 1 et 2. Plus précisément, ces nombres quantiques sont valeurs propres des observables A formant avec $\boldsymbol{j}_1^2$, $\boldsymbol{j}_2^2$, j_{1z} et j_{2z} un ensemble complet d'opérateurs commutants. On suppose de plus que les vecteurs (1.1) forment une base standard par rapport aux moments cinétiques 1 et 2. A chaque suite $(\alpha j_1 j_2)$ correspond autant de vecteurs qu'il existe de couples $(m_1 m_2)$ distincts qui se déduisent les uns des autres par application répétée de $j_{1\pm}$ et $j_{2\pm}$. Ils sous-tendent donc un sous-espace $\mathcal{E}(\alpha j_1 j_2)$ de dimension $(2j_1+1)(2j_2+1)$.

1.1. Théorème fondamental d'addition de deux moments cinétiques

L'objectif est de déterminer les valeurs et vecteurs propres des opérateurs $\boldsymbol{J}^2$ et J_z, où $\boldsymbol{J}$ est la somme des moments cinétiques $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2$. Par définition,

$$J_z = j_{1z} + j_{2z} \tag{1.2}$$

$$J^2 = (j_{1x}+j_{2x})^2 + (j_{1y}+j_{2y})^2 + (j_{1z}+j_{2z})^2 \tag{1.3}$$

1. Il est évident que $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ est fonction propre de J_z, de valeur propre $m_1 + m_2$.
2. Supposons qu'à chaque valeur de J correspondent $N(J)$ séries linéairement indépendantes de $(2J+1)$ vecteurs propres du moment total, les vecteurs d'une même série se déduisant les uns des autres par application répétée de J_+ ou J_- et correspondant respectivement aux $(2J+1)$ valeurs de M : $M = -J, -J+1, \ldots, J-1, J$. Si $n(M)$ désigne l'ordre de dégénérescence de la valeur propre M, on a forcément

$$n(M) = \sum_{J \geq |M|} N(J) \tag{1.4}$$

ce qui implique

$$\begin{aligned} n(J) &= N(J) + N(J+1) + \ldots + N(J_{max}) \\ n(J+1) &= N(J+1) + \ldots + N(J_{max}) \\ \text{et donc} \qquad n(J) - n(J+1) &= N(J) \end{aligned} \tag{1.5}$$

Pour obtenir $N(J)$, il suffit donc de déterminer $n(M)$ pour chaque valeur possible de M. Suivant la remarque en 1., $n(M)$ est simplement le nombre de couples $(m_1 m_2)$ tels que $M = m_1 + m_2$. Dans le cas où $j_1 > j_2$, on trouve que

$$n(M) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad |M| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |M| & \text{si} \quad j_1 + j_2 \geq |M| \geq |j_1 - j_2| \\ 2j_2 + 1 & \text{si} \quad |j_1 - j_2| \geq |M| \geq 0 \end{cases} \tag{1.6}$$

Ces relations peuvent être facilement vérifiées à l'aide d'un cas particulier tel que celui présenté à la figure (1.1), où on a choisi $j_1 = 4$ et $j_2 = 2$.

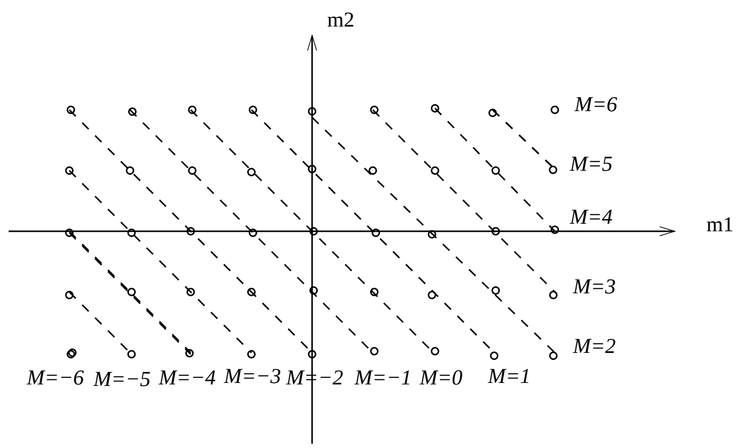

Fig. 1.1 – Dénombrement des valeurs possibles de M dans le cas $j_1 = 4$ et $j_2 = 2$.

Substituant ces nombres dans la relation (1.5), on trouve

$$N(J) = 1 \quad \text{pour} \quad J = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1,\ \ldots,\ |j_1 - j_2|. \tag{1.7}$$

On a donc démontré le théorème fondamental d'addition :

Dans l'espace de dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ sous-tendu par les vecteurs propres $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ (α, j_1 , j_2 fixes, m_1 et m_2 variables),

1. les valeurs possibles de J sont $|j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| + 1,\ \ldots,\ j_1 + j_2 - 1,\ j_1 + j_2$.
2. à chaque valeur de J correspond une et une seule série de $(2J + 1)$ vecteurs propres $|JM\rangle$ du moment total, avec $M = -J,\ -J + 1,\ \ldots,\ J - 1,\ J$.

1.2. Coefficients de Clebsch-Gordan

A chaque couple (JM) donné par le théorème d'addition correspond un vecteur propre $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ du moment cinétique total. Pour le définir sans ambiguïté, il sera supposé de norme 1 et sa phase sera fixée par une convention expliquée ci-dessous. Les vecteurs $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ forment, comme les vecteurs $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$, une base orthonormée dans le sous-espace $\mathcal{E}(\alpha j_1 j_2)$. On passe de l'une à l'autre par transformation unitaire :

$$|\alpha j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\langle\alpha j_1 j_2 m_1 m_2|\alpha j_1 j_2 JM\rangle. \tag{1.8}$$

Les coefficients $\langle\alpha j_1 j_2 m_1 m_2|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ sont en fait indépendants de α. En effet, dans le sous-espace $\mathcal{E}(\alpha j_1 j_2)$, les vecteurs $|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ constituent la base d'une représentation standard, dans laquelle les composantes de $\boldsymbol{j}_1$ et $\boldsymbol{j}_2$ sont représentées par des matrices indépendantes de α (voir relations (3.43) et (3.44)). Les matrices représentant $\boldsymbol{J}^2$ et J_z sont donc également indépendantes de α et les coefficients $\langle\alpha j_1 j_2 m_1 m_2|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ ont la même propriété. Celles-ci ont donc un caractère purement géométrique : elles ne dépendent que des moments cinétiques des systèmes et de leur orientation, non de la nature physique des variables dynamiques 1 et 2 dont on compose les moments cinétiques. On peut donc les noter $\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle$. On les appelle coefficients de Clebsch-Gordan. La relation (1.8) s'écrit donc

$$|\alpha j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle. \tag{1.9}$$

Pour définir les coefficients de Clebsch-Gordan de manière précise, il reste à fixer les phases des vecteurs $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$. En ce qui concerne les phases relatives des $(2J+1)$ vecteurs correspondant à la même valeur de J, on adopte les conventions des représentations standards. Les vecteurs sont alors définis à une phase dépendant de J près. Cet arbitraire est levé en imposant que la composante de $|\alpha j_1 j_2 JJ\rangle$ (dans la base couplée) suivant $|\alpha j_1 j_2 j_1\ J{-}j_1\rangle$ (dans la base découplée) soit réelle et positive, c-à-d

$$\langle j_1 j_2 j_1 J - j_1|JJ\rangle \text{ réel} \geq 0. \tag{1.10}$$

Suivant le théorème d'addition, pour que $\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle$ soit non nul, il est nécessaire que

$$m_1 + m_2 = M \quad \text{et} \quad J = |j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| + 1,\ \ldots,\ j_1 + j_2 - 1,\ j_1 + j_2. \tag{1.11}$$

Les relations (1.11) sont appelées règles de sélection des coefficients de Clebsch-Gordan.

Les coefficients de Clebsch-Gordan sont les coefficients d'une transformation unitaire, ils vérifient donc les relations d'orthogonalité

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J'M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{1.12}$$

$$\sum_{JM} \langle j_1 j_2 m_1 m_2|JM\rangle\langle j_1 j_2 m'_1 m'_2|JM\rangle = \delta_{m_1 m'_1}\delta_{m_2 m'_2}. \tag{1.13}$$

Dans les cas les plus simples, on peut déterminer directement les combinaisons linéaires (1.9). Pour $J = j_1 + j_2$ et $M = J$, il est évident que le vecteur $|JM\rangle$ n'a qu'une seule composante dans la base découplée, correspondant à $m_1 = j_1$ et $m_2 = j_2$:

$$|\alpha j_1 j_2\ j_1{+}j_2\ j_1{+}j_2\rangle = |\alpha j_1 j_2 j_1 j_2\rangle. \tag{1.14}$$

Par application répétée de $J_- \equiv j_{1-} + j_{2-}$ aux deux membres de cette équation, on construit tous les vecteurs $|\alpha j_1 j_2 JM\rangle$ correspondant à $J = j_1+j_2$. On construit ensuite les vecteurs de la série $J = j_1+j_2-1$, en commençant par celui correspondant à la plus grande valeur de M ($M = J$). Ce vecteur est déterminé sans ambiguïté grâce à son orthogonalité au vecteur $|\alpha j_1 j_2\ j_1+j_2\ j_1+j_2-1\rangle$ et à la condition de phase (1.10). Les autres vecteurs de la même série sont obtenus par application répétée de J_-.

En appliquant J_+ ou J_- aux deux membres de l'équation (1.9), on obtient les relations de récurrence des coefficients de Clebsch-Gordan :

$$\begin{aligned}\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J\ M+1\rangle &= \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\langle j_1 j_2\ m_1-1\ m_2|JM\rangle \\ &\quad+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\langle j_1 j_2\ m_1\ m_2-1|JM\rangle\end{aligned} \tag{1.15}$$

$$\begin{aligned}\sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|J\ M-1\rangle &= \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)}\langle j_1 j_2\ m_1+1\ m_2|JM\rangle \\ &\quad+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)}\langle j_1 j_2\ m_1\ m_2+1|JM\rangle\end{aligned} \tag{1.16}$$

Lorsque $M = J$, le premier membre de (1.15) s'annule ; tous les coefficients $\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JJ\rangle$ sont donc multiples l'un de l'autre. La condition de normalisation du vecteur $|\alpha j_1 j_2 JJ\rangle(\sum_{m_1 m_2}\langle j_1 j_2 m_1 m_2|JJ\rangle^2 = 1)$ et la condition de phase (1.10) achèvent de les déterminer. Tous les autres coefficients de Clebsch-Gordan s'obtiennent par application de la relation de récurrence (1.16).

1.3. Les symboles 3-j de Wigner

On définit également les symboles $3j$ de Wigner, qui sont reliés aux coefficients de Clebsch-Gordan par la relation

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1-j_2-m_3}\ (2j_3+1)^{-\frac{1}{2}}\ \langle j_1\ j_2\ m_1\ m_2|j_3\ \ -m_3\rangle. \tag{1.17}$$

La formule de Racah donne la valeur des symboles $3j$ de manière explicite :

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &= (-1)^{j_1-j_2-m_3}\sqrt{\Delta(j_1 j_2 j_3)} \\ &\quad\times\sqrt{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j_3+m_3)!(j_3-m_3)!} \\ &\quad\times\sum_t(-1)^t\ \{t!(j_3-j_2+t+m_1)!(j_3-j_1+t-m_2)! \\ &\qquad\qquad\times(j_1+j_2-j_3-t)!(j_1-t-m_1)!(j_2-t+m_2)!\}^{-1}\end{aligned}$$

avec

$$\Delta(j_1 j_2 j_3) = \frac{(j_1+j_2-j_3)!(j_2+j_3-j_1)!(j_3+j_1-j_2)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!} \tag{1.18}$$

et

$$m_1+m_2+m_3 = 0, \qquad j_3 = |j_1-j_2|, |j_1-j_2|+1, \ldots, j_1+j_2-1, j_1+j_2. \tag{1.19}$$

La somme sur l'indice t porte sur toutes les valeurs entières de t pour lesquelles les factorielles ont un sens, c-à-d pour lesquels les arguments des factorielles sont positifs ou nuls (rappel : $0! = 1$).