Chapitre 2

Moments cinétiques

1) Moment cinétique orbital:

En mécanique classique: le moment cinétique orbital $\overrightarrow{L}$ d'une particule est défini par l'expression:

$$\overrightarrow{L} = \overrightarrow{r} \wedge \overrightarrow{p} \qquad (1)$$

où $\overrightarrow{r}$ est le vecteur de position et $\overrightarrow{p}$ le vecteur impulsion

$$\overrightarrow{r} = x\,\overrightarrow{i} + y\,\overrightarrow{j} + z\,\overrightarrow{k}$$
$$\overrightarrow{p} = p_x\,\overrightarrow{i} + p_y\,\overrightarrow{j} + p_z\,\overrightarrow{k}$$

les composantes x_i et p_i avec $i = 1, 2, 3$ vérifient le crochet de Poisson suivant

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad (2) \qquad \text{où} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } \ i \neq j \\ 1 & \text{si } \ i = j \end{cases}$$

avec les notations $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$ et $p_1 = p_x$, $p_2 = p_y$, $p_3 = p_z$

En mécanique quantique: l'opérateur moment cinétique orbital $\widehat{\overrightarrow{L}}$ est défini comme l'opérateur vectoriel $\widehat{\overrightarrow{L}} = \widehat{\overrightarrow{r}} \wedge \widehat{\overrightarrow{p}}$ avec $\widehat{\overrightarrow{p}} = \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}$. En coordonnées cartésiennes, il a les composantes

$$\widehat{\overrightarrow{L}} = \hat{L}_x\overrightarrow{i} + \hat{L}_y\overrightarrow{j} + \hat{L}_z\overrightarrow{k}$$

avec

$$\begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{cases} \qquad (3)$$

où les opérateurs $\hat{x}_i$ et $\hat{p}_j$ vérifient au lieu de crochet de Poisson le commutateur

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad (4)$$

A partir de maintenant, on va omettre de mettre les chapeaux sur les opérateurs pour simplifier l'écriture.

On peut montrer d'aprés (3) et (4) que les composantes L_x, L_y et L_z obéissent aux relations de commutation cycliques

$$\begin{cases} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] = i\hbar L_y \end{cases}$$

en effet,

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\ &= y\,[p_z, z]\,p_x + x\,[z, p_z]\,p_y = i\hbar\,(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \end{aligned}$$

on peut montrer aussi que le carré du moment orbital $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ commute avec toutes les composantes de $\overrightarrow{L}$ (exercice)

$$\left[L^2, L_x\right] = \left[L^2, L_y\right] = \left[L^2, L_z\right] = 0$$

Remarque: on peut représenter le moment orbital en coordonnées sphériques (r, θ, φ), en particulier nous pouvons montrer que les opérateurs L^2 et L_z s'écrivent:

$$\begin{aligned} L_z &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ L^2 &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \end{aligned}$$

2) Valeurs propres de L^2 et L_z et harmoniques sphériques

Les équations aux valeurs propres de L^2 **et** L_z sont

$$\begin{aligned} L^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= a\hbar^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) \\ L_z Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= b\hbar Y_\ell^m(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Les constantes a et b sont sans dimensions donc le moment cinétique orbital a la dimension de $\hbar$. On peut montrer que

$$\begin{aligned} a &= \ell(\ell+1) \qquad \text{où} \quad \ell = 0, 1, 2, ... \\ b &= m \qquad\qquad\quad \text{où} \quad m = 0, \pm1, \pm2, ...et \end{aligned}$$

et les fonctions propres $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ sont appelées harmoniques sphériques. Elles sont données par l'expression

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)\,e^{im\varphi}, \qquad (5)$$

$$|m| \leq \ell \Leftrightarrow -\ell \leq m \leq \ell$$

$P_\ell^m(\cos\theta)$ est le polynôme de Legendre associé défini par

$$P_\ell^m(x) = \left(1-x^2\right)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}\left(P_\ell(x)\right), \quad |m| \leq \ell$$
$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}\left(x^2-1\right)^\ell$$

Calculons, par exemple, $Y_0^0(\theta,\varphi)$, $Y_1^0(\theta,\varphi)$ et $Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi)$.

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = (-1)^0\sqrt{\frac{1}{4\pi}}P_0^0(\cos\theta)\,e^0$$
$$x=\cos\theta \Rightarrow P_0^0(\cos\theta) = P_0^0(x) = P_0(x) = \frac{1}{2^0 0!}\left(x^2-1\right)^0 = 1$$
$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

de même

$$\begin{aligned}
Y_1^0(\theta,\varphi) &= (-1)^0\sqrt{\frac{(2+1)(1-0)!}{4\pi(1+0)!}}P_1^0(\cos\theta), \quad x=\cos\theta \\
&= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}P_1^0(x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}P_1(x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\left(x^2-1\right) \\
&= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \\
Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi) &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}
\end{aligned}$$

Quelques propriétés des harmoniques sphériques:

i) La normalisation

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left[Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\varphi)\right]^* Y_\ell^m(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'} \qquad (6)$$

ii) Toute fonction $f(\theta,\varphi)$ à carré integrable peut être développée d'une façon unique sur les harmoniques sphériques

$$f(\theta,\varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell,m}Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

iii) les $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ vérifient la relation

$$Y_\ell^{-m}(\theta,\varphi) = (-1)^m\left[Y_\ell^m(\theta,\varphi)\right]^*$$

iv) En notation de Dirac, on peut écrire les $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ comme suit

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \langle\theta,\varphi|\,\ell,m\rangle$$

$|\ell, m\rangle$ est un ket propre de L^2 et L_z donc on écrit

$$L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell (\ell + 1) |\ell, m\rangle$$
$$L_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle$$

les relations de complétude et normalisation sont notées comme

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |\ell, m\rangle \langle \ell, m| = 1$$
$$\langle \ell', m' | \ell, m\rangle = \delta_{\ell',\ell} \delta_{m',m}$$

3) Opérateurs d'échelle L_+ et L_-

Il est utile de définir les opérateurs d'échelle L_+ et L_-, adjoints l'un de l'autre :

$$L_+ = L_x + iL_y$$
$$L_- = L_x - iL_y$$

En coordonnées sphériques ces deux opérateurs s'écrivent

$$L_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$
$$L_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

leurs actions sur les $Y_\ell^m (\theta, \varphi)$ sont

$$L_+ Y_\ell^m (\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{\ell (\ell + 1) - m (m + 1)} Y_\ell^{m+1} (\theta, \varphi)$$
$$L_- Y_\ell^m (\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{\ell (\ell + 1) - m (m - 1)} Y_\ell^{m-1} (\theta, \varphi)$$

on écrit aussi

$$L_+ |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell (\ell + 1) - m (m + 1)} |\ell, m + 1\rangle$$
$$L_- |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell (\ell + 1) - m (m - 1)} |\ell, m - 1\rangle$$

notons que les kets $|\ell, m\rangle$ ne sont pas kets propres de $L_\pm$.

Exercice: Vérifier que

$$L^2 = \frac{1}{2} [L_+ L_- + L_- L_+] + L_z^2$$
$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$$
$$[L_z, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm$$

4) Théorie générale des moments cinétiques

En mécanique quantique, on appelle moment cinétique tout opérateur hermitique $\overrightarrow{J}$ de composantes J_x, J_y et J_z vérifiant les relations de commutations suivantes:

$$\begin{cases} [J_x, J_y] = i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] = i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] = i\hbar J_y \end{cases} \qquad (7)$$

Le carré scalaire est alors $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ on peut montrer, comme dans le cas du moment orbital, les relations

$$\left[J^2, J_x\right] = \left[J^2, J_y\right] = \left[J^2, J_z\right] = 0$$

on définit également les opérateurs d'échelle

$$J_+ = J_x + iJ_y$$
$$J_- = J_x - iJ_y$$

On peut montrer aisement les relations (exercice)

$$\left[J^2, J_+\right] = \left[J^2, J_-\right] = 0$$
$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$$
$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$
$$J^2 = \frac{1}{2}\left[J_+J_- + J_-J_+\right] + J_z^2$$
$$J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$
$$J_+J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$

Valeurs propres de J^2 et J_z

soit $\{|j,m\rangle\}$ une base propre commune à J^2 **et** J_z on écrit ainsi

$$\begin{cases} J^2\left|j,m\right\rangle = \hbar^2 j\left(j+1\right)\left|j,m\right\rangle \\ J_z\left|j,m\right\rangle = \hbar m\left|j,m\right\rangle \end{cases}$$

où $-j \leq m \leq j \Leftrightarrow m = -j, -j+1, ..., j-1, j$ et de plus nous avons

$$J_+\left|j,m\right\rangle = \hbar\sqrt{j\left(j+1\right) - m\left(m+1\right)}\left|j,m+1\right\rangle \qquad (8)$$
$$J_-\left|j,m\right\rangle = \hbar\sqrt{j\left(j+1\right) - m\left(m-1\right)}\left|j,m-1\right\rangle \qquad (9)$$

et comme $\{|j,m\rangle\}$ est une base complète on a

$$\sum_{m=-j}^{j} |j,m\rangle \langle j,m| = 1$$

$$\langle j',m'|\, j,m\rangle = \delta_{j',j}\delta_{m',m}$$

L'espace des états $\mathcal{E}(j)$ engendré par la base $\{|j,m\rangle\}$ est de dimension $2j+1$.

<u>Exercice</u>:

Soit le moment cinétique de spin $s = 1/2$. L'espace $\mathcal{E}(s = 1/2)$ est engendré par les kets $\{|1/2,m\rangle\}$.

i) Trouver les valeurs possibles de m.

ii) En déduire la dimension de l'espace $\mathcal{E}(s = 1/2)$.

iii) Trouver les matrices représentatives de S^2, S_z, S_+, et S_-.

En déduire celles de S_x et S_y

iv) On pose $\overrightarrow{S} = \frac{\hbar}{2}\overrightarrow{\sigma}$ où $\overrightarrow{\sigma}$ est un opérateur de composantes σ_x , σ_y et σ_z appelées matrices de Pauli. Vérifier ainsi qu'on a:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad \text{(matrice unité)}$$

$$[\sigma_x,\sigma_y] = 2i\sigma_z \quad , \quad [\sigma_y,\sigma_z] = 2i\sigma_x \quad , \quad [\sigma_z,\sigma_x] = 2i\sigma_y$$

<u>Solution:</u>

i) Les valeurs possibles de m sont: $m = \pm\frac{1}{2}$.

ii) La dimension de l'espace $\mathcal{E}(s = 1/2)$ est $\dim(\mathcal{E}) = 2s+1 = 2$. Cet espace est engendré par la base $\left\{\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right\}$.

iii) Matrice représentative de S^2

On a :

$$S^2\left|\frac{1}{2},m\right\rangle = \hbar^2\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\left|\frac{1}{2},m\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|\frac{1}{2},m\right\rangle$$

comme la base $\left\{\left|\frac{1}{2},m\right\rangle\right\}$ est une base propre de S^2 la matrice représentative est diagonale, les éléments de cette matrice sont donnés par

$$\left\langle\frac{1}{2},m'\right| S^2 \left|\frac{1}{2},m\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left\langle\frac{1}{2},m'\right|\left.\frac{1}{2},m\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\delta_{m,m'}$$

ou explicitement

$$S^2 = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 \\ 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Matrice représentative de S_z

De même on a:

$$S_z \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle = \hbar m \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle$$

la base $\left\{ \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle \right\}$ est une base propre de S_z la matrice représentative est diagonale, les éléments de cette matrice sont donnés par

$$\left\langle \frac{1}{2}, m' \right| S_z \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle = \hbar m \left\langle \frac{1}{2}, m' \right| \left. \frac{1}{2}, m \right\rangle = \hbar m \delta_{m,m'}$$

ou explicitement

$$S_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Matrice représentative de S_+ et S_-:

Les opérateurs d'échelle S_+ et S_- sont définis comme suit

$$S_+ = S_x + iS_y$$
$$S_- = S_x - iS_y$$

On a

$$\begin{aligned} S_+ \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - m (m+1)} \left| \frac{1}{2}, m+1 \right\rangle \\ &= \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - m (m+1)} \left| \frac{1}{2}, m+1 \right\rangle \end{aligned}$$

la base $\left\{ \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle \right\}$ n'est pas une base propre de S_+ la matrice représentative n'est pas diagonale, les éléments de cette matrice sont donnés par

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{2}, m' \right| S_+ \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - m (m+1)} \left\langle \frac{1}{2}, m' \right| \left. \frac{1}{2}, m+1 \right\rangle \\ &= \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - m (m+1)} \delta_{m',m+1} \end{aligned}$$

ou explicitement

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

comme $S_- = (S_+)^+$ il vient

$$S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

et par suite

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

iv) On pose $\overrightarrow{S} = \frac{\hbar}{2}\overrightarrow{\sigma}$. Ainsi, on a:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1_2$$

On montre également les commutateurs (exercice).

5) Addition de deux moments cinétiques:

Soient maintenant deux systèmes physiques distincts (1) et (2) de moments cinétiques respectifs $\overrightarrow{J}_1$ et $\overrightarrow{J}_2$. Les espaces vectoriels ξ_1 et ξ_2 associés sont engendrés respectivement par les vecteurs de base $|j_1, m_1\rangle$ et $|j_1, m_1\rangle$ avec

$$J_1^2 |j_1, m_1\rangle = \hbar j_1 (j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle$$

$$J_2^2 |j_1, m_1\rangle = \hbar j_2 (j_2 + 1) |j_2, m_2\rangle$$

Les nombres quantiques m_1 et m_2 prennent les valeurs:

$$m_1 = -j_1, -j_1 + 1, ..., j_1$$

$$m_2 = -j_2, -j_2 + 1, ..., j_2$$

Les deux moments $\overrightarrow{J}_1$ et $\overrightarrow{J}_2$ commutent puisque ils se rapportent à des systèmes indépendants:

$$\left[\overrightarrow{J}_1, \overrightarrow{J}_2\right] = 0 \quad \text{c-à-d} \quad [J_{1\alpha}, J_{2\beta}] = 0 \qquad \forall \alpha, \beta = x, y, z$$

Considérons maintenant le système formé par l'union des deux systèmes (1) et (2). Il est caractérisé par le moment cinétique $\overrightarrow{J}$ tel que:

$$\overrightarrow{J} = \overrightarrow{J}_1 + \overrightarrow{J}_2$$

de composante J_z suivant l'axe oz.

Les opérateurs J_1^2 , J_2^2 , J_{1z} et J_{2z} commutent entre eux et donc peuvent former un ECOC (ensemble complet des opérateurs qui commutent). Désignons par $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ leurs vecteurs propres communs qui sont définis par le produit tensoriel suivant:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

ce que l'on écrit simplement comme:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \, |j_2, m_2\rangle$$

Ainsi, l'ensemble $\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$ forme une base standard de l'espace vectoriel du système global

$$\xi = \xi_1 \otimes \xi_2$$

cet espace est de dimension $\dim(\xi) = \dim(\xi_1) . \dim(\xi_2) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$.

Par ailleurs, les opérateurs J_1^2 , J_2^2 , J^2 et J_z commutent également entre eux et peuvent former un ECOC. Ce qui conduit à une seconde base $\{|j_1, j_2, j, m\rangle\}$ notée simplement $\{|j, m\rangle\}$ .On doit donc connaitre les valeurs propres de J^2 et J_z .

i) *Valeurs propres de* J_z.

On a:

$$J_z = J_{1z} + J_{2z}.$$

c-à-d:

$$\begin{aligned}
J_z |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= (J_{1z} + J_{2z}) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\
&= J_{1z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle + J_{2z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\
&= J_{1z} |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle + J_{2z} |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\
&= \hbar m_1 |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle + \hbar m_2 |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\
&= \hbar (m_1 + m_2) |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\
&= \hbar m |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad \text{où } \boxed{m = m_1 + m_2}
\end{aligned}$$

comme

$$\begin{cases} -j_1 \leq m_1 \leq j_1 \\ -j_2 \leq m_2 \leq j_2 \end{cases} \Rightarrow -(j_1 + j_1) \leq m \leq j_1 + j_2$$

ii) *Valeurs propres de* J^2.

On a : $m = m_1 + m_2$ et comme les valeurs maximales de m_1 et m_2 sont $(m_1)_{\max} = j_1$ et $(m_2)_{\max} = j_2$ on a $m_{\max} = j_1 + j_2$ mais $|m| \leq j$ il s'ensuit que

$$j_{\max} = j_1 + j_2 \quad .... \text{ (a)}$$

Puis, pour trouver la valeur minimale $j_{\min}$ de j, on utilise le fait qu'il existe $(2j_1+1)(2j_2+1)$ vecteurs propres $|j, m\rangle$. Pour chaque valeur de j correspond $(2j+1)$ vecteurs propres $|j, m\rangle$, donc on a:

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1) \quad ...\text{(b)}$$

Soit la somme s telle que

$$s = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) = (2j_{\min}+1) + (2j_{\min}+3) + ... + (2j_{\max}+1)$$

qui s'écrit aussi comme suit

$$s = (2j_{\max}+1) + (2j_{\max}-1) + ... + (2j_{\min}+1)$$

Faisons la somme

$$2s = 2\left(j_{\max}+j_{\min}+1\right) + 2\left(j_{\max}+j_{\min}+1\right) + ... + 2\left(j_{\max}+j_{\min}+1\right)$$

c-à-d

$$s = \left(j_{\max}+j_{\min}+1\right) + \left(j_{\max}+j_{\min}+1\right) + ... + \left(j_{\max}+j_{\min}+1\right)$$

comme cette somme a $j_{\max} - j_{\min} + 1$ termes, on a

$$\begin{aligned}
s &= \text{nombre de termes} \times \frac{\text{premier terme} + \text{dernier terme}}{2} \\
&= (j_{\max} - j_{\min} + 1)\,(j_{\max} + j_{\min} + 1)
\end{aligned}$$

mais $j_{\max} = j_1 + j_2$ on écrit:

$$\begin{aligned}
s &= (j_1 + j_2 + 1 - j_{\min})\,(j_1 + j_2 + 1 + j_{\min}) \\
&= (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2
\end{aligned}$$

d'aprés (b) on obtient l'égalité

$$(j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

d'où on tire

$$j_{\min}^2 = (j_1 - j_2)^2 \Rightarrow j_{\min} = |j_1 - j_2|$$

Par suite, pour $j_1$et j_2 fixés, les valeurs possibles de j sont:

$$\boxed{|j_1 - j_2| \leq j \leq |j_1 + j_2|}$$

Coefficients de Clebsh-Gordan

Comme les deux bases $\{|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\}$ et $\{|jm\rangle\}$ sont complètes, on peut écrire

$$\begin{aligned}
|jm\rangle &= \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2|\, jm\rangle \\
|jm\rangle &= \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2|\, jm\rangle\, |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle
\end{aligned}$$

Les coefficients $\langle j_1 j_2 m_1 m_2|\, jm\rangle$ sont les élements d'une matrice de transformation unitaire qui relie les deux bases $\{|jm\rangle\}$ et $\{|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\}$, ces coefficients s'appellent les coefficients de Clebsh-Gordan (C-G).

Propriétés des coefficients de C-G:

i) Règles de sélection: comme $J_z = J_{1z} + J_{2z}$, on a:

$$\begin{aligned}
(J_z - J_{1z} - J_{2z})\,|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = 0 \Rightarrow \langle jm|\, J_z - J_{1z} - J_{2z}\, |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle &= 0 \\
\hbar\,(m - m_1 - m_2)\,\langle jm|\, j_1 j_2 m_1 m_2\rangle &= 0
\end{aligned}$$

Donc si

$$m \neq m_1 + m_2 \Rightarrow \langle jm|\, j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = 0$$

et on a vu que

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Alors les C-G sont <u>nuls</u> sauf si les deux conditions suivantes sont simultanément satisfaites

$$\boxed{\begin{cases} m = m_1 + m_2 \\ \text{et} \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \end{cases}}$$

ces conditions sont connues comme les règles de sélection des C-G.

ii) Relations d'orthogonalité:

Comme les $\{|jm\rangle\}$ forment une base, on a l'orthogonalité:

$$\langle j'm' | jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

introduisons la relation de fermeture

$$\sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2| = 1$$

comme

$$\begin{aligned} \langle j'm' | jm\rangle &= \langle j'm' |1| jm\rangle \\ &= \sum_{m_1 m_2} \langle j'm' |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2| jm\rangle \end{aligned}$$

il vient

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j'm' |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2| jm\rangle = \delta_{j'j}\delta_{mm'}$$

c-à-d

$$\sum_{m_1 m_2} \langle jm |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2| jm\rangle = 1$$

iii) Les C-G sont <u>réels</u> par convention, par conséquent

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2| jm\rangle = \langle jm| j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

la relation d'orthogonalité précédente devient:

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2| jm\rangle^2 = 1$$

iv) Quelques propriètés usuelles des C-G:

$$1) \qquad \langle j_1 j_2 m_1 m_2 |\, jm \rangle = (-1)^{j-j_1-j_2} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 |\, jm \rangle$$

$$2) \quad \langle j_1 j_2, -m_1, -m_2 |\, j, -m \rangle = (-1)^{j_1+j_2-j} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 |\, jm \rangle$$

$$3) \qquad \langle j, j, m, -m |\, 0, 0 \rangle = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$$

Signalons aussi que les C-G peuvent être trouvés dans des tables spécifiques, appelées Tables des C-G.

Calcul des C-G:

En général, les C-G sont reliés par des relations de récurrence qu'on peut déterminer en appliquant les opérateurs $J_\pm$. La combinaison de ces relations de récurrence avec la condition de normalisation détermine tous les C-G mais avec un signe prés. Pour déterminer ce signe, on utilise la convension de phase suivante

$$\boxed{\langle j_1, j_2, j_1, j - j_1, |\, j, j \rangle \text{ réel } \text{ et} > 0}$$

Exercice d'application:

On considère le couplage de deux spins $s_1 = s_2 = 1/2$. Ainsi, soit l'espace $\xi = \xi_1(s_1) \otimes \xi_2(s_2)$ engendré par la base $\{|s_1 s_2 m_1 m_2\rangle\}$ relative à l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$ et soit une deuxième base $\{|s_1, s_2, s, m\rangle\}$, notée simplement $\{|s, m\rangle\}$, relative à l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S^2, S_z\}$.

(a) Quelle est la dimension de ξ ? Quelles sont les valeurs possibles de s ?.

(b) Vérifier l'égalité

$$\sum_{s=s_{\min}}^{s_{\max}} (2s+1) = (2s_1+1)(2s_2+1)$$

(c) Pour le sous espace $\xi(s=0)$, montrer qu'on a

$$|00\rangle = a \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + b \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

où a et b sont des C-G à déterminer.

(d) Pour le sous espace $\xi(s=1)$, montrer que

$$|1,1\rangle = \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

En déduite $|1,0\rangle$ et $|1,-1\rangle$.

(e) Trouver la matrice de transformation entre les deux bases, formée par les C-G, puis vérifier qu'elle est unitaire.

(f) Vérifier les résultats précédents à partir d'une table des C-G.

Solution:

(a) La dimension de ξ est $\dim(\xi) = (2s_1+1)(2s_2+1) = 4$.

Comme $|s_1 - s_2| \leq s \leq |s_1 + s_2| \Rightarrow 0 \leq s \leq 1$ donc les valeurs possibles de s sont $s = 0, 1$.

(b) On a

$$\sum_{s=s_{\min}}^{s_{\max}} (2s+1) = \sum_{s=0}^{1} (2s+1) = (2\,(0)+1) + (2\,(1)+1)$$
$$= 1 + 3 = 4 = (2s_1+1)(2s_2+1) \;\Rightarrow \text{l'égalité est vérifiée}$$

(c) Pour le sous espace $\xi\,(s=0)$, on a

$$\begin{aligned}
|0,0\rangle = 1\,|0,0\rangle &= \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |s_1, s_2 m_1 m_2\rangle \langle s_1, s_2 m_1 m_2|\,00\rangle \\
&= \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \langle s_1, s_2 m_1 m_2|\,00\rangle\,|s_1, s_2 m_1 m_2\rangle \qquad \text{avec } m_1 + m_2 = 0 \\
&= \left\langle s_1, s_2 \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}{}_2 \right| 00\rangle \left| s_1, s_2 - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left\langle s_1, s_2 - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| 00\rangle\,|s_1, s_2 m_1 m_2\rangle \\
&\Rightarrow a = \left\langle s_1, s_2 \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| 00\rangle \quad \text{et} \quad b = \left\langle s_1, s_2 - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| 00\rangle
\end{aligned}$$

reste à déterminer les deux C-G a et b, Pour cela, utilisons la propiètè (3) :

$$\langle j, j, m, -m|\,0,0\rangle = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$$

il vient

$$a = \left\langle s_1, s_2 \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| 00\rangle = \frac{(-1)^{1/2-1/2}}{\sqrt{2\,(1/2)+1}} = 1/\sqrt{2}$$
$$b = \left\langle s_1, s_2 - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| 00\rangle = \frac{(-1)^{1/2+1/2}}{\sqrt{2\,(1/2)+1}} = -1/\sqrt{2}$$

Donc

$$\boxed{|0,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left[\left|s_1, s_2, \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right\rangle - \left|s_1, s_2, -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right\rangle \right]}$$

(d) Le sous espace $\xi\,(s=1)$ engendré par la base $\{|1,1\rangle\,,|1,0\rangle\,,|1-1\rangle\}$ donc

$$
\begin{aligned}
|1,1\rangle &= \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |s_1,s_2,m_1,m_2\rangle\,\langle s_1,s_2,m_1,m_2|\,1,1\rangle, \quad \text{avec} \quad m+m_2=1 \\
&= \left\langle s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|1,1\rangle\left|s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle
\end{aligned}
$$

la condition de normalisation:

$$
\left|\left\langle s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|1,1\rangle\right|^2 = 1 \Rightarrow \left\langle s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|1,1\rangle = \pm 1
$$

mais comme $\langle j_1,j_2,j_1,j-j_1,|\,j,j\rangle \equiv \left\langle s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|1,1\rangle$ réel et >0. Donc

$$
\left\langle s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|1,1\rangle = 1
$$

c-à-d

$$
\boxed{|1,1\rangle = \left|s_1,s_2,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle}
$$

pour déduire $|1,0\rangle$ et $|1,-1\rangle$ on peut appliquer l'opérateur S_- au ket $|11\rangle$, en effet:

$$
\begin{aligned}
S_-\,|1,1\rangle &= \left[(S_1)_- + (S_2)_-\right]\left|s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\
&\Rightarrow \hbar\sqrt{2}\,|1,0\rangle = (S_1)_-\left|s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + (S_2)_-\left|s_1,s_2,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\
&\Rightarrow \hbar\sqrt{2}\,|1,0\rangle = (S_1)_-\left|s_1,\frac{1}{2}\right\rangle\left|s_2,\frac{1}{2}\right\rangle + (S_2)_-\left|s_1,\frac{1}{2}\right\rangle\left|s_2,,\frac{1}{2}\right\rangle \\
&\Rightarrow \hbar\sqrt{2}\,|1,0\rangle = \hbar\left|s_1,-\frac{1}{2}\right\rangle\left|s_2,\frac{1}{2}\right\rangle + \hbar\left|s_1,\frac{1}{2}\right\rangle\left|s_2,,-\frac{1}{2}\right\rangle \\
&\Rightarrow \boxed{|1,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|s_1,s_2,-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle + \left|s_1,s_2,\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle\right\}}
\end{aligned}
$$

et de même

$$
\begin{aligned}
S_-\,|1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(S_1)_- + (S_2)_-\right]\left\{\left|s_1,s_2,-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \left|s_1,s_2,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right\} \\
&\Rightarrow \hbar\sqrt{2}\,|1,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(S_1)_-\right]\left|s_1,s_2,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(S_2)_-\left\{\left|s_1,s_2,-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right\} \\
&\Rightarrow \hbar\sqrt{2}\,|1,-1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left|s_1,s_2,-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left|s_1,s_2,-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \\
&\Rightarrow \boxed{|1,-1\rangle = \left|s_1,s_2,-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle}
\end{aligned}
$$
