Complément au cours : Somme de moments cinétiques

S. Bernon

A. Contexte

Lorsqu'un système est décrit par deux moments cinétiques $\hat{\mathbf{J}}_1$ et $\hat{\mathbf{J}}_2$ indépendants, il est naturel d'utiliser les ensembles d'opérateurs qui commutent ($\hat{\mathbf{J}}_1^2$,$\hat{J}_1^z$) et ($\hat{\mathbf{J}}_2^2$,$\hat{J}_2^z$) qui permettent de décrire le comportement de $\hat{\mathbf{J}}_1$ et $\hat{\mathbf{J}}_2$. La base propre commune $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle = |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle$ est la base découplée. Cette base est pertinente si les deux quantités n'interagissent pas. Dans le cas où les deux quantités interagissent de manière dipolaire, c'est à dire avec un Hamiltonien d'interaction de la forme :

$$\hat{W} = \frac{A}{\hbar^2}\hat{\mathbf{J}}_1.\hat{\mathbf{J}}_2 \tag{1}$$

où A à la dimension d'une énergie et $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$, la base découplée n'est plus une base propre de l'hamiltonien. Autrement dit, l'ensemble des opérateurs ($\hat{H}$,$\hat{\mathbf{J}}_1^2$,$\hat{J}_1^z$,$\hat{\mathbf{J}}_2^2$,$\hat{J}_2^z$) ne forme plus un *ECOC*. On pourra remarquer, par exemple, que $\hat{J}_1^z$ et $\hat{W}$ ne commutent pas.
En notant que l'hamiltonien d'interaction peut se réécrire sous la forme $\hat{W} = \frac{A}{2\hbar}((\hat{\mathbf{J}}_1+\hat{\mathbf{J}}_2)^2-\hat{\mathbf{J}}_1^2-\hat{\mathbf{J}}_2^2)$, on intuite le nouvel *ECOC* : ($\hat{H}$,$\hat{J}_1^2$,$\hat{\mathbf{J}}_2^2$,$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2)^2$,$\hat{J}^z$). On pourra par exemple vérifier que $[\hat{J}^z, \hat{W}] = 0$ alors que $[\hat{J}_1^z, \hat{W}] \neq 0$.
Cet ensemble se caractérise par 5 nombre quantiques qui forment la base couplée : $|n, l_1, l_2, l, m\rangle$.

Question :
Quelle relation existe t 'il entre les éléments de la base couplée et ceux de la base découplée ?
Formulé autrement : Que valent les coefficients de changement de base (appelés coefficients de Clebsch Gordan) $\langle j_1, m_1, j_2, m_2|j_1, j_2, j, m\rangle$ tels que :

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1,m_2} \langle j_1, m_1, j_2, m_2|j_1, j_2, j, m\rangle |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \tag{2}$$

B. Résultat

Si $\hat{\mathbf{J}}_1$ est un moment cinétique caractérisé par les nombre quantiques l_1 et m_1, et $\hat{J}_2$ est un moment cinétique caractérisé par les nombre quantiques l_2 et m_2
Alors $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ est un moment cinétique caractérisé par les nombres quantique l et m avec $l \in [j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, ..., |j_1 - j_2|]$ et $-j \leq m \leq j$.
Les éléments de la base couplée $|j_1, j_2, j, m\rangle$ se déduisent de manière récursive des éléments de la base couplée $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$.

Démonstration :

On a $\hat{J}^z = \hat{J}_1^z + \hat{J}_2^z$, donc $m = m_1 + m_2$. Comme $m_1 \leq j_1$ et $m_2 \leq j_2$ alors $j_{\max} \leq j_1 + j_2$. On a de plus $j_{\max} = j_1 + j_2$, sinon $\nexists\ m\ /\ m = m_1 + m_2$. On note $\epsilon(m = m_1 + m_2)$ le sous espace propre de $\hat{J}^z$ de valeur propre $m = m_1 + m_2$. On remarque que la dimension de $\epsilon(m = j_1 + j_2)$ vaut 1. Les vecteurs $|j_1, j_1, j_2, j_2\rangle$ (base découplée) et $|j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle$ (base couplée) sont donc égaux.

$$|j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle \tag{3}$$

On remarque que j_1 et j_2 ne sont pas discriminant entre les éléments de la base couplée et de la base découplée. Pour j_1 et j_2 donnés, on abrège les notations en notant $|j_1, j_2, j, m\rangle = |j, m\rangle$ et $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |m_1, m_2\rangle$.

On pose

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \quad \& \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \tag{4}$$

On a $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ et $\hat{J}_-|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j, m-1\rangle$.

Construction itérative : voir Fig. 1

Initilisation :

Pour $\epsilon(m = j_1 + j_2)$, on a $|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2\rangle$.

Iteration 1 : Pour $\epsilon(m = j_1 + j_2 - 1)$ de dimension 2, on construit le premier vecteur en appliquant $\hat{J}_-$ sur $|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle$ et on obtient :

$$|j, m-1\rangle = \frac{\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)}|m_1 - 1, m_2\rangle + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)}|m_1, m_2 - 1\rangle}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} \tag{5}$$

Le second vecteur de $\epsilon(m = j_1 + j_2 - 1)$ est $|j = j_1 + j_2 - 1, m = j_1 + j_2 - 1\rangle = \alpha|m_1 - 1, m_2\rangle + \beta|m_1 - 1, m_2\rangle$. Les conditions d'orthogonalité de la base $\langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = 0$ et de normalité $\langle j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = 1$ permettent de déterminer α et β.

Iterations suivantes : On applique la même méthode pour tous les sous espaces propres jusque $j = |j_1 - j_2|$. En effet, lorsque $j = |j_1 - j_2|$ il n'est plus nécessaire de chercher de nouveaux états propres car l'application de $\hat{J}_-$ suffit à déterminer tous les vecteurs propres du sous espace propre suivant. Ce cas particulier est décrit par la ligne rouge sur la figure 1.

Nombre d'états :

On remarque que le nombre de vecteurs de la base découplée est $(2.j_1 + 1).(2.j_2 + 1)$. Combien de vecteurs N_c y a t'il dans la base couplée ?

Si $j_1 \geq j_2$ (si $j_2 \geq j_1$ le calcul est réversible)

$$N_c = 2(j_1+j_2)+1+2(j_1+j_2-1)+1+...+2(j_1-j_2)+1 \quad (6)$$

$$= (2.j_1+1).(2.j_2+1)+(j_2+(j_2-1)+...-(j_2-1)-j_2))=(2.j_1+1).(2.j_2+1) \quad (7)$$

Cela assure la consistance des 2 représentations.

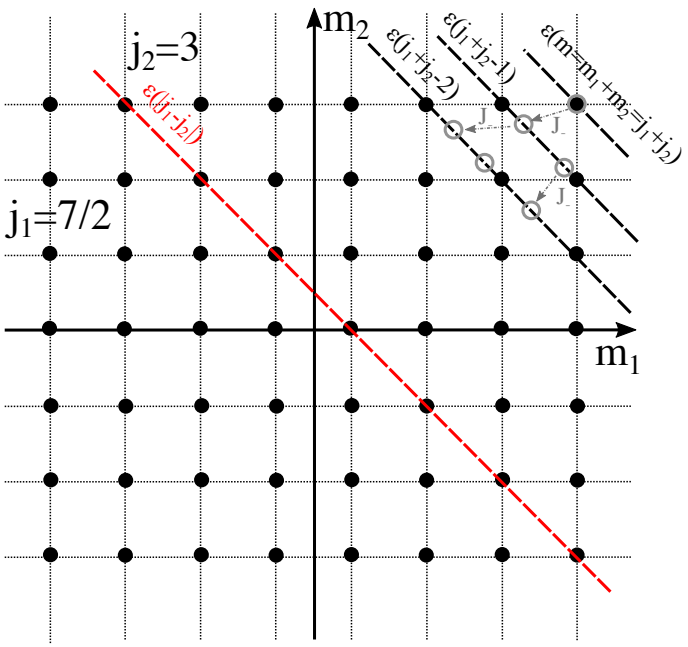

FIGURE 1 – Construction de la base couplée.
Les éléments de la base couplée se construisent de manière récursive depuis les valeurs extrémales ($m = m_1 + m_2 = j_1 + j_2$). $\epsilon(m)$ désigne le sous espace propre de $\hat{J}^z$ de valeur propre m.