# II COUPLAGE DE DEUX MOMENTS CINETIQUES

## 1. Moment cinétique total

Quand on veut construire les fonctions propres d'un hamiltonien à particules indépendantes et à symétrie sphérique $H_o$, il y a lieu d'exploiter au maximum les symétries du problème afin de simplifier le calcul ultérieur des éléments de matrice de l'interaction résiduelle. Dans le cas présent, le moment cinétique total du système $\bar{J}$ , défini comme la somme vectorielle des moments cinétiques individuels,

$$\bar{J} = \sum_{i=1}^{n} \bar{j_i} \quad , \tag{1.1}$$

est invariant :

$$[H_o , \bar{J}] = 0 . \tag{1.2}$$

On est donc confronté au problème de la construction de fonctions propres du moment cinétique total à partir des produits de fonctions propres des moments cinétiques individuels.

Le problème le plus simple est celui du couplage de deux moments cinétiques. Il se présente, par exemple, pour un électron d'un atome, qui possède à la fois un moment cinétique orbital $\bar{\ell}$ et un moment cinétique de spin $\bar{s}$ , qui se combinent pour former le moment cinétique total

$$\bar{j} = \bar{\ell} + \bar{s} \quad . \tag{1.3}$$

Il apparaît aussi lorsqu'on se demande quel est le moment cinétique orbital total $\bar{L}$ de deux particules de moments cinétiques orbitaux respectifs $\bar{\ell}_1$ et $\bar{\ell}_2$ ;

$$\bar{L} = \bar{\ell}_1 + \bar{\ell}_2 \quad . \tag{1.4}$$

C'est le cas également pour le spin total de deux électrons :

$$\bar{S} = \bar{s}_1 + \bar{s}_2 \ . \tag{1.5}$$

Tous ces problèmes sont des cas particuliers du problème général du couplage des moments cinétiques $\bar{j}_1$ et $\bar{j}_2$ de deux systèmes indépendants pour former le moment cinétique total

$$\bar{J} = \bar{j}_1 + \bar{j}_2 \ . \tag{1.6}$$

Ce chapitre est consacré à l'étude détaillée de cette question.

Les moments cinétiques $\bar{j}_1$ et $\bar{j}_2$ satisfont chacun les relations de définition (I 8.1) d'un moment cinétique :

$$\begin{aligned} &[j_{1+}, j_{1-}] = 2 j_{10} \ , \qquad &&[j_{2+}, j_{2-}] = 2 j_{20} \ , \\ &[j_{10}, j_{1\pm}] = \pm j_{1\pm} \ , \qquad &&[j_{20}, j_{2\pm}] = \pm j_{2\pm} \ , \end{aligned} \tag{1.7}$$

et commutent entre eux car ils se rapportent à des systèmes indépendants :

$$[j_{1a}, j_{2b}] = 0 \tag{1.8}$$

quels que soient a et b. On en déduit que le vecteur $\bar{J}$ satisfait, comme il fallait s'y attendre, les relations de commutation (I 8.1):

$$\begin{aligned} &[J_+ , J_-] = 2 J_0 \ , \\ &[J_0 , J_\pm] = \pm J_\pm \ , \end{aligned} \tag{1.9}$$

où

$$\begin{aligned} J_\pm &= J_1 \pm i J_2 \ , \\ J_0 &= J_3 \ . \end{aligned} \tag{1.10}$$

En outre, les commutateurs des composantes de $\bar{J}$ avec celles de $\bar{j}_1$ sont les suivants :

$$[J_\pm, j_{1\pm}] = 0 \quad , \qquad [J_0, j_{1\pm}] = \pm j_{1\pm} \ ,$$
$$[J_\pm, j_{1\mp}] = \pm 2 j_{10} \ , \qquad [J_0, j_{10}] = 0 \ . \qquad (1.11)$$
$$[J_\pm, j_{10}] = \mp j_{1\pm} \ ,$$

On obtient les commutateurs des composantes de $\bar{J}$ avec celles de $\bar{j}_2$ en remplaçant partout l'indice 1 par l'indice 2.

Les opérateurs $\bar{j}_1^2$ , $j_{10}$, $\bar{j}_{20}^2$ et $j_{20}$ commutent entre eux et peuvent donc être diagonalisés simultanément. Désignons par $|\gamma j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ leurs vecteurs propres simultanés, où $\gamma$ spécifie les valeurs propres des opérateurs $\Gamma$ qui doivent être ajoutés aux quatre opérateurs de moment cinétique pour obtenir un ensemble complet d'observables qui commutent. Ils peuvent se construire à partir de sommes de produits de facteurs relatifs à chacune des parties du système :

$$|\gamma j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{\alpha_1 \alpha_2} |\alpha_1 j_1 m_1\rangle |\alpha_2 j_2 m_2\rangle \ . \qquad (1.12)$$

Les nombres quantiques $m_1$ et $m_2$ prennent les valeurs

$$m_1 = -j_1, -j_1+1, \cdots, j_1 \ ,$$
$$m_2 = -j_2, -j_2+1, \cdots, j_2 \ . \qquad (1.13)$$

Par ailleurs, les opérateurs $\bar{j}_1^2$ , $\bar{j}_2^2$, $\bar{J}^2$ et $J_0$ commutent également entre eux, comme il est facile de s'en convaincre à partir de (1.6), (1.7) et (1.8). On peut donc les diagonaliser simultanément, ce qui conduit à une seconde base possible , $|\gamma j_1 j_2 J M\rangle$ , où $\gamma$ a la même signification que précédemment. Le passage d'une base à l'autre permet la construction de vecteurs propres du moment cinétique total à partir des vecteurs propres (1.12) des moments cinétiques individuels. Le premier problème qui se pose est de savoir quelles sont les valeurs propres de $\bar{J}^2$ et $J_o$, c'est-à-dire quelles sont les valeurs possibles des nombres quantiques J et M. Les vecteurs propres de $\bar{J}^2$ et $J_o$ doivent être cherchés dans les sous-espaces de vecteurs propres des opérateurs $\Gamma$ , $\bar{j}_1^2$ et $\bar{j}_2^2$ et nous pouvons nous limiter à travailler dans un de ces sous-espaces, caractérisé par une valeur fixe de $\gamma$ , $j_1$ et $j_2$.

La définition (1.6) montre que

$$J_o = j_{1o} + j_{2o} \, . \tag{1.14}$$

Par conséquent, le nombre quantique M est donné simplement par

$$M = m_1 + m_2 \, . \tag{1.15}$$

Récrivons $\bar{J}^2$ en fonction des opérateurs $\bar{j}_1$ et $\bar{j}_2$ :

$$\begin{aligned} \bar{J}^2 &= (\bar{j}_1 + \bar{j}_2)^2 \\ &= \bar{j}_1^2 + \bar{j}_2^2 + 2\,\bar{j}_1 \cdot \bar{j}_2 \\ &= \bar{j}_1^2 + \bar{j}_2^2 + j_{1+}\, j_{2-} + j_{1-}\, j_{2+} + 2\, j_{1o}\, j_{2o} \, . \end{aligned} \tag{1.16}$$

On constate que $\bar{J}^2$ relie des états caractérisés par des valeurs différentes de $m_1$ et $m_2$. Appliquons $\bar{J}^2$ à l'état caractérisé par la valeur maximum de M, $M = j_1 + j_2$, qui correspond à $m_1 = j_1$ et $m_2 = j_2$. On trouve :

$$\begin{aligned} \bar{J}^2 \left| \gamma j_1 j_1 j_2 j_2 \right\rangle &= \left[ j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) + 2 j_1 j_2 \right] \left| \gamma j_1 j_1 j_2 j_2 \right\rangle \\ &= (j_1+j_2)(j_1+j_2+1) \left| \gamma j_1 j_1 j_2 j_2 \right\rangle , \end{aligned} \tag{1.17}$$

car

$$j_{1+} \left| \gamma j_1 j_1 j_2 j_2 \right\rangle = j_{2+} \left| \gamma j_1 j_1 j_2 j_2 \right\rangle = 0 \, . \tag{1.18}$$

Cet état est donc état propre de $\bar{J}^2$ correspondant à $J = j_1 + j_2$ :

$$|\gamma j_1 j_1 j_2 j_2\rangle = e^{i\delta} \, |\gamma j_1 j_2 \; j_1+j_2 \;\; j_1+j_2\rangle , \tag{1.19}$$

où $e^{i\delta}$ est une phase arbitraire.

Considérons maintenant les états correspondant à la valeur suivante de M, $M = j_1 + j_2 - 1$. Ils sont au nombre de deux, $|\gamma j_1 j_1{-}1 \; j_2 j_2\rangle$ et $|\gamma j_1 j_1 \; j_2 \; j_2{-}1\rangle$. Une combinaison linéaire d'entre eux peut être obtenue par application de $J_-$ sur (1.19) et correspond donc à $J = j_1 + j_2$, $M = j_1 + j_2 - 1$. On a en effet

$$J_- \, |\gamma j_1 j_1 j_2 j_2\rangle = \left(j_{1-} + j_{2-}\right) |\gamma j_1 j_1 j_2 j_2\rangle$$

$$= (2j_1)^{1/2} \, |\gamma j_1 j_1{-}1 \; j_2 j_2\rangle + (2j_2)^{1/2} \, |\gamma j_1 j_1 \; j_2 \; j_2{-}1\rangle . \tag{1.20}$$

et

$$e^{i\delta} J_- \, |\gamma j_1 j_2 \; j_1+j_2 \;\; j_1+j_2\rangle = e^{i\delta} \, (2j_1+2j_2)^{1/2} \, |\gamma j_1 j_2 \; j_1+j_2 \;\; j_1+j_2-1\rangle , \tag{1.21}$$

en vertu de (I 8.28).

Considérons l'état orthogonal à cette combinaison linéaire,

$$(2j_2)^{1/2} \, |\gamma j_1 j_1{-}1 \; j_2 j_2\rangle - (2j_1)^{1/2} \, |\gamma j_1 j_1 \; j_2 \; j_2{-}1\rangle , \tag{1.22}$$

et appliquons-lui l'opérateur $J_+$ :

$$J_+ \left\{ (2j_2)^{1/2} \, |\gamma j_1 j_1{-}1 \; j_2 j_2\rangle - (2j_1)^{1/2} \, |\gamma j_1 j_1 \; j_2 \; j_2{-}1\rangle \right\}$$

$$= (2j_2)^{1/2} \, j_{1+} \, |\gamma j_1 j_1{-}1 \; j_2 j_2\rangle - (2j_1)^{1/2} \, j_{2+} \, |\gamma j_1 j_1 \; j_2 \; j_2{-}1\rangle$$

$$= \left[ (2j_2)^{1/2} (2j_1)^{1/2} - (2j_1)^{1/2} (2j_2)^{1/2} \right] |\gamma j_1 j_1 j_2 j_2\rangle$$

$$= 0 . \tag{1.23}$$

En passant de la première à la deuxième ligne, on a utilisé des relations analogues à (1.18). Il en résulte que l'état (1.22) est état propre de

$$\bar{J}^2 = J_- J_+ + J_0 (J_0 + 1) , \qquad (1.24)$$

correspondant à $J = M = j_1 + j_2 - 1$.

Quand $M = j_1 + j_2 - 2$, il y a trois états possibles, $|\gamma\, j_1\, j_1{-}2\;\; j_2\, j_2\rangle$, $|\gamma\, j_1\, j_1{-}1\, j_2\, j_2{-}1\rangle$ et $|\gamma\, j_1\, j_1\, j_2\, j_2{-}2\rangle$. Par application de $J_-$ aux états (1.20) et (1.22), on obtient deux combinaisons linéaires de ces trois états, correspondant respectivement à $J = j_1 + j_2$ et $J = j_1 + j_2 - 1$. On peut montrer comme ci-dessus que la combinaison linéaire orthogonale à celles-ci est un état propre de $\bar{J}^2$ correspondant à $J = j_1 + j_2 - 2$. Plus simplement il suffit de remarquer que l'on ne peut avoir ni $J = j_1 + j_2$ ni $J = j_1 + j_2 - 1$ car cela impliquerait l'existence soit de deux états avec $J = M = j_1 + j_2$, soit de deux états avec $J = M = j_1 + j_2 - 1$, qui pourraient être obtenus par application de l'opérateur $J_+$.

Quand on continue à réduire la valeur de M, on obtient à chaque étape une nouvelle valeur de J dans la suite $j_1 + j_2$, $j_1 + j_2 - 1$, $j_1 + j_2 - 2$, ... . Le processus s'arrête quand soit $m_1$ atteint la valeur $-j_1$, soit $m_2$ atteint la valeur $-j_2$, ce qui se produit pour $M = |j_1 - j_2|$. Dans ce cas, lorsqu'on diminue M d'une unité supplémentaire, il apparaît le même nombre d'états que pour la valeur supérieure car la valeur $m_1 = -j_1 - 1$ ou $m_2 = -j_2 - 1$ n'est pas permise. Les valeurs possibles de J sont donc

$$J = j_1 + j_2 \, , \; j_1 + j_2 - 1 \, , \; \dots , \; |j_1 - j_2| + 1 \, , \; |j_1 - j_2| \qquad (1.25)$$

et à chaque valeur de J sont associés $(2J + 1)$ états correspondant à $M = -J, -J+1, \dots J$. Une dernière vérification consiste à compter le nombre d'états correspondant à une valeur donnée de $\gamma$, $j_1$ et $j_2$ dans les deux bases :

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = \left( \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} 1 \right) \left( \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} 1 \right) = (2j_1+1)(2j_2+1) . \qquad (1.26)$$

### 1.1. Exemples

Quand $j_1 = \ell$ et $j_2 = s = \frac{1}{2}$, correspondant à (1.3), les valeurs possibles de $J = j$ sont $j = \ell - \frac{1}{2}$ et $j = \ell + \frac{1}{2}$, sauf lorsque $\ell = o$; dans ce dernier cas j ne peut prendre que l'unique valeur $j = \frac{1}{2}$. Notons qu'une valeur donnée de j correspond à deux valeurs de $\ell$, $\ell = j - \frac{1}{2}$ et $\ell = j + \frac{1}{2}$ ; à chacune d'elles est associée une série de $(2j + 1)$ vecteurs de parité $(-1)^{\ell}$ opposée. On utilisera dorénavant la notation spectroscopique, dans laquelle le moment cinétique orbital est représenté par une lettre minuscule (s p d f g ... pour $\ell = o, 1, 2, 3, 4, \ldots$ respectivement) et le moment cinétique total est écrit en indice inférieur droit. On a donc les différentes possibilités suivantes :

$$s_{1/2};\ p_{1/2},\ p_{3/2};\ d_{3/2},\ d_{5/2};\ f_{5/2},\ f_{7/2};\ g_{7/2},\ g_{9/2}\ \ldots \qquad (1.27)$$

Quand $j_1 = \ell_1$ et $j_2 = \ell_2$, correspondant à (1.4), les valeurs possibles de $J = L$ sont $L = |\ell_1 - \ell_2|,\ |\ell_1 - \ell_2| + 1, \ldots, \ell_1 + \ell_2$. Dans la notation spectroscopique, le moment cinétique orbital total est représenté par une lettre majuscule ( S P D F G... pour L = o, 1, 2, 3, 4, ... respectivement). Par exemple deux particules dans des états p et d respectivement peuvent être dans les états P, D et F du moment cinétique orbital total.

Quand $j_1 = s_1 = \frac{1}{2}$ et $j_2 = s_2 = \frac{1}{2}$, correspondant à (1.5), les valeurs possibles de $J = S$ sont o et 1. A S = o correspond un seul vecteur ; on dit alors que le spin est dans l'état singulet. A S = 1 correspondent trois vecteurs associés à $M_S$ (valeur propre de $S_o$) = -1, o ou +1 ; on dit alors que le spin est dans l'état triplet.

## 2. Coefficients de Clebsch-Gordan

On passe de la base dans laquelle les opérateurs $\Gamma$, $\bar{j}_1^2$, $j_{10}$, $\bar{j}_2^2$ et $j_{20}$ sont diagonaux à la base dans laquelle les opérateurs $\Gamma$, $\bar{j}_1^2$, $\bar{j}_2^2$, $\bar{J}^2$ et $J_o$ sont diagonaux par une transformation unitaire:

$$|\gamma j_1 j_2 J M\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\gamma j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle \gamma j_1 m_1 j_2 m_2 | \gamma j_1 j_2 J M\rangle . \tag{2.1}$$

Les coefficients de cette transformation ont une propriété très importante : ils sont indépendants de $\gamma$ et ne dépendent que des quantités $j_1$, $j_2$, $J$, $m_1$, $m_2$ et $M$. En effet, les composantes de $\bar{j}_1$ et $\bar{j}_2$ sont représentées, dans la base $|\gamma\ j_1\ m_1\ j_2\ m_2\rangle$ par des matrices indépendantes de $\gamma$ (cf. éq. (I 8.28) et (I 8.29)) ; par suite, les matrices représentant $\bar{J}^2$ et $J_o$ sont également indépendantes de $\gamma$ et les composantes $\langle \gamma\ j_1\ m_1\ j_2\ m_2 | \gamma\ j_1\ j_2\ J\ M\rangle$ de leurs vecteurs propres communs possèdent la même propriété. Celles-ci ont donc un caractère purement géométrique : elles ne dépendent que des moments cinétiques mis en jeu et de leur orientation et non de la nature physique des variables dynamiques 1 et 2 dont on compose les moments cinétiques. On les appelle coefficients de Clebsch-Gordan (ou coefficients de Wigner ou encore coefficients d'addition vectorielle). Nous les désignerons dorénavant par le symbole raccourci $\langle j_1\ m_1\ j_2\ m_2 | J\ M\rangle$. Suivant cette notation, la relation (2.1) s'écrit

$$|\gamma j_1 j_2 J M\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\gamma j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J M\rangle . \tag{2.2}$$

Pour définir les coefficients de Clebsch-Gordan de façon précise, il reste à fixer les phases des vecteurs $|\gamma\ j_1\ j_2\ J\ M\rangle$. En ce qui concerne les phases relatives des (2 J + 1) vecteurs correspondant à la même valeur de J, nous adoptons la convention de Condon et Shortley, contenue dans (I 8.28). Les vecteurs sont alors définis à une phase dépendant de J près. Nous levons cet arbitraire par la condition que la composante de $|\gamma\ j_1\ j_2\ J\ J\rangle$ suivant $|\gamma\ j_1\ j_1\ j_2\ J - j_1\rangle$ soit réelle et positive, c'est-à-dire

$$\langle j_1\, j_1\ j_2\, m_2 \,|\, J\, J\rangle \quad \text{réel} \geqslant 0 . \tag{2.3}$$

Notons que ce choix de phase implique en particulier que $e^{i\delta} = +1$ dans (1.19).

Un certain nombre de propriétés des coefficients de Clebsch-Gordan découlent directement de leur définition.

En premier lieu, ils satisfont à deux règles de sélection: suivant le théorème d'addition des moments cinétiques contenu dans (1.15) et (1.25), pour que $\langle j_1\, m_1\ j_2\, m_2 \,|\, J\, M\rangle$ ne soit pas nul, il est nécessaire que l'on ait à la fois

$$m_1 + m_2 = M , \tag{2.4}$$

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 . \tag{2.5}$$

La première relation entraîne que (2.2) contient en réalité une seule sommation, par exemple sur $m_1$ ($m_2$ étant alors donné par $m_2 = M - m_1$). La deuxième relation exprime le fait que $j_1$, $j_2$ et $J$ forment un triangle et on la représente par $\delta(j_1\, j_2\, J)$.

Nous montrerons dans le paragraphe suivant que les coefficients de Clebsch-Gordan relatifs à une valeur de J donnée se déduisent tous du coefficient $\langle j_1\, j_1\ j_2\, J - j_1 \,|\, J\, J\rangle$ au moyen de relations de récurrence à coefficients réels. Comme ce dernier est réel, les coefficients de Clebsch-Gordan sont tous réels.

Comme, en outre, ce sont les coefficients d'une transformation unitaire, ils vérifient les relations d'orthogonalité

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1\, m_1\ j_2\, m_2 \,|\, J\, M\rangle \langle j_1\, m_1\ j_2\, m_2 \,|\, J'\, M'\rangle = \delta_{JJ'}\, \delta_{MM'}\, \delta(j_1 j_2 J) , \tag{2.6}$$

$$\sum_{JM} \langle j_1\, m_1\ j_2\, m_2 \,|\, J\, M\rangle \langle j_1\, m_1'\ j_2\, m_2' \,|\, J\, M\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\, \delta_{m_2 m_2'} . \tag{2.7}$$

Notons que les sommations sur $m_2$ et M sont redondantes. Comme $M = m_1 + m_2$ est un bon nombre quantique dans les deux bases, la matrice de transformation se sépare en sous-matrices, correspondant chacune à une valeur donnée de M. Chaque sous-matrice est elle-même orthogonale et par conséquent

$$\sum_{m_1} \langle j_1 m_1 j_2\ M-m_1 | JM \rangle \langle j_1 m_1 j_2\ M-m_1 | J'M \rangle = \delta_{JJ'}\ \delta(j_1 j_2 J), \tag{2.8}$$

$$\sum_{J} \langle j_1 m_1 j_2\ M-m_1 | JM \rangle \langle j_1 m_1' j_2\ M-m_1' | JM \rangle = \delta_{m_1 m_1'}\ . \tag{2.9}$$

L'inverse de la transformation (2.2) s'écrit

$$| \gamma j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle = \sum_{JM} | \gamma j_1 j_2 JM \rangle \ \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle . \tag{2.10}$$

## 3. Relations de récurrence des coefficients de Clebsch-Gordan

Appliquons l'opérateur $J_-$ à l'état (2.2). On obtient

$$J_- \sum_{m_1 m_2} | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$$

$$= | j_1 j_2 J\ M-1 \rangle \ \langle j_1 j_2 J\ M-1 | J_- | j_1 j_2 JM \rangle$$

$$= \langle J\ M-1 | J_- | JM \rangle \sum_{m_1' m_2'} | j_1 m_1' j_2 m_2' \rangle \langle j_1 m_1' j_2\ m_2' | J\ M-1 \rangle . \tag{3.1}$$

Pour alléger l'écriture, on a supprimé $\gamma$ ainsi que $j_1$, $j_2$ dans les éléments de matrice de $J_-$ (qui en sont indépendants en vertu de (I 8.28)). On doit obtenir le même résultat quand on applique à l'état (2.2) l'opérateur $j_{1-} + j_{2-}$ :

$$(j_{1-} + j_{2-}) \sum_{m_1 m_2} | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$$

$$= \sum_{m_1' m_2'} \langle j_1 m_1'-1 | j_{1-} | j_1 m_1' \rangle \ | j_1\ m_1'-1\ j_2 m_2' \rangle \langle j_1 m_1' j_2\ m_2' | JM \rangle$$

$$+ \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_2\, m'_2-1 | j_{2-} | j_2\, m'_2 \rangle \, | j_1\, m'_1\, j_2\, m'_2-1 \rangle \langle j_1\, m'_1\, j_2\, m'_2 | J M \rangle . \quad (3.2)$$

En égalant les coefficients de $| j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \rangle$ dans (3.1) et (3.2), on obtient :

$$\langle J\; M-1 | J_- | J M \rangle \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 | J\; M-1 \rangle$$

$$= \langle j_1\, m_1 | j_{1-} | j_1\; m_1+1 \rangle \langle j_1\; m_1+1\; j_2\, m_2 | J\, M \rangle$$

$$+ \langle j_2\, m_2 | j_{2-} | j_2\; m_2+1 \rangle \langle j_1\; m_1\; j_2\; m_2+1 | J\, M \rangle . \quad (3.3)$$

La substitution des éléments de matrice de $J_-$ , $j_{1-}$ et $j_{2-}$ par leur valeur (voir (I 8.28) ) conduit à

$$\left[ (J+M)(J-M+1) \right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 | J\; M-1 \rangle$$

$$= \left[ (j_1+m_1+1)(j_1-m_1) \right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\; m_1+1\; j_2\, m_2 | J M \rangle$$

$$+ \left[ (j_2+m_2+1)(j_2-m_2) \right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\; m_1\; j_2\; m_2+1 | J M \rangle . \quad (3.4)$$

Une relation analogue est obtenue par application de l'opérateur $J_+ = j_{1+} + j_{2+}$ à l'état (2.2) :

$$\left[ (J-M)(J+M+1) \right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 | J\; M+1 \rangle$$

$$= \left[ (j_1+m_1)(j_1-m_1+1) \right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\; m_1-1\; j_2\, m_2 | J M \rangle$$

$$+ \left[ (j_2+m_2)(j_2-m_2+1) \right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1\; j_2\; m_2-1 | J\, M \rangle . \quad (3.5)$$

Les relations de récurrence (3.4) et (3.5) permettent d'exprimer tous les coefficients de Clebsch-Gordan correspondant à une valeur donnée de $j_1$, $j_2$ et $J$ en fonction de l'un d'entre eux, par exemple $\langle j_1\, j_1\, j_2\;\, J-j_1 | \;J\, J\rangle$. En effet, lorsqu'on fait $M = J$ dans (3.5), le premier membre s'annule ; l'application de cette formule donne alors tous les coefficients $\langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 | J\, J\rangle$ en fonction de celui pour lequel $m_1 = j_1$. Tous les coefficients pour lesquels $M < J$ se déduisent de ceux pour lesquels $M = J$ par application répétée de (3.4). Pour obtenir les coefficients de Clebsch-Gordan sous une forme condensée, il reste alors à calculer le coefficient $\langle j_1\, j_1\, j_2\;\, J-j_1 \;|\; J\, J\rangle$. Son module est déterminé par la condition de normalisation (2.6), tandis que sa phase est fixée par la convention (2.3). Cette méthode a été utilisée par Racah pour calculer les coefficients de Clebsch-Gordan. Avant de passer au calcul explicite, il nous reste à étudier les propriétés de symétrie des coefficients de Clebsch-Gordan, propriétés qui n'exigent pas une connaissance détaillée des coefficients.

## 4. Propriétés de symétrie des coefficients de Clebsch-Gordan

### 4.1. Permutation de $j_1$ et $j_2$

Quand on couple deux moments cinétiques, il faut faire attention à l'ordre dans lequel le couplage est effectué car coupler $\bar{j}_1$ à $\bar{j}_2$ n'est pas exactement équivalent à coupler $\bar{j}_2$ à $\bar{j}_1$. Ceci peut être suspecté par le fait que la convention de phase (2.3) fait jouer un rôle particulier à $\bar{j}_1$. Nous allons déterminer la différence de phase existant entre $| j_1\, j_2\, J\, M\rangle$ et $| j_2\, j_1\, J\, M\rangle$.

Commençons par étudier les éléments de matrice de $j_{1\pm}$ et $j_{10}$ dans la base $|\gamma\; j_1\, j_2\, J\, M\rangle$. Nous allons montrer qu'ils satisfont aux règles de sélection suivantes :

$$\langle j_1 j_2\, J' M' | j_{1\pm} | j_1 j_2\, J M\rangle = 0 \qquad \text{si } M' \neq M \pm 1 \text{ et } |J' - J| > 1, \quad (4.1)$$

$$\langle j_1 j_2 J'M' | j_{10} | j_1 j_2 JM \rangle = 0 \qquad \text{si } M' \neq M \text{ et } |J'-J| > 1. \quad (4.2)$$

La démonstration se base sur les relations de commutation (1.11) des composantes de $\bar{j}_1$ et $\bar{J}$. La règle de sélection sur M pour les éléments de matrice de $j_{1\pm}$ s'obtient en prenant l'élément de matrice de $[J_o, j_{1\pm}] = \pm j_{1\pm}$ entre le bra $\langle j_1\ j_2\ J'\ M'|$ et le ket $|j_1\ j_2\ J\ M\rangle$:

$$M' \langle j_1 j_2 J'M' | j_{1\pm} | j_1 j_2 JM \rangle - \langle j_1 j_2 J'M' | j_{1\pm} | j_1 j_2 JM \rangle M$$

$$= \pm \langle j_1 j_2 J'M' | j_{1\pm} | j_1 j_2 JM \rangle . \quad (4.3)$$

Pour les éléments de matrice de $j_{10}$, on utilise la relation $[J_o, j_{10}] = o$, ce qui donne

$$M' \langle j_1 j_2 J'M' | j_{10} | j_1 j_2 JM \rangle - \langle j_1 j_2 J'M' | j_{10} | j_1 j_2 JM \rangle M = 0. \quad (4.4)$$

La règle de sélection sur J se démontre par l'absurde. Supposons que les éléments de matrice puissent être différents de zéro pour $J' = J + 1 + \lambda$, $\lambda > o$. Alors $\langle j_1\ j_2\ J'\ M' | j_{1+} |j_1\ j_2\ J\ M\rangle = o$ pour $M' > J + 1$ (car la règle de sélection sur M implique que $M = M' - 1 > J$, ce qui est impossible). Mais d'autre part la relation $[J_+, j_{1+}] = o$ entraîne que

$$\langle j_1 j_2 J'M' | J_+ | j_1 j_2 J' M'-1 \rangle \langle j_1 j_2 J' M'-1 | j_{1+} | j_1 j_2 JM \rangle$$

$$- \langle j_1 j_2 J'M' | j_{1+} | j_1 j_2 J M+1 \rangle \langle j_1 j_2 J M+1 | J_+ | j_1 j_2 JM \rangle = 0 \quad (4.5)$$

et par conséquent l'élément de matrice de $j_{1+}$ pour une valeur donnée de M' s'annule s'il s'annule pour M' + 1. Il en résulterait que les éléments de matrice de $j_{1+}$ s'annuleraient pour toutes les valeurs de

M et M', ce qui est impossible. Une preuve semblable existe dans le cas où $J' < J-1$. Finalement la règle de sélection pour $j_{1+}$ entraîne des règles de sélection identiques pour $j_{10}$ et $j_{1-}$ en vertu des relations $[J_-, j_{1+}] = -2j_{10}$ et $[J_-, j_{10}] = j_{1-}$. Par exemple pour $j_{10}$, on a :

$$\langle j_1 j_2 J'M' | J_- | j_1 j_2 J' M'+1 \rangle \langle j_1 j_2 J' M'+1 | j_{1+} | j_1 j_2 J M \rangle$$

$$- \langle j_1 j_2 J'M' | j_{1+} | j_1 j_2 J M-1 \rangle \langle j_1 j_2 J M-1 | J_- | j_1 j_2 J M \rangle$$

$$= -2 \langle j_1 j_2 J'M' | j_{10} | j_1 j_2 J M \rangle = 0 \quad \text{si} \quad |J'-J| > 1. \tag{4.6}$$

Les règles de sélection sur les éléments de matrice de $j_{1\pm}$ et $j_{10}$ ayant été établies, retournons au problème de la détermination de la différence de phase entre $|j_1 j_2 J M\rangle$ et $|j_2 j_1 J M\rangle$. L'opérateur $J_o$ étant diagonal, on a

$$\langle j_1 j_2 J+1 \; M | J_o | j_1 j_2 J M \rangle = 0 \tag{4.7}$$

et par conséquent

$$\langle j_1 j_2 J+1 \; M | j_{1o} | j_1 j_2 J M \rangle = - \langle j_1 j_2 J+1 \; M | j_{2o} | j_1 j_2 J M \rangle, \tag{4.8}$$

ou encore

$$\langle j_1 j_2 J+1 \; M | j_{1o} | j_1 j_2 J M \rangle = - \langle j_2 j_1 J+1 \; M | j_{1o} | j_2 j_1 J M \rangle. \tag{4.9}$$

Comme, en vertu de (4.2), le premier membre de cette égalité est différent de zéro *, on en déduit que si pour une valeur donnée de J,

* C'est le seul type d'élément de matrice non diagonal de $j_{10}$ qui peut être différent de zéro en vertu de (4.2). Par ailleurs $j_{10}$ n'étant pas diagonal dans la base couplée doit avoir au moins un élément de matrice non diagonal non nul.

les états $|j_1\ j_2\ J\ M\rangle$ et $|j_2\ j_1\ J\ M\rangle$ ont la même phase, ils ont pour J + 1 des phases opposées et vice versa. Par ailleurs, la relation (1.19), avec le choix $e^{i\delta} = +1$ correspondant à (2.3), impose que

$$|j_1\ j_2\ j_1+j_2\ j_1+j_2\rangle = |j_2\ j_1\ j_1+j_2\ j_1+j_2\rangle = |j_1\ j_1\ j_2\ j_2\rangle, \tag{4.10}$$

d'où l'on déduit que

$$|j_1\ j_2\ j_1+j_2\ M\rangle = |j_2\ j_1\ j_1+j_2\ M\rangle \tag{4.11}$$

par application de l'opérateur $J_-$ un nombre suffisant de fois (cf. (I 8.28) ). Pour une valeur générale de J, on doit donc avoir

$$|j_1\ j_2\ J\ M\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}\ |j_2\ j_1\ J\ M\rangle, \tag{4.12}$$

car la phase $(-1)^{j_1+j_2-J}$ vaut + 1 pour $J = j_1 + j_2$ et change de valeur pour des valeurs successives de J. Les coefficients de Clebsch-Gordan satisfont à la relation de symétrie correspondante

$$\langle j_1\ m_1\ j_2\ m_2|J\ M\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}\ \langle j_2\ m_2\ j_1\ m_1|J\ M\rangle. \tag{4.13}$$

### 4.2. Permutation circulaire de $j_1$, $j_2$ et J

Pour obtenir une relation de symétrie quand on substitue $j_2$ à $j_1$, J à $j_2$ et $j_1$ à J dans un coefficient de Clebsch-Gordan, il faut remplacer l'équation entre opérateurs

$$\bar{j}_1 + \bar{j}_2 = \bar{J} \tag{4.14}$$

par

$$-\bar{j}_2 + \bar{J} = \bar{j}_1\ . \tag{4.15}$$

Nous avons établi au § 10 du chapitre I que $-\bar{j}_2$ est le transformé par renversement du temps du moment cinétique $\bar{j}_2$ et que ses vecteurs propres $K\,|j_2\;m_2\rangle$ sont liés à ceux de $\bar{j}_2$ par la relation

$$K\,|j_2\;m_2\rangle = (-1)^{j_2+m_2}\,|j_2\;-m_2\rangle\;. \tag{4.16}$$

Ces résultats suggèrent que le coefficient $\langle j_2\;-m_2\;J\;M|j_1\;m_1\rangle$ puisse être relié à $\langle j_1\;m_1\;j_2\;m_2|J\;M\rangle$. Dans le but d'examiner cette possibilité, écrivons les relations de récurrence pour $\langle j_2\;-m_2\;J\;M|\;j_1\;m_1\rangle$ correspondant à (3.4) et (3.5). On a :

$$\begin{aligned}
&\left[(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)\right]^{\frac{1}{2}}\langle j_2\;-m_2\;J\;M|j_1\;m_1-1\rangle\\
&=\left[(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)\right]^{\frac{1}{2}}\langle j_2\;-m_2+1\;J\;M|j_1\;m_1\rangle\\
&\quad+\left[(J+M+1)(J-M)\right]^{\frac{1}{2}}\langle j_2\;-m_2\;J\;M+1|j_1\;m_1\rangle
\end{aligned} \tag{4.17}$$

et

$$\begin{aligned}
&\left[(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)\right]^{\frac{1}{2}}\langle j_2\;-m_2\;J\;M|j_1\;m_1+1\rangle\\
&=\left[(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)\right]^{\frac{1}{2}}\langle j_2\;-m_2-1\;J\;M|j_1\;m_1\rangle\\
&\quad+\left[(J+M)(J-M+1)\right]^{\frac{1}{2}}\langle j_2\;-m_2\;J\;M-1|j_1\;m_1\rangle\,.
\end{aligned} \tag{4.18}$$

En les comparant aux relations (3.4) et (3.5), on voit que la quantité $(-1)^{m_2}\langle j_2\;-m_2\;J\;M|\;j_1\;m_1\rangle$ a les mêmes relations de récurrence que $\langle j_1\;m_1\;j_2\;m_2|\;J\;M\rangle$. Ces deux quantités diffèrent donc seulement par un facteur C indépendant des nombres quantiques magnétiques :

$$\langle j_1\,m_1\,j_2\,m_2|J\,M\rangle = C\,(-1)^{m_2}\,\langle j_2\;-m_2\;J\,M|j_1\,m_1\rangle\,. \tag{4.19}$$

On trouve le module de C en utilisant la propriété d'orthogonalité (2.8). La double somme

$$\sum_{M} \left( \sum_{m_1} \langle j_1 m_1 \, j_2 \; M - m_1 | J M \rangle^2 \right) = \sum_{M} \delta(j_1 j_2 J) = (2J+1)\, \delta(j_1 j_2 J) \qquad (4.20)$$

doit être en effet égale à

$$C^2 \sum_{m_1} \left( \sum_{M} \langle j_2 \; -M+m_1 \; J M | j_1 m_1 \rangle^2 \right) = C^2 \sum_{m_1} \delta(j_2 J j_1)$$

$$= C^2 \, (2j_1+1) \, \delta(j_1 j_2 J) \, , \qquad (4.21)$$

d'où l'on déduit que

$$|C| = \left( \frac{2J+1}{2j_1+1} \right)^{\frac{1}{2}} . \qquad (4.22)$$

L'argument de C résulte de la convention de phase (2.3). En effet, en prenant $m_1 = j_1$ et $M = J$ dans (4.19), on obtient

$$\langle j_1 j_1 \; j_2 \; J - j_1 | J J \rangle = C \, (-1)^{J-j_1} \langle j_2 \; j_1 - J \; J J | j_1 j_1 \rangle$$

$$= C \, (-1)^{J-j_1} (-1)^{j_2+J-j_1} \langle J J \; j_2 \; j_1 - J | j_1 j_1 \rangle \qquad (4.23)$$

en vertu de (4.13). Comme

$$\arg \langle j_1 j_1 \; j_2 \; J - j_1 | J J \rangle = \arg \langle J J \; j_2 \; j_1 - J | j_1 j_1 \rangle = +1 \, , \qquad (4.24)$$

on en déduit que

$$\arg C = (-1)^{j_2} . \qquad (4.25)$$

La relation de symétrie finale est donc

$$\langle j_1 m_1 \; j_2 m_2 | J M \rangle = (-1)^{j_2+m_2} \left( \frac{2J+1}{2j_1+1} \right)^{\frac{1}{2}} \langle j_2 \; -m_2 \; J M | j_1 m_1 \rangle . \qquad (4.26)$$

## 4.3. Permutation quelconque de $j_1$, $j_2$ et J

Les relations de symétrie (4.13) et (4.26) peuvent être combinées de manière à obtenir des relations de symétrie correspondant aux autres permutations possibles de $j_1$, $j_2$ et J. Par exemple :

$$\langle j_1 m_1\, j_2 m_2 | J M\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_2 m_2\, j_1 m_1 | J M\rangle \quad \text{en vertu de (4.13)}$$

$$= (-1)^{j_1+j_2-J} (-1)^{j_1+m_1} \left(\frac{2J+1}{2j_2+1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle j_1 -m_1\, J M | j_2 m_2\rangle \quad \text{en vertu de (4.26)}$$

$$= (-1)^{j_1+j_2-J} (-1)^{j_1+m_1} \left(\frac{2J+1}{2j_2+1}\right)^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_1+J-j_2} \langle J M\, j_1 -m_1 | j_2 m_2\rangle$$

en vertu de (4.13)

$$= (-1)^{j_1-m_1} \left(\frac{2J+1}{2j_2+1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle J M\, j_1 -m_1 | j_2 m_2\rangle . \qquad (4.27)$$

## 4.4. Changement de signe de $m_1$, $m_2$ et M

Trois applications successives de la relation (4.26) permettent de changer le signe de $m_1$, $m_2$ et M. On a :

$$\langle j_1 m_1\, j_2 m_2 | J M\rangle$$

$$= (-1)^{j_2+m_2} \left(\frac{2J+1}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle j_2 -m_2\, J M | j_1 m_1\rangle$$

$$= (-1)^{j_2+m_2} \left(\frac{2J+1}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}} (-1)^{J+M} \left(\frac{2j_1+1}{2j_2+1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle J -M\, j_1 m_1 | j_2 -m_2\rangle$$

$$= (-1)^{j_2+m_2} \left(\frac{2J+1}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}} (-1)^{J+M} \left(\frac{2j_1+1}{2j_2+1}\right)^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_1+m_1} \left(\frac{2j_2+1}{2J+1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle j_1 -m_1\, j_2 -m_2 | J -M\rangle$$

$$= (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_1 -m_1\, j_2 -m_2 | J -M\rangle , \tag{4.28}$$

car $M = m_1 + m_2$.

## 5. Calcul des coefficients de Clebsch-Gordan

Comme il a été expliqué au § 3, les coefficients de Clebsch-Gordan peuvent être calculés par application répétée des relations de récurrence (3.4) et (3.5).

En premier lieu, tous les coefficients pour lesquels $M = J$ peuvent être calculés à partir de celui pour lequel $m_1 = j_1$ par application de (3.5). En faisant $M = J$ dans cette relation, on a en effet :

$$0 = \left[(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)\right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1-1\, j_2\, J-m_1+1 | JJ\rangle$$

$$+ \left[(j_2+J-m_1+1)(j_2-J+m_1)\right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1\, j_2\, J-m_1 | JJ\rangle , \tag{5.1}$$

d'où

$$\langle j_1\, m_1-1\, j_2\, J-m_1+1 | JJ\rangle$$

$$= -\left[\frac{(j_2+J-m_1+1)(j_2-J+m_1)}{(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1\, j_2\, J-m_1 | JJ\rangle , \tag{5.2}$$

et par application répétée de cette relation

$$\langle j_1\, m_1\, j_2\, J-m_1 | JJ\rangle$$

$$= (-1)^{j_1 - m_1} \left[ \frac{(j_2+J-m_1)!\,(j_1+j_2-J)!\,(j_1+m_1)!}{(2j_1)!\,(-j_1+j_2+J)!\,(j_2-J+m_1)!\,(j_1-m_1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, j_1\, j_2\; J-j_1 | J J \rangle . \quad (5.3)$$

La valeur absolue de $\langle j_1\; j_1\; j_2\; J - j_1 | J\; J \rangle$ s'obtient à partir de la relation d'orthogonalité (2.8), soit :

$$\sum_{m_1} \langle j_1\; m_1\; j_2\; J - m_1 | J\; J \rangle^2 = 1 . \quad (5.4)$$

On a :

$$\langle j_1\, j_1\, j_2\; J-j_1 | J J \rangle^2 \sum_{m_1} \frac{(j_2+J-m_1)!\,(j_1+j_2-J)!\,(j_1+m_1)!}{(2j_1)!\,(-j_1+j_2+J)!\,(j_2-J+m_1)!\,(j_1-m_1)!} = 1 . \quad (5.5)$$

La somme sur $m_1$ est un cas particulier de la formule générale *

$$\sum_{m=c}^{d} \frac{(a+m)!\;(b-m)!}{(c+m)!\;(d-m)!} = \frac{(a+b+1)!\;(a-c)!\,(b-d)!}{(c+d)!\;(a+b-c-d+1)!} , \qquad a \geqslant c,\, b \geqslant d . \quad (5.6)$$

Cette formule est une conséquence directe de l'identité

$$(1+x)^{-\mu}\;(1+x)^{-\nu} = (1+x)^{-\mu-\nu} \quad (5.7)$$

pour $\mu$ et $\nu > 0$. En effet, en développant chacun des membres de cette identité en puissances de $x$ , on obtient

---

* Il n'est pas indispensable d'indiquer les limites de sommation si l'on convient d'interpréter $x!$ comme étant $\Gamma(x + 1)$ pour $x < 0$. En effet $\Gamma(x + 1)$ possède un pôle pour $x$ entier $< 0$ et pour n'importe quelle valeur de m située en dehors des limites de sommation, le terme correspondant possède au dénominateur une telle fonction $\Gamma$ et par conséquent s'annule identiquement.

$$\sum_{\rho,\sigma=0}^{\infty} (-1)^{\rho+\sigma} \frac{(\mu+\rho-1)!\,(\nu+\sigma-1)!}{\rho!\,(\mu-1)!\,\sigma!\,(\nu-1)!}\, x^{\rho+\sigma} = \sum_{\tau=0}^{\infty} (-1)^{\tau} \frac{(\mu+\nu+\tau-1)!}{\tau!\,(\mu+\nu-1)!}\, x^{\tau} , \qquad (5.8)$$

d'où

$$\sum_{\rho=0}^{\tau} \frac{(\mu+\rho-1)!\,(\nu+\tau-\rho-1)!}{\rho!\,(\mu-1)!\,(\tau-\rho)!\,(\nu-1)!} = \frac{(\mu+\nu+\tau-1)!}{\tau!\,(\mu+\nu-1)!} . \qquad (5.9)$$

La formule (5.6) en découle directement en faisant $\rho = c + m$, $\mu + c - 1 = a$, $\nu + \tau - c - 1 = b$ et $\tau - c = d$. Son application à (5.5) donne

$$\sum_{m_1} \frac{(j_1+m_1)!\,(j_2+J-m_1)!}{(j_2-J+m_1)!\,(j_1-m_1)!} = \frac{(j_1+j_2+J+1)!\,(j_1-j_2+J)!\,(-j_1+j_2+J)!}{(j_1+j_2-J)!\,(2J+1)!} , \qquad (5.10)$$

d'où

$$\langle j_1\, j_1\, j_2\; J-j_1 \,|\, J J\rangle = + \left[ \frac{(2j_1)!\,(2J+1)!}{(j_1+j_2+J+1)!\,(j_1-j_2+J)!} \right]^{\frac{1}{2}} . \qquad (5.11)$$

Nous avons utilisé la convention (2.3) pour fixer la phase du coefficient.

Il reste à déterminer les coefficients pour lesquels $M < J$ en fonction de ceux pour lesquels $M = J$. La relation de récurrence (3.4) se récrit sous la forme

$$\begin{aligned} &\left[(J+M)(J-M+1)\right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1\, j_2\; M-m_1-1 \,|\, J\; M-1\rangle \\ &= \left[(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)\right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\; m_1+1\; j_2\; M-m_1-1 \,|\, J M\rangle \\ &+ \left[(j_2-M+m_1+1)(j_2+M-m_1)\right]^{\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1\, j_2\; M-m_1 \,|\, J M\rangle , \end{aligned} \qquad (5.12)$$

ou encore

$$q(m_1, M-1) \langle j_1 m_1\, j_2\, M-m_1-1 | J\, M-1 \rangle$$
$$= q(m_1+1, M) \langle j_1\, m_1+1\, j_2\, M-m_1-1 | JM \rangle - q(m_1, M) \langle j_1 m_1\, j_2\, M-m_1 | JM \rangle ,$$
(5.13)

où l'on a posé

$$q(m_1, M) = (-1)^{m_1+M} \left[ \frac{(j_1+m_1)!\,(j_2+M-m_1)!\,(J-M)!}{(j_1-m_1)!\,(j_2-M+m_1)!\,(J+M)!} \right]^{\frac{1}{2}} . \tag{5.14}$$

En utilisant la notation $\Delta$ pour représenter la différence première, on obtient

$$q(m_1, M-1) \langle j_1 m_1\, j_2\, M-m_1-1 | J\, M-1 \rangle$$
$$= \Delta_{m_1} \left\{ q(m_1, M) \langle j_1 m_1\, j_2\, M-m_1 | JM \rangle \right\} . \tag{5.15}$$

L'application répétée de cette relation conduit à

$$q(m_1, M) \langle j_1 m_1\, j_2\, M-m_1 | JM \rangle$$
$$= \Delta_{m_1}^{J-M} \left\{ q(m_1, J) \langle j_1 m_1\, j_2\, J-m_1 | JJ \rangle \right\} , \tag{5.16}$$

où $\Delta^{J-M}$ est la différence $(J-M)^{\text{e}}$. Il est bien connu que la différence $n^{\text{e}}$ d'une fonction $f(x)$ est donnée par

$$\Delta_x^n f(x) = \sum_{\nu=0}^{n} (-1)^{n+\nu} \binom{n}{\nu} f(x+\nu) . \tag{5.17}$$

Par conséquent

$$\langle j_1 m_1\, j_2\, M-m_1 | JM \rangle$$
$$= \frac{(-1)^{J-M}}{q(m_1, M)} \sum_{s=0}^{J-M} \left\{ (-1)^s \binom{J-M}{s} q(m_1+s, J) \langle j_1\, m_1+s\, j_2\, J-m_1-s | JJ \rangle \right\} . \tag{5.18}$$

En utilisant les relations (5.3), (5.11) et (5.14), on obtient l'expression finale, due à Racah, du coefficient de Clebsch-Gordan général

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J M \rangle = \delta(m_1 + m_2, M)$$
$$\times \left[ \frac{(2J+1)(j_1+j_2-J)!(j_1-m_1)!(j_2-m_2)!(J+M)!(J-M)!}{(j_1+j_2+J+1)!(j_1-j_2+J)!(-j_1+j_2+J)!(j_1+m_1)!(j_2+m_2)!} \right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\times \sum_s (-1)^{s+j_1-m_1} \frac{(j_1+m_1+s)!(j_2+J-m_1-s)!}{s!(j_1-m_1-s)!(J-M-s)!(j_2-J+m_1+s)!} \qquad (5.19)$$

La sommation se fait sur les valeurs entières, non négatives de s pour lesquelles les arguments des factorielles au dénominateur sont non négatifs.

Il existe d'autres formules équivalentes à (5.19). Parmi celles-ci mentionnons l'expression ci-dessous plus symétrique, due également à Racah,

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J M \rangle = \delta(m_1 + m_2, M)$$
$$\times \left[ \frac{(2J+1)(j_1+j_2-J)!(j_1-j_2+J)!(-j_1+j_2+J)!}{(j_1+j_2+J+1)!} \right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\times \left[ (j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(J+M)!(J-M)! \right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\times \sum_z (-1)^z \frac{1}{z!(j_1+j_2-J-z)!(j_1-m_1-z)!(j_2+m_2-z)!(J-j_2+m_1+z)!(J-j_1-m_2+z)!} \qquad (5.20)$$

Lorsque l'un des moments cinétiques $j_1$, $j_2$ ou $J$ est nul, le coefficient de Clebsch-Gordan a une valeur très simple, que l'on peut déduire de l'une des formules (5.19) ou (5.20) ou obtenir directement par un raisonnement élémentaire. Considérons d'abord le cas où $j_2 = o$

et $j_1 = j$. Les règles de sélection (2.4) et (2.5) indiquent que

$$\langle j\,m\,o\,o \mid J\,M \rangle = \delta_{Jj}\,\delta_{Mm}\,\langle j\,m\,o\,o \mid j\,m \rangle . \tag{5.21}$$

Par ailleurs, la relation (1.19), dans laquelle $e^{i\delta} = +1$ en vertu de la convention de phase (2.3), montre que

$$\langle j\,j\,o\,o \mid j\,j \rangle = 1 . \tag{5.22}$$

Finalement, la relation de récurrence (3.4), dans laquelle on a fait $j_2 = m_2 = o$, $j_1 = J = j$ et $m_1 = M-1 = m$, donne

$$\langle j\,m\,o\,o \mid j\,m \rangle = \langle j\,j\,o\,o \mid j\,j \rangle . \tag{5.23}$$

Par conséquent

$$\langle j\,m\,o\,o \mid J\,M \rangle = \delta_{Jj}\,\delta_{Mm} . \tag{5.24}$$

Lorsque $J = M = o$, les règles de sélection (2.4) et (2.5) montrent que l'on doit avoir $j_2 = j_1$ et $m_2 = -m_1$ :

$$\langle j_1\,m_1\,j_2\,m_2 \mid o\,o \rangle = \delta_{j_2 j_1}\,\delta_{m_2,-m_1}\,\langle j_1\,m_1\,j_1\,-m_1 \mid o\,o \rangle . \tag{5.25}$$

Appliquant au membre de droite de (5.25) la relation de symétrie (4.26), on obtient

$$\langle j_1\,m_1\,j_1\,-m_1 \mid o\,o \rangle = (-1)^{j_1-m_1}\,(2j_1+1)^{-\frac{1}{2}}\,\langle j_1\,m_1\,o\,o \mid j_1\,m_1 \rangle . \tag{5.26}$$

Par conséquent

$$\langle j_1\,m_1\,j_2\,m_2 \mid o\,o \rangle = \delta_{j_2 j_1}\,\delta_{m_2,-m_1}\,\frac{(-1)^{j_1-m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} . \tag{5.27}$$

## 6. Symbole 3j de Wigner

Dans le coefficient de Clebsch-Gordan, il est clair que le moment cinétique total $\bar{J}$ n'est pas placé sur le même pied que les moments cinétiques composants $\bar{j}_1$ et $\bar{j}_2$ . De là découlent les propriétés de symétrie relativement complexes de ce coefficient lorsqu'une permutation de $J$ avec $j_1$ ou $j_2$ est mise en jeu.

Cependant le couplage de $\bar{j}_1$ et $\bar{j}_2$ pour former $\bar{J}$ est équivalent au couplage des trois moments cinétiques $\bar{j}_1$, $\bar{j}_2$ et $\bar{j}_3 = -\bar{J}$ pour donner une résultante nulle. Dans ce dernier mode de couplage , $\bar{j}_1$, $\bar{j}_2$ et $\bar{j}_3$ jouent essentiellement le même rôle. Ceci suggère la possibilité de définir, à partir du coefficient de Clebsch-Gordan, un autre coefficient doué d'une plus grande symétrie. Comme $\bar{j}_3$ est le transformé par renversement du temps de $\bar{J}$ et que ses vecteurs propres sont du type

$$K \,|\, JM \rangle = (-1)^{J+M} \,|\, J\,-M \rangle \,, \tag{6.1}$$

on s'attend à ce que le nouveau coefficient soit proportionnel à $(-1)^{J+M} \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \,|\, J\, -M \rangle$ . En choisissant le facteur de proportionnalité de manière que le coefficient soit de symétrie maximum, on obtient le symbole 3j de Wigner, qui est défini par

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 - j_2 - m_3} (2j_3+1)^{-\frac{1}{2}} \langle j_1\, m_1\, j_2\, m_2 \,|\, j_3\, -m_3 \rangle \,. \tag{6.2}$$

Il n'est différent de zéro que lorsque

$$m_1 + m_2 + m_3 = 0 \tag{6.3}$$

et que $j_1$, $j_2$ et $j_3$ satisfont les inégalités triangulaires $\delta\,(j_1 j_2 j_3)$.

Ses propriétés de symétrie se déduisent facilement de celles du coefficient de Clebsch-Gordan .

(i) Permutation paire des colonnes

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1-j_2-m_3} (2j_3+1)^{-\frac{1}{2}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 -m_3 \rangle \quad \text{en vertu de (6.2)}$$

$$= (-1)^{j_1-j_2-m_3} (2j_3+1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_2+m_2} \left( \frac{2j_3+1}{2j_1+1} \right)^{\frac{1}{2}} \langle j_2 -m_2 \, j_3 -m_3 | j_1 m_1 \rangle$$

en vertu de (4.26)

$$= (-1)^{j_1+m_2-m_3} (2j_1+1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_2+j_3-j_1} \langle j_2 m_2 \, j_3 m_3 | j_1 -m_1 \rangle$$

en vertu de (4.28)

$$= (-1)^{j_2+j_3+m_2-m_3} (2j_1+1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_2-j_3-m_1} (2j_1+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix}$$

en vertu de (6.2)

d'où

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} . \tag{6.4}$$

De même

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

en vertu de (6.2) et (4.27)

$$= (-1)^{j_2-m_1+m_3} (2j_2+1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_3+j_1-j_2} \langle j_3 m_3 \, j_1 m_1 | j_2 -m_2 \rangle$$

en vertu de (4.28)

$$= (-1)^{j_1+j_3-m_1+m_3} (2j_2+1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_3-j_1-m_2} (2j_2+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}$$

en vertu de (6.2)

d'où

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix} . \qquad (6.5)$$

Le symbole 3j reste donc inchangé pour une permutation paire de ses colonnes.

(ii) Permutation impaire des colonnes

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

en vertu de (6.2) et (4.13)

$$= (-1)^{2j_1-j_3-m_3} (2j_3+1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_2-j_1-m_3} (2j_3+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}$$

en vertu de (6.2)

d'où

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} . \qquad (6.6)$$

L'application de (6.4) et (6.5) conduit à

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} . \qquad (6.7)$$

Le symbole 3j est donc multiplié par la phase $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ lorsque l'on fait une permutation impaire des colonnes.

(iii) Changement de signe de $m_1$, $m_2$ et $m_3$

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

en vertu de (6.2) et (4.28)

$$= (-1)^{2j_1-j_3-m_3} (2j_3+1)^{-\frac{1}{2}} (-1)^{j_1-j_2+m_3} (2j_3+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}$$

en vertu de (6.2)

d'où

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} . \tag{6.8}$$

Le symbole 3j est donc multiplié par la phase $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ quand on change le signe des nombres quantiques magnétiques.

En contrepartie, les propriétés d'orthogonalité des symboles 3j ne sont pas aussi commodes. Les relations (2.6) et (2.7) deviennent

$$\sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j'_3 \\ m_1 & m_2 & m'_3 \end{pmatrix} = (2j_3+1)^{-1} \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3} \delta(j_1 j_2 j_3), \tag{6.9}$$

$$\sum_{j_3 m_3} (2j_3+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} . \tag{6.10}$$

Lorsque l'un des trois moments cinétiques $j_1$, $j_2$ ou $j_3$ est nul, le symbole 3j a une valeur très simple que l'on déduit des relations (5.24), (5.27) et (6.2). Pour $j_3 = m_3 = o$, on trouve

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & 0 \\ m_1 & m_2 & 0 \end{pmatrix} = \delta_{j_2 j_1} \; \delta_{m_2, -m_1} \; \frac{(-1)^{j_1 - m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} \; . \tag{6.11}$$

Les symboles 3j sont utiles à deux points de vue. En premier lieu, leur symétrie élevée est commode quand il est nécessaire d'évaluer numériquement ces coefficients, car elle simplifie la tabulation. En second lieu, ils jouent un rôle important dans la discussion du couplage de trois et quatre moments cinétiques, problème que nous aborderons dans le chapitre suivant.

## 7. Applications

### 7.1. Vecteurs propres du spin total de deux électrons

Considérons deux électrons de spins respectifs $s_1 = \frac{1}{2}$ et $s_2 = \frac{1}{2}$, représentés par les vecteurs propres

$$\left| \tfrac{1}{2} \; m_{s_1} \right\rangle = \chi_{m_{s_1}}(1) \tag{7.1}$$

et
$$\left| \tfrac{1}{2} \; m_{s_2} \right\rangle = \chi_{m_{s_2}}(2) \; . \tag{7.2}$$

Les vecteurs propres du spin total S (S = o ou 1) sont donnés par

$$\left| \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} \; S \, M_S \right\rangle = \sum_{m_{s_1} m_{s_2}} \left\langle \tfrac{1}{2} \; m_{s_1} \; \tfrac{1}{2} \; m_{s_2} \middle| S \, M_S \right\rangle \left| \tfrac{1}{2} \; m_{s_1} \right\rangle \left| \tfrac{1}{2} \; m_{s_2} \right\rangle . \tag{7.3}$$

Tenant compte des valeurs du coefficient de Clebsch-Gordan (voir table ), on obtient pour l'état singulet

$$\left| \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} \; 0 \, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \chi_{1/2}(1) \, \chi_{-1/2}(2) - \chi_{-1/2}(1) \, \chi_{1/2}(2) \right] \tag{7.4}$$

et pour les trois états triplets

$$\left| \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} \; 1 \, 1 \right\rangle = \chi_{1/2}(1) \, \chi_{1/2}(2) \; ,$$

$$\left| \tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2} \; 1 \, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \chi_{1/2}(1) \, \chi_{-1/2}(2) + \chi_{-1/2}(1) \, \chi_{1/2}(2) \right] , \tag{7.5}$$

$$\left|\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\;1\,-1\right\rangle = \chi_{-1/2}(1)\,\chi_{-1/2}(2) \quad .$$

Table de $\langle j_1\, m_1\, \frac{1}{2}\, m_2 | j\, m \rangle$

| $j \backslash m_2$ | $\frac{1}{2}$ | $-\frac{1}{2}$ |
|---|---|---|
| $j_1+\frac{1}{2}$ | $\left[\dfrac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right]^{\frac{1}{2}}$ | $\left[\dfrac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right]^{\frac{1}{2}}$ |
| $j_1-\frac{1}{2}$ | $-\left[\dfrac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right]^{\frac{1}{2}}$ | $\left[\dfrac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right]^{\frac{1}{2}}$ |

## 7.2. Vecteurs propres du moment cinétique total d'un électron

Considérons un électron de moment cinétique orbital $\ell$ et de spin $\frac{1}{2}$. Les vecteurs propres respectifs de ces deux moments cinétiques sont

$$|\ell\, m_\ell\rangle = Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi) \tag{7.6}$$

et $$\left|\tfrac{1}{2}\, m_s\right\rangle = \chi_{m_s} \; . \tag{7.7}$$

Les vecteurs propres du moment cinétique total $\bar{j} = \bar{\ell} + \bar{\frac{1}{2}}$ sont donnés par

$$\left|\ell\,\tfrac{1}{2}\,j\,m\right\rangle = \sum_{m_\ell m_s} \left\langle \ell\, m_\ell\, \tfrac{1}{2}\, m_s | j\, m\right\rangle |\ell\, m_\ell\rangle \left|\tfrac{1}{2}\, m_s\right\rangle . \tag{7.8}$$

Tenant compte des valeurs du coefficient de Clebsch-Gordan (voir table ), on obtient pour $j = \ell - \frac{1}{2}$

$$\left|\ell\,\tfrac{1}{2}\;\ell-\tfrac{1}{2}\;m\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\left[-\sqrt{\ell-m+\tfrac{1}{2}}\;Y_{\ell\, m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\,\chi_{\frac{1}{2}} + \sqrt{\ell+m+\tfrac{1}{2}}\;Y_{\ell\, m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\,\chi_{-\frac{1}{2}}\right], \tag{7.9}$$

et pour $j = \ell + \frac{1}{2}$

$$\left|\ell\,\tfrac{1}{2}\;\ell+\tfrac{1}{2}\;m\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\left[\sqrt{\ell+m+\tfrac{1}{2}}\;Y_{\ell\, m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\,\chi_{\frac{1}{2}} - \sqrt{\ell-m+\tfrac{1}{2}}\;Y_{\ell\, m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\,\chi_{-\frac{1}{2}}\right] . \tag{7.10}$$