Více o rotacích

pozn. v lin. alg. rozdíl lze složit z posunutí, rotace a zrcadlení (pokud smíme volit počátek stačí rotace a zrc.) $\boxed{R1}$

Kartézský systém ve 3D ... dán osami O_{xyz}

každá rotace $O_{xyz} \to O_{x'y'z'}$ lze popsat třemi parametry

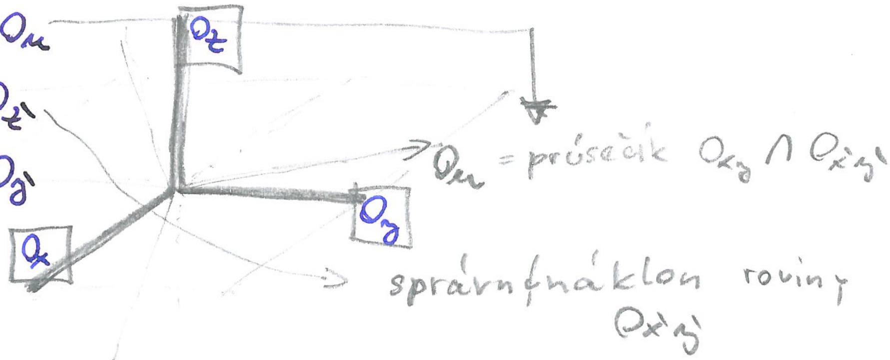
standardní volba ... Eulerovy úhly:

(1) rotace o α kolem O_z: $O_y \to O_u$

(2) rotace o β kolem O_u: $O_z \to O_{z'}$

(3) rotace o γ kolem $O_{z'}$: $O_u \to O_{y'}$

= konečná rotace uvnitř $O_{x'y'}$, aby sedly osy



Popis pomocí působení operátorů:

$$\hat R(\alpha,\beta,\gamma) = \hat R_{z'}(\gamma)\hat R_u(\beta)\hat R_z(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma \hat J_{z'}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\beta \hat J_u}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \hat J_z}$$

R ... unit. operátory $R_0(\alpha)^{-1} = R_0(-\alpha)$

J_u .. generátor rotace v původ. mysl. ... $J_u = R_z(\alpha) J_y R_z(-\alpha)$

$\Rightarrow R_u(\beta) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(-\alpha)$

podobně:

$$R_{z'}(\gamma) = R_u(\beta) R_z(\alpha) R_z(\gamma) R_z(-\alpha) R_u(-\beta) =$$

+ dosazení $\hat R(\alpha,\beta,\gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z}$

(podrobněji: $R_z(\alpha) R_y(\beta) \cancel{R_z(-\alpha)}\, \cancel{R_z(\alpha)}\, R_z(\gamma) R_z(-\alpha) \cancel{R_z(\alpha)} R_y(-\beta) R_z(-\alpha) R_z(\alpha) \cancel{R_y(\beta)} R_z(-\alpha) \cdot \cancel{R_z(\alpha)}$)

pozn: pozor na rozdíl aktivní / pasivní rotace .. zde aktivní
otočení objektu / otočení O_{xyz} → $\boxed{\text{liší se jen znaménko!}}$

Příklad $R(\alpha,\beta,\gamma)\,\psi(\vec x) = \psi(R^{-1}\cdot \vec x)$ kde R provádí otočení $\vec x$

matice např. $\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = R_z$

Rotační matice: ... reprezentace rot. operátorů v konkrétní bázi

$$\langle j'm'|\hat R(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle = \delta_{jj'}\, D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$$

$\delta_{jj'}$ je odvozen faktem, že J_x, J_y, J_z komutují s J^2 tj. $[\hat R, \hat J^2] = 0$

tj. $0 = \langle j'|\hat R \hat J^2 - \hat J^2 \hat R|j\rangle = (j'-j)\langle j'|\hat R|j\rangle$

Platí: $D^{(j)}_{m',m}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle jm'| e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z} |jm\rangle$

$$= e^{-\frac{i}{\cancel{\hbar}}(\alpha m' + \gamma m)}\, d^{(j)}_{m',m}(\beta)$$

kde $d^{(j)}_{m',m}(\beta) = \langle j,m'| e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y} |j,m\rangle$ (na CV udělat obec. směr $\vec{n}$)

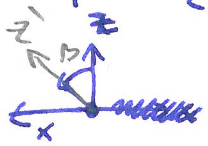
příklad: spin $\frac{1}{2}$ $\quad J_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$ $\quad$ přičemž $\sigma_y^2 = I$ (nebo $S=1$, a x,y,z ??)

tedy platí $e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y} = \exp\{-\frac{i}{2}\beta\sigma_y\} = \cos\frac{\beta}{2}\sigma_y - i\sin(\frac{\beta}{2}\sigma_y)$

$$= \cos\frac{\beta}{2}\cdot I - i(\sin\frac{\beta}{2})\cdot\sigma_y$$

tj $\quad d^{(1/2)}_{m',m}(\beta) = \begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$

např.: $\alpha = 0 = \gamma$



tj $\quad |x:\pm\rangle = \hat{R}(\beta = \frac{\pi}{2})|z:\pm\rangle$

tj $\quad |x:\pm\rangle = \sum_{i=\pm}|z:i\rangle\langle z:i|\hat{R}(\beta=\frac{\pi}{2})|z:\pm\rangle = \sum_{m'}|z:m'\rangle\, d^{(\frac{1}{2})}_{m',m=\pm}(\frac{\pi}{2})$

tj $\quad |x:+\rangle = (|z:+\rangle + |z:-\rangle)/\sqrt{2}$ $\qquad$ jak jsme dostali dříve

$\quad |x:-\rangle = (|z:+\rangle - |z:-\rangle)/\sqrt{2}$

zajímavost ... dvojznačnost spinu! $\quad \beta = 2\pi \ldots d^{(1/2)}(\beta) = \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

... jen znaménko

.. typické pro poloceločíselné S

příklad spin 1: $\quad S_y = \hbar\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix}$ $\quad S_y^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & -1\\ 0 & 2 & 0\\ -1 & 0 & 1\end{pmatrix}$ $\quad S_y^3 = \frac{\hbar^3}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix}$

$$\exp\{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y\} = \cos(\beta\frac{S_y}{\hbar}) - i\sin(\beta\frac{S_y}{\hbar}) = I + S_y^2(\cos\beta - 1) - i\sin\beta\cdot S_y$$

tj $\quad d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix}\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1-\cos\beta)\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta\\ \frac{1}{2}(1-\cos\beta) & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1+\cos\beta)\end{pmatrix}$

Rotace báze (obecně)

$$\hat{R}(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle = \sum_{j'm'}|j'm'\rangle\langle j'm'|\hat{R}(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle = \sum_{m'}|jm'\rangle D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$$

.. ireducibilní invar. podprostor vůči působení grupy rotací

... D-matice ... reprezentace grupy rotací na prostoru dimenze $(2j+1)$

Clebsch-Gordan ... rozklad dir. součinu reprezentací do ireducibilních reprezentací

– viz násl. strana (po pozn. o vztahu k $Y_l^m(\theta,\varphi)$)

Vztah D-matic a sfér. harmonik:

idea: z hodnoty $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ dostaneme v θ',φ' jen rotací

⇒ Y_{lm} až na normalizaci

$$Y_l^m(\theta',\varphi') = \hat{R}^{-1}(\alpha,\beta,\gamma)\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\theta,\varphi)\, D^{(l)}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma)^* \quad (*)$$

(unitarita D)

rotace $\hat{R}: (\theta,\varphi) \xrightarrow{R} (\theta',\varphi')$

(1): $\beta=\gamma=0$: $\hat{R}^{-1}(\alpha,0,0)\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \hat{R}(0,0,-\alpha)\, Y_l^m(\theta,\varphi) = Y_l^m(\theta,\varphi+\alpha)$

$$= \sum_{m'} Y_l^{m'}(\theta,\varphi)\, D^{(l)}_{mm'}(\alpha,0,0)^* = e^{i\alpha m}\, Y_l^m(\theta,\varphi$$

tj $Y_l^m(\theta,\alpha) = e^{im\alpha}\, Y_l^m(\theta,0)$

(2) spojitost $Y_l^m(\theta,\varphi)$ v bodě $\theta=0$ ⇒ $Y=0$ pro $m\neq 0$

tj $Y_l^m(0,0) = c_l\,\delta_{m0}$ $\quad c_l$ ← normalizace

(3) dosazení do $(*)$ →

$$Y_l^m(\theta',\varphi') = \sum_{m'} c_l\,\delta_{m'0}\, D^{(l)}_{mm'} = c_l\, D^{(l)}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma)^*$$

přitom α,β,γ zvoleny, aby $(0,0) \xrightarrow{R} (\theta',\varphi')$ tj. např. $\alpha=\varphi'$, $\beta=\theta'$, $\gamma=0$

$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$ ← srovn. s výrazem pro sfér. harmoniky dá tuto norm.

$$\Rightarrow\quad Y_l^m(\theta,\varphi) = \underbrace{c_l}_{=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}}\, D^{(l)}_{m0}(\varphi,\theta,0)^*$$

pozn: D_{m0} nezávis. na γ

---

pokračování pozn. o reprez. grup z předch. str.

nalezením komut. relací J_i a nalezením spektra J^2, J_z + matic. elem. J_i jsme našli v iredu. reprezentace rotací

- shrnout co je grupa
- grupa lin. operátorů na něj. prostoru ... grupa matic
- isomorfizmus a reprezentace grupy
- unitární transformace a reducibilní reprezentace
- D-matice jako ireducibilní representace grupy rotací
- tenzorový součin representací a jeho reducibilita →
- podrobněji: Clebsch-Gordanův rozvoj (obecně)

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} D^0 & & & \\ & D^1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & D^{(j)} \end{pmatrix}$$

$$D^{(j_1)}_{m_1m_1'}(R)\, D^{(j_2)}_{m_2m_2'}(R) = \sum_j \sum_{mm'} \langle j_1j_2 m_1m_2 | j_1j_2 jm\rangle \langle j_1j_2 m_1'm_2' | j_1j_2 jm'\rangle\, D^{(j)}_{mm'}(R)$$

$j = |j_1-j_2| \dots j_1+j_2$

$$D^{j_1} \otimes D^{j_2} = U^+ \begin{pmatrix} D^{j_1+j_2} & & & \\ & D^{j_1+j_2-1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & D^{|j_1-j_2|} \end{pmatrix} U$$

Podrobněji: reprezentace rotací v $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$

DK: $\hat{R}(R) = \hat{R}_1(R) \otimes \hat{R}_2(R)$ kde R... rotace repres. např. Euler. úhly (α, β, γ)

vyjádření v bázi:

$$\langle j_1 j_2 | m_1 m_2 | \hat{R}(R) | j_1 j_2, m_1' m_2' \rangle = \langle j_1 m_1 | \hat{R}(R) | j_1 m_1' \rangle \langle j_2 m_2 | \hat{R}(R) | j_2 m_2' \rangle$$

$$= D^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R)\, D^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R)$$

nebo dosazení C-G rozvoje $|j_1 j_2, m_1 m_2\rangle = \sum_{jm} |j_1 j_2, jm\rangle \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2, jm\rangle$

$$\sum_{jm} \sum_{j'm'} \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2, jm\rangle \underbrace{\langle j_1 j_2 | jm | \hat{R}(R) | j_1 j_2 | j'm'\rangle}_{D^{(j)}_{mm'}(R)\,\delta_{jj'}} \langle j_1 j_2, m_1' m_2' | j_1 j_2, j'm'\rangle$$

Q.E.D.

praktická aplikace: Gauntova formule

$$\boxed{\int d\Omega\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)^* Y_{\ell_1}^{m_1}(\theta,\varphi) Y_{\ell_2}^{m_2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell+1)}} \langle \ell_1 \ell_2, 00 | \ell_1 \ell_2, \ell 0\rangle \langle \ell_1 \ell_2 m_1 m_2 | \ell m\rangle}$$

DK: vyjádření Y pomocí D (předchozí strana):

$$Y_{\ell_1}^{m_1}(\theta,\varphi) Y_{\ell_2}^{m_2}(\theta,\varphi) = \frac{\sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}}{4\pi} D^{(\ell_1)}_{m_1 0}(\theta,\varphi,0)^* D^{(\ell_2)}_{m_2 0}(\theta,\varphi,0)^* \quad + \text{C-G. rozvoj:}$$

$$= \sum_\ell \sum_{mm'} \langle \ell_1 \ell_2, m_1 m_2 | \ell_1 \ell_2, \ell m\rangle \langle \ell_1 \ell_2, 00 | \ell m'\rangle \underbrace{D^{(\ell)}_{mm'}(\theta,\varphi,0)^*}_{Y_\ell^m(\theta,\varphi)} \quad \text{... jen člen } m'=0$$

$$+ \int Y_{\ell'}^{m'*}(\theta,\varphi) \quad \to \text{Q.E.D.}$$

význam formule: vyčísl. maticových elementů pro Coulombickou interakci:

$$V(\vec{r}_1) \sim \frac{1}{|r_1 - r_2|} = \frac{4\pi}{r_2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^\ell \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y^*_{\ell m}\left(\frac{\vec{r}_1}{r_1}\right) Y_{\ell m}\left(\frac{\vec{r}_2}{r_2}\right)$$

rozvoj pro $|\vec{r}_1| < |\vec{r}_2|$ $\quad r_i = |\vec{r}_i|$

... úplnost ~~rozvoje~~ ... splnoslovnic

OBECNÁ FORMULE PRO HODNOTY $D^{(j)}_{mm'}$

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!\,k!\,(j-k-m')!\,(k-m+m')!} \times$$

$$\times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'}$$

suma běží přes $\forall k$, aby argumenty faktoriálů byly kladné

Elegantní ale poměrně dlouhé odvození viz Sakurai str. 217

→ zajímavé samo o sobě: Schwingerův oscilátorový model momentu hybnosti

→ J^2, J_z je ekvivalentní jisté soustavě dvou nezáv. oscilátorů

→ libovolný moment hybn. si lze představit naskládaný z částic se spinem $\frac{1}{2}$

→ zájemci přečíst ale nezkouším

VEKTOROVÉ A TENZOROVÉ OPERÁTORY V QM

v klasické mechanice: rotace R: $x_i = \sum R_{ij} x_j$

vektor = veličina V_i: $V_i = \sum R_{ij} V_j$ ... stejné jako souř.

v QM: $|\alpha\rangle \to \hat{R}(R)|\alpha\rangle$

střední hodnoty $\langle\alpha|\hat{V}_i|\alpha\rangle \longrightarrow \langle\alpha|\hat{R}^+(R)\hat{V}_i\hat{R}(R)|\alpha\rangle = \sum_j R_{ij}\langle\alpha|V_j|\alpha\rangle$

Požadujeme tuto rovnost; chceme aby $\langle\alpha|\hat{V}_i|\alpha\rangle$ (měřitelné) byly složky vektoru

rovnost platí $\forall |\alpha\rangle \Rightarrow$ operátorová rovnost:

$$(*) \qquad \boxed{\hat{R}(R)^+ V_i \hat{R}(R) = \sum_j R_{ij}\hat{V}_j}$$

... lze brát jako def vektoru, ale najdeme jednodušší:

uvažujeme infinitesimální rotace kolem osy $\vec{n}$ a úhel ε

$$\hat{R} = \exp\{-\tfrac{i}{\hbar}\varepsilon\vec{J}\cdot\vec{n}\}$$

speciální případ: rotace kolem osy z: $\hat{R} = \exp\{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{J}_z\}$

rotační matice $R = \begin{pmatrix}\cos\varepsilon & -\sin\varepsilon & 0\\ \sin\varepsilon & \cos\varepsilon & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix}1 & -\varepsilon & 0\\ \varepsilon & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$

rozvoj $(*)$ do 1. ř. v ε:

$$\left(I + \tfrac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{J}_z\right)\hat{V}_i\left(I - \tfrac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{J}_z\right) = \sum_j R_{ij}\hat{V}_j$$

speciálně:

$$\left.\begin{aligned} x:&\quad \hat{V}_x + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[\hat{V}_x, \hat{J}_z] = \hat{V}_x - \varepsilon\hat{V}_y\\ y:&\quad \hat{V}_y + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[\hat{V}_y, J_z] = V_y + \varepsilon\hat{V}_x\\ z:&\quad \hat{V}_z + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[\hat{V}_z, J_z] = V_z \end{aligned}\right\} \to \boxed{[\hat{V}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{V}_k}$$

Definice vektorového operátoru

pozn: def $\nearrow$ je ekviv. $(*)$ ... viz vzorec $e^{\frac{iJ\phi}{\hbar}} V e^{\frac{-iJ\phi}{\hbar}} = \sum_n$

příklady: samotné $\hat{J}_i$ tvoří vektor, $\hat{x}_i$, $\hat{p}_i$

Ireducibilní komponenty tenzorů

... nejdříve kartézské komponenty .. $T_{ijk\ldots} = \sum_{i'j'k'\ldots} \underbrace{R_{ii'}R_{jj'}R_{kk'}}\, T_{i'j'k'\ldots}$

pohled $T_{ijk\ldots}$ chápeme jako prvek vektor. prostoru je $\uparrow$ násob. matice

.. tj. reprezentace grupy rotací ... reducibilní $\to$ musí jít rozložit

tj. existují kombinace T_{ijk}, které se transformují jako $|jm\rangle$ $m = -j \ldots j$

tj. maticemi $D^{(j)}_{mm'}$

PŘÍKLAD: tenzor 2. řádu: T_{ij} ... stopa je skalár (1 parametr)

ve spec případě $T_{ij} = U_i U_j$ .. diad. součin .. stopa je skalár. souč. $\vec{U}\cdot\vec{V}$

R6

antisymetrická část, se transf. jako vektor … 3 parametry

$\frac{T_{ij}-T_{ji}}{2}$ … v případě $T_{ij}=U_iU_j$ je antisym. ekviv. složkám $\vec{U}\times\vec{V}$

symetrická bezestopá část $\frac{T_{ij}+T_{ji}}{2}-\frac{T_{ii}}{3}\delta_{ij}$ … 5 parametrů

dimenze $\underbrace{1,3,5}_{9}$ odpovídají $j=0,1,2$

V analogii s (*) definoval sfér. tenzory jako lin. kombinace komponent obyč. tenzoru které se transf. jako $|jm\rangle$ .. pomocí $D^{(j)}$

Def: Ireducibilní tenzorový operátor j-tého řádu
(sférický tenzor ↔ alternat. název)

je $(2j+1)$-tice operátorů $\hat{T}^{(j)}_m$ $\quad m=-j,\dots j,$

která se transformuje jako: $$\hat{\mathcal{R}}^+(R)\,\hat{T}^{(j)}_m\,\hat{\mathcal{R}}(R)=\sum_{m'=-j}^{j}D^{(j)*}_{mm'}(R)\,\hat{T}^{(j)}_{m'}\qquad (*S)$$

Alternativní definice:

v (*S) vezmeme infinitesimální rotace:

$$\Rightarrow (i)\quad \boxed{[\hat{J}_z,\hat{T}^{(j)}_m]=\hbar m\,\hat{T}^{(j)}_m}$$
$$(ii)\quad \boxed{[\hat{J}_\pm,\hat{T}^{(j)}_m]=\hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\;\hat{T}^{(j)}_{m\pm 1}}$$

.. def ireduc. tenzor. operátor řádu j

pozn: a komut. relací ↑ se opět dá rekonstruovat (*S) a obě def jsou ekvivalentní

pozn: (i) a (ii) totéž jako $[\hat{J}_i,\hat{T}_m]=\sum_{m'}\hat{T}_{m'}\langle m'|\hat{J}_i|m\rangle$

DK: ① přepíšeme (*S) pro rotace kolem osy $\vec{n}$ o infinit. úhel ε:

$$\hat{\mathcal{R}}(R)=\left[\hat{I}-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\,\hat{\vec{J}}\cdot\vec{n}\right]\qquad D^{(j)}_{mm'}=\langle jm|\left[\hat{I}-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\,\hat{\vec{J}}\cdot\vec{n}\right]|jm'\rangle$$

+ dosazení do (*S):

$$\left[\hat{I}+\frac{i}{\hbar}\varepsilon\,\hat{\vec{J}}\cdot\vec{n}\right]\cdot\hat{T}^{(j)}_m\left[\hat{I}-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\,\hat{\vec{J}}\cdot\vec{n}\right]=\sum_{m'}\underbrace{\langle jm|\hat{I}-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{\vec{J}}\cdot\vec{n}|jm'\rangle^*}_{\langle jm'|I+\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{\vec{J}}\cdot\vec{n}|jm\rangle}\hat{T}^{(j)}_{m'}$$

$$\longrightarrow\quad [\hat{\vec{J}}\cdot\vec{n},\hat{T}^{(j)}_m]=\sum_{m'}\hat{T}^{(j)}_{m'}\langle jm'|\hat{\vec{J}}\cdot\vec{n}|jm\rangle$$

+ aplikace na $\vec{n}=\vec{e}_z \Rightarrow (i)$

aplikace na $\vec{n}=\vec{e}_x$: $\quad [\hat{J}_x,\hat{T}^{(j)}_m]=\sum_{m'}\hat{T}^{(j)}_{m'}\langle jm'|\hat{J}_x|jm\rangle$

$\vec{n}=\vec{e}_y$: $\quad (\pm i)\cdot|\quad [\hat{J}_y,\hat{T}^{(j)}_m]=\sum_{m'}\hat{T}^{(j)}_{m'}\langle jm'|\hat{J}_y|jm\rangle$

$$[\hat{J}_\pm,\hat{T}^{(j)}_m]=\sum_{m'}\hat{T}^{(j)}_{m'}\underbrace{\langle jm'|\hat{J}_\pm|jm\rangle}_{\hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\delta_{m',m\pm1}}$$

$\Rightarrow (ii)$

Příklady ireducibilních tenzor. operátorů

① skalár: $j=0$: … $\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}=0$

tj. $[J_z, T_0^{(0)}]=0$

$[J_\pm, T_0^{(0)}]=0 \Rightarrow [J_x, T_0]=[J_y, T_0]=0$

② vektor: $j=1$: … $\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}=\sqrt{2}$ nebo 0

pokud $\hat V_x, \hat V_y, \hat V_z$ tvoří vektor potom jeho ireducibilními komponentami jsou

$$\hat T_0^{(1)} = \hat V_z$$
$$\hat T_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{(V_x \pm i V_y)}{\sqrt{2}}$$
… lze ověřit komut. relace

Pozadí: příkladem vektorového operátoru je $(\hat x, \hat y, \hat z) \equiv \hat{\vec Q}$ po dosazení do $r^\ell Y_{\ell m}\left(\frac{\vec Q}{r}\right)$ dostaneme operátor, který se transformuje podobně jako $Y_{\ell m}$ pomocí $D^{(\ell)}_{m'm}$. Přesněji

$$\mathcal{R}(R)\, Y_{\ell m}(Q) \equiv Y_{\ell m}(R^{-1}_{ij} x_j) = \sum_{m'} D^{(\ell)}_{m'm}\, Y_{\ell m'}(Q)$$

+ dosazený operátor $Y_{\ell m}(\hat Q)$ se při rotacích transf. jako

$$\mathcal{R}(R^{-1})^{-1}\, Y_{\ell m}(Q)\, \mathcal{R}(R^{-1}) = Y_{\ell m}(\mathcal{R}^{-1} Q \mathcal{R}) = Y_{\ell m}\Big(\sum_j R^{-1}_{ij} x_j\Big) =$$

+ interpretuji jako ireduc. komp. tenzoru $T^{\ell}_m \equiv Y_{\ell m}$ a požaduji

tj. $$\mathcal{R}(R)\, T^{(\ell)}_m\, \mathcal{R}(R)^\dagger = \sum_{m'} D^{(\ell)}_{m'm}\, T^{(\ell)}_{m'}$$ což je … se subst. $R \to R^{-1}$

---

ve světle tohoto je $\hat T^{(1)}_m$ dosazení $\hat V_i$ do Y_{1m}:

$$r\, Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\, z$$

$$r\, Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot (\mp 1)\, \frac{x \pm i y}{\sqrt{2}}$$

Podobně:

$$r^2 Y_{20} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{\sqrt{6}}$$

$$r^2 Y_{2\pm 1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, (\mp 1)\, (x \pm i y) z$$

$$r^2 Y_{2\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, \frac{(x \pm i y)^2}{2}$$

a dosazení $\hat Q$ tvoří ireduc. tenzor 2. řádu

OBECNÝ TENZOR T_{ij} rozložíme na složky:

$$T_0^{(0)} = -\frac{1}{\sqrt{3}} (T_{xx} + T_{yy} + T_{zz})$$

~~vektorovou~~ antisym. část:

$$T_0^{(1)} = \frac{i}{\sqrt{2}} (T_{xy} - T_{yx})$$

$$T_{\pm 1}^{(1)} = \frac{1}{2} \left[T_{zx} - T_{xz} \pm i (T_{zy} - T_{yz}) \right]$$

a bezestop. sym. část

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} (2T_{zz} - T_{xx} - T_{yy})$$

$$T_{\pm 1}^{(2)} = \frac{1}{2} \left[\mp (T_{zx} + T_{xz}) - i (T_{zy} + T_{yz}) \right]$$

$$T_{\pm 2}^{(2)} = \frac{1}{2} \left[T_{xx} - T_{yy} \pm i (T_{xy} + T_{yx}) \right]$$

Tenzorový součin

<u>Def</u>: nechť $\hat{S}^{(j_1)}_{m_1}$ a $\hat{T}^{(j_2)}_{m_2}$ jsou ireducibilní tenzorové operátory řádů j_1 a j_2. Def <u>tenzorový součin</u>

$$\hat{U}^{(j)}_{m} = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2, j m \rangle \hat{S}^{(j_1)}_{m_1} \hat{T}^{(j_2)}_{m_2}$$

<u>Věta</u>: $\hat{U}^{(j)}_{m}$ je ireduc. tenzor řádu j

pozadí .. funguje jako skládání $Y_{\ell_1 m_1}$ $Y_{\ell_2 m_2}$

DK: z def. tenzor. oper.:

$$R^{+}(R)\, \hat{U}^{(j)}_{m}\, R(R) = \sum_{m_1 m_2} \langle m_1 m_2 | j m \rangle\, R^{+} \hat{S}^{(j_1)}_{m_1} R\, R^{+} \hat{T}^{(j_2)}_{m_2} R$$

(def tenzor. pro S, T): $$= \sum_{m_1 m_2} \sum_{m_1' m_2'} \langle m_1 m_2 | j m \rangle \underbrace{D^{(j_1)}_{m_1' m_1}(R^{-1}) D^{(j_2)}_{m_2' m_2}(R^{-1})}_{\sum_{j'' m'' m'''} \langle m_1 m_2 | j'' m'' \rangle \langle m_1' m_2' | j'' m''' \rangle D^{(j'')}_{m''' m''}} \hat{S}^{(j_1)}_{m_1'} \hat{T}^{(j_2)}_{m_2'}$$

C-G rozvoj $\longrightarrow$
(rozklad reprezent.)

+ užití OG-relace pro C-G koef: ... $\delta_{jj''}\delta_{mm''}$

+ sumace přes δ

$$= \sum_{m_1' m_2' m'} \langle m_1' m_2' | j m' \rangle D^{(j)}_{m m'} \hat{S}^{(j_1)}_{m_1'} \hat{T}^{(j_2)}_{m_2'}$$

$= U^{(j)}_{m'}$

$$= \sum_{m'} D^{(j)}_{m m'}(R^{-1})\, U^{(j)}_{m'} = \sum_{m'} D^{(j)*}_{m' m}(R)\, U^{(j)}_{m'}$$

<u>příklad</u>: pokud $\hat{S}^{(1)}$ a $\hat{T}^{(1)}$ jsou ireduc. složky vektorových operátorů $\hat{S}_i$, $\hat{T}_i$ tj. $S^{(1)}_0 = S_z$, $S^{(1)}_{\pm 1} = \mp \frac{S_x \pm i S_y}{\sqrt{2}}$

(skalár. součin)

Potom: $$\hat{U}^{(0)}_0 = \sum_{m_1 m_2} \langle 1 1 m_1 m_2 | 1 1 0 0 \rangle S^{(1)}_{m_1} T^{(1)}_{m_2}$$

$\hookrightarrow$ nenulové jen $m_1 m_2 = (00) = -\frac{1}{\sqrt{3}}$; $(-1,1) = (1,-1) = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$$= -\frac{1}{\sqrt{3}}\left[-S_0 T_0 + S_1 T_{-1} + S_{-1} T_1\right] = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(S_x T_x + S_y T_y + S_z T_z\right)$$

Srovn s předch. stranou: pokud $U_{ij} = S_i T_j$

$\hat{U}^{(1)}_{m}$ jsou potom ireduc. složky $\vec{S} \times \vec{T}$

$\hat{U}^{(2)}_{m}$ skylá část diadického součinu vektorů

Maticové elementy tenzorových operátorů

Motivace: zobecnění formule pro $\int Y^*_{\ell m}\, Y_{\ell_1 m_1}\, Y_{\ell_2 m_2}\, d\Omega$ viz R4

vektor — operátor v x-reprezentaci — vektor

Tu jsme odvodili na základě $Y_{\ell m} \sim \sum_{m_1 m_2} \langle m_1 m_2 | \ell m\rangle\, Y_{\ell_1 m_1} Y_{\ell_2 m_2}$

podobně si ukážeme že $\hat T^{(j_1)}_{m_1}|j_2 m_2\rangle$ se chová jako $|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$

neboť
$$\hat J_i \hat T^{(j_1)}_{m_1}|j_2 m_2\rangle = \sum_{m_1'} \langle j_1 m_1'|\hat J_i|j_1 m_1\rangle\, T^{(j_1)}_{m_1'}|j_2 m_2\rangle + \sum_{m_2'}\langle j_2 m_2'|\hat J_i|j_2 m_2\rangle\, T^{(j_1)}_{m_1}|j_2 m_2'\rangle$$

složení

tj. $\hat J_i$ působí jako $J^{(j_1)}_{m_1' m_1} + J^{(j_2)}_{m_2' m_2}$

$\rightarrow$ $\sum_{m_1 m_2}\langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j_1 j_2, j m\rangle\, \hat T^{(j_1)}_{m_1}|j_2 m_2\rangle$ se chová jako $|j m\rangle$

Wigner - Eckartův teorém

$$\langle j_1 m_1 \alpha_1|\hat T^{(j)}_m|j_2 m_2 \alpha_2\rangle = \langle j j_2, m m_2|j j_2, j_1 m_1\rangle \cdot \frac{\langle j_1\alpha_1\|T^{(j)}\|j_2\alpha_2\rangle}{\sqrt{2j_1+1}}$$

$$= (-1)^{j_1-m_1}\begin{pmatrix} j_1 & j & j_2\\ -m_1 & m & m_2\end{pmatrix}\langle j_1\alpha_1\|T^{(j)}\|j_2\alpha_2\rangle$$

pozn:
- $\hat T^{(j)}_m$ je ireducibilní tenzor. oper.;
- $|j m \alpha\rangle$ vl. stavy J^2, J_z, A; kde A doplňuje J^2, J_z na ÚSKO
- teorém říká, že závislost na m, m_1, m_2 je jako C-G koeficient
- současně to ~~definuje~~ říká kdy je $\langle T\rangle$ nulový, tj. nenulový jen pokud $m_1 = m+m_2$ a $j_1 j_2 j$ splňují Δ nerovnost.
- velká úspora výpočtů ... jedno číslo místo $(2j+1)(2j_1+1)(2j_2+1)$
- $\langle j_1\alpha_1\|T^{(j)}\|j_2\alpha_2\rangle$ je konstanta úměrnosti "redok. maticový element".

DK: def tenzor operátoru:

$$\langle j_1 m_1 \alpha_1|[\hat J_\pm, \hat T^{(j)}_m]|j_2 m_2\alpha_2\rangle = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\langle j_1 m_1\alpha_1|T^{(j)}_{m\pm1}|j_2 m_2 \alpha_2\rangle$$

$$= \sqrt{(j_1\pm m_1)(j_1\mp m_1+1)}\,\langle j_1, m_1\mp1|T^{(j)}_m|j_2 m_2\alpha_2\rangle - \sqrt{(j_2\mp m_2)(j_2\pm m_2+1)}\,\langle j_1 m_1\alpha_1|T^{(j)}_m|j_2 m_2 \pm 1\, \alpha_2\rangle$$

výsledek je totožný s rekurz. relacemi pro $\langle j j_2, m m_2|j j_2, j_1 m_1\rangle$ tj. určují závislost na m_1, m_2, m pro fixní $j_1 j_2 j$ až na celkovou normalizaci, tj. konstantu závislou na $j_1 j_2 j$. Tu označíme

$$\frac{\langle j_1\alpha_1\|T^{(j)}\|j_2\alpha_2\rangle}{\sqrt{2j_1+1}}$$

... jen označení

... faktor ve jmenovateli je vybrán, aby výsledek měl jednodušší tvar po přepsání C-G jako Wigner (3j)

PŘ: aplikace na skalární operátor: $S \equiv T^{(0)}_0$

$$\langle j_1 m_1 \alpha_1 | S | j_2 m_2 \alpha_2\rangle = \delta_{j_1 j_2}\delta_{m_1 m_2} \frac{\langle j_1\alpha_1\|S\|j_2\alpha_2\rangle}{\sqrt{2j_1+1}}$$

vektorový operátor: $\hat V_i \longrightarrow \hat V^{(1)}_m$ ... iredukc. komponenty

W-E teorém říká, že $\langle j_1 m_1\alpha_1|\hat V^{(1)}_m|j_2 m_2\alpha_2\rangle$ může být nenulový jen, když: $m_1 = m_2 + m$ tj $\Delta m = m_2 - m_1 \lessgtr {}^{0}_{\pm 1}$

a $(j_1 j_2 1)$ splňují Δ-nerovnost tj $\Delta j \lessgtr {}^{0}_{\pm 1}$

užitečná věta umožňuje počítat matic. elementy s $\boxed{j_1 = j_2}$ libovolného vektorov. operátoru pomocí elementů J

Projekční věta:

$$\langle j_1 m_1\alpha_1|\hat V^{(1)}_m|j_1 m_2\alpha_2\rangle = \frac{\langle j_1 m_1\alpha_1|\hat{\vec J}\cdot\hat{\vec V}|j_1 m_1\alpha_2\rangle}{\hbar^2 j_1(j_1+1)}\langle j_1 m_1|\hat J^{(1)}_m|j_1 m_2\rangle$$

DK: začneme výpočtem $\hat{\vec J}\cdot\hat{\vec V} = J_z V_z - J_{+1}V_{-1} - J_{-1}V_{+1} = \sum_{m'=-1}^{1}(-1)^{m'} J^{(1)}_{-m'} V^{(1)}_{m'}$

tj $$\langle j_1 m_1\alpha_1|\hat{\vec J}\cdot\hat{\vec V}|j_1 m_1\alpha_2\rangle = \sum_{\alpha j m m'} (-1)^{m'} \underbrace{\langle j_1 m_1 \alpha_1|J^{(1)}_{-m'}|j m \alpha\rangle}_{\sim\delta_{j_1 j}\delta_{\alpha_1\alpha}\ \text{+ nezáv. na } \alpha} \underbrace{\langle j m\alpha|V^{(1)}_{m'}|j_1 m_1\alpha_2\rangle}_{\overset{W.E:}{=}\langle j_1 1, m_1 m'|j_1 1\, j m\rangle \frac{\langle j\alpha\|V\|j_1\alpha_2\rangle}{\sqrt{2j+1}}}$$

Mezihra: určení $\langle j_1 m_1\alpha_1|J^{(1)}_m|j_2 m_2\alpha_2\rangle \overset{WE}{=} \langle j_2 1, m_2 m|j_2 1\, j_1 m_1\rangle \frac{\langle j_1\alpha_1\|J^{(1)}\|j_2\alpha_2\rangle}{\sqrt{2j_1+1}}$

redukovaný element můžeme určit konkr. volbou m (nezávisí na m): $m=0$ .. $J_m = J_z$

$$\langle j_1 m_1 \alpha_1|J_z|j_2 m_2\alpha_2\rangle = \hbar m_2 \delta_{m_1m_2}\delta_{j_1j_2}\delta_{\alpha_1\alpha_2} \overset{\text{nebo}\ WE}{=} \langle j_2 1, m_2 0|j_2 1\, j_1 m_1\rangle \frac{\langle\ \|J\|\ \rangle}{\sqrt{2j_1+1}}$$

$\Rightarrow$ redukc. element musí být $\sim \delta_{\alpha_1\alpha_2}\delta_{j_1j_2}$ a $\delta_{m_1m_2}$ je schovaná v C.G

konst. úměrnosti ze spec volby $j_1=j_2=j=m_1=m_2$ ... $\langle j1j0|j1jj\rangle = \sqrt{\frac{j}{j+1}}$

$\Rightarrow \langle j_1\alpha_1\|\hat J\|j_2\alpha_2\rangle = \hbar\sqrt{j_1(j_1+1)}\cdot\sqrt{2j_1+1}\,\delta_{\alpha_1\alpha_2}\delta_{j_1j_2}$

tedy jen ze symetrie máme že $\langle\ldots|J^{(1)}_m|\ldots\rangle$ diagonální v j a α a nezávisí na α

návrat k $$\langle j_1 m_1\alpha_1|\vec J\cdot\vec V|j_1 m_1\alpha_2\rangle = \underbrace{\sum_{m m'}(-1)^{m'}\langle j_1 m_1|J_{-m'}^{(1)}|j_1 m\rangle\langle j_1 1 m_1 m'|j_1 1\, j_1 m\rangle}_{C_{j_1m_1}} \frac{\langle j_1\alpha_1\|V\|j_1\alpha_2\rangle}{\sqrt{2j_1+1}}$$

$C_{j_1m_1}$ lze určit pro $\vec V=\vec J$ protože nezávisí na $\vec V$ navíc nezávisí na α_1 ... $\alpha_2=\alpha_1$

tj $\hbar^2 j_1(j_1+1) = \langle j_1 m_1\alpha_1|J^2|j_1m_1\alpha\rangle = C_{j_1m_1}\langle j_1\alpha_1\|J\|j_1\alpha_1\rangle \Rightarrow C_{j_1m_1} = \frac{\hbar^2 j_1(j_1+1)}{\langle j_1 m_1\|J\|j_1\alpha_1\rangle}$

teď už můžeme

$$\langle j_1 m_1\alpha_1|V^{(1)}_m|j_1 m_2\alpha_2\rangle \overset{W.E.}{=} \frac{\langle j_1 1, m_2 m|j_1 1\, j_1 m_1\rangle}{\sqrt{2j_1+1}} \langle j_1\alpha_1\|V\|j_1\alpha_2\rangle = \text{C.B.D.}$$

dosaz. z $\langle j_1 m_1|J_m|j_1 m_2\rangle \overset{W.E}{=} \frac{\langle j_1 1 m_2 m|j_1 1\, j_1 m_1\rangle}{\sqrt{2j_1+1}}\langle j_1\|J\|j_1\rangle$

$$= \frac{\langle\,|J\cdot V|\,\rangle}{C_{j_1m_1}} = \frac{\langle\,|J\cdot V|\,\rangle\cdot\langle\,\|J\|\,\rangle}{\hbar^2 j_1(j_1+1)}$$