VI. FORGATÁSI MÁTRIXOK

Az infinitezimális transzformációk generátorai

Jelölje $\left|\psi_j\right\rangle$ egy rendszer teljes sajátvektor rendszerét, s legyen **U** egy lineáris transzformáció mátrixa. Ekkor

$$\left|\psi'_j\right\rangle = \mathbf{U}\left|\psi_j\right\rangle \ ,$$
$$\left\langle\psi'_i\middle|\psi'_j\right\rangle = \left\langle\psi_i\middle|\mathbf{U}^{+}\mathbf{U}\middle|\psi_j\right\rangle \ .$$

Amennyiben **U** unitér matrix ($\mathbf{U}^{+} = \mathbf{U}^{-1}$), a transzformáció megtartja a “vektorok” hosszát és a bármely két vektor által bezárt szöget.

Legyen $\hat{Q}$ egy tetszőleges operátor. Ekkor azt írhatjuk, hogy

$$Q_{ij} = \left\langle\psi_i\middle|\hat{Q}\middle|\psi_j\right\rangle$$

és

$$Q_{ij} = \left\langle\psi_i\middle|\mathbf{U}^{+}\mathbf{U}\hat{Q}\mathbf{U}^{+}\mathbf{U}\middle|\psi_j\right\rangle = \left\langle\psi'_i\middle|\mathbf{U}\hat{Q}\mathbf{U}^{+}\middle|\psi'_j\right\rangle = Q'_{ij} \ .$$

Unitér transzformáció esetén

$$\hat{Q}' = \mathbf{U}\hat{Q}\mathbf{U}^{+} = \mathbf{U}\hat{Q}\mathbf{U}^{-1} \ .$$

Nyilván rendkívül kis ellépésekre felírható, hogy

$$\mathbf{U} = \mathbf{I} + i\varepsilon\mathbf{S}$$

ahol ε infinitezimális valós mennyiség és **S** az infinitezimális transzformáció generátora. Továbbá,

$$\mathbf{U}^{+}\mathbf{U} = \mathbf{I} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{S}}^{+} = \hat{\mathbf{S}},$$

azaz **S** hermitikus operátor.

Végezzünk el egymás után n db infinitezimális transzformációt, és legyen $\delta = \varepsilon / n$, ekkor ($\lim_{n\to\infty}(1 + a/n)^n = e^a$ miatt)

$$\mathbf{U} = \left[\mathbf{I} + i\delta\hat{\mathbf{S}}\right]^n \to \mathbf{U} = \lim_{\delta\to 0}\left[\mathbf{I} + i\delta\hat{\mathbf{S}}\right]^n = \lim_{n\to\infty}\left[\mathbf{I} + i\frac{\varepsilon}{n}\hat{\mathbf{S}}\right]^n = \exp\left(i\varepsilon\hat{\mathbf{S}}\right) .$$

Tehát azt írhatjuk, hogy

$$\boxed{\mathbf{U} = \exp\left(i\varepsilon\hat{\mathbf{S}}\right)}$$

Az exponenciális függvény tulajdonságai miatt **U** és $\hat{\mathbf{S}}$ természetesen kommutálnak egymással.

Nézzünk egy-két speciális esetet, hogy jobban megérthessük a generátorok felhasználását és alkalmazását ($\hbar = 1$ egységben).

1.) Lineáris kitérítés, $\hat{D}(z) = \exp(-izp_z)$

$$z_0 \mapsto z' = z_0 - z$$

$$\hat{D}(z)\left|z_0\right\rangle = \left|z'\right\rangle$$

$$\left|z'\right\rangle = \left|z_0\right\rangle + (-z)\frac{\partial}{\partial z}\left|z_0\right\rangle + \frac{1}{2!}(-z)^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\left|z_0\right\rangle + \ldots = \exp\left(-z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left|z_0\right\rangle$$

$$p_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$$

2.) Forgatás z tengely körül

$$\left|\phi'\right\rangle = \exp\left(-\phi\frac{\partial}{\partial \phi}\right)\left|\phi_0\right\rangle$$

$$\hat{R}_z(\phi) = \exp(-i\phi J_z)$$

Tehát, elvárásainkkal megegyezően, az impulzusmomentum operátor z komponense a z tengely körüli infinitezimális forgatás generátora.

3.) Tetszőleges tengely ($\hat{n}$) körül tetszőleges szöggel (α) történő elforgatás

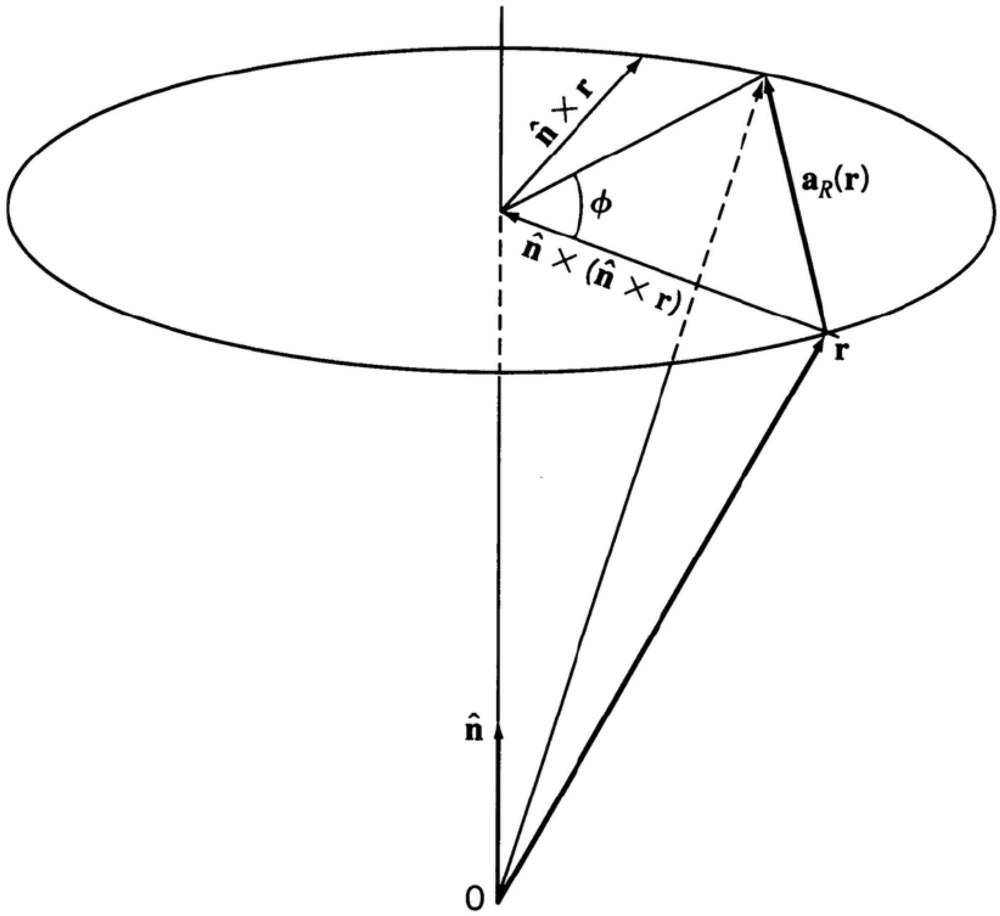
$$\hat{R}_n(\alpha) = \exp\left(-i\alpha\hat{J}\cdot\hat{n}\right)$$

$$\hat{J}\cdot\hat{n} = -i\frac{\partial}{\partial \alpha}$$

A forgatási operátor egy $\psi(\mathbf{r})$ hullámfüggvénnyel jellemzett állapotot egy olyan új állapotba forgat, melyre $\psi'(\mathbf{r}) = \hat{R}_n\psi(\mathbf{r})$. Bármely $\hat{A}$ operátorra egy forgatással transzformált $\hat{A}'$ operátort definiálhatunk, $\hat{A}'\psi'(\mathbf{r}) = \hat{R}_n\hat{A}\psi(\mathbf{r})$, azaz

$$\hat{A}' = \hat{R}_n\hat{A}R_n^+ = \exp\left(-i\phi\hat{n}\cdot\hat{L}\right)\hat{A}\exp\left(i\phi\hat{n}\cdot\hat{L}\right).$$

A forgatástól a kinetikus energia operátorig



$$\mathbf{a}_R(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r})(1 - \cos\phi) + \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{r}\sin\phi$$

(a)

Forgatás Euler szögekkel

Egy $\hat{\mathbf{n}}$ tengely körüli tetszőleges α szögű ("síkbeli") forgatásra tehát felírhatjuk ($\hbar = 1$ egységben), hogy

$$\mathbf{R}_n(\alpha) = \exp(-i\alpha\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}). \qquad (1)$$

Az (1) egyenlet alapján a ϕ, θ és χ Euler-szögekkel (y konvenció) történő forgatás a következő alakban írható fel:

$$\begin{aligned}\mathbf{R}(\phi,\theta,\chi) &= \exp(-i\chi\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}_\chi)\exp(-i\theta\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}_\theta)\exp(-i\phi\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}_\phi) = \\ &= \exp(-i\chi J_z)\exp(-i\theta J_N)\exp(-i\phi J_Z)\end{aligned}, \qquad (2)$$

ahol természetesen a forgatási sorrend jobbról balra értendő.

A (2) egyenlettel ellentétben, melyben mind az F (tércentrált), mind a g (testcentrált) koordinátarendszerek előfordulnak, a forgatást fel lehet írni egyetlen (jelen esetben az F) koordinátarendszerre történő hivatkozással:

$$\mathbf{R}(\phi,\theta,\chi) = \exp(-i\phi J_Z)\exp(-i\theta J_Y)\exp(-i\chi J_Z). \qquad (3)$$

A (3) egyenletből látszik, hogy a (2) egyenlethez képest "mindössze" annyi történt, hogy a forgatások sorrendjét változtattuk meg! Fontos észrevétel: kitüntetett szerephez jutott a Z (kvantálási) tengely, hiszen két esetben is „körülötte” történik a forgatás!

Bizonyítás:

$$\exp(-i\chi J_z) = \exp(-i\theta J_N)\exp(-i\chi J_Z)\exp(i\theta J_N)\ ,$$
$$\exp(-i\theta J_N) = \exp(-i\phi J_Z)\exp(-i\theta J_Y)\exp(i\phi J_Z)$$

és

$$\exp(-i\chi J_Z) = \exp(-i\phi J_Z)\exp(-i\chi J_Z)\exp(i\phi J_Z)$$

segítségével (2)-t a következőképpen alakíthatjuk át:

$$\begin{aligned}\mathbf{R}(\phi,\theta,\chi) &= \left(\exp(-i\theta J_N)\exp(-i\chi J_Z)\exp(i\theta J_N)\right)\exp(-i\theta J_N)\exp(-i\phi J_Z) = \\ &= \left(\exp(-i\phi J_Z)\exp(-i\theta J_Y)\exp(i\phi J_Z)\right)\exp(-i\chi J_Z)\exp(-i\phi J_Z) = \\ &= \exp(-i\phi J_Z)\exp(-i\theta J_Y)\left(\exp(i\phi J_Z)\exp(-i\chi J_Z)\exp(-i\phi J_Z)\right)\end{aligned}$$

amiből azonnal adódik a (3) egyenlet.

Belátható az a fontos állítás is, hogy a J kvantumszám értékét tetszőleges forgatás sem tudja megváltoztatni, minthogy $\mathbf{J}^2$ kommutál a forgási operátorral:

$$\left[\mathbf{R}_n(a), \mathbf{J}^2\right] = 0\,. \tag{4}$$

Bizonyítás:

$$\left[\mathbf{R}_n(a), \mathbf{J}^2\right] = \left[\exp(-ia\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}), \mathbf{J}^2\right] = \sum_\nu \frac{1}{\nu!}(-ia)^\nu \left[(\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}})^\nu, \mathbf{J}^2\right] = 0\,.$$

Ennek megfelelően, amikor egy tetszőleges forgatás hat a $\mathbf{J}^2$ és J_Z operátorok $|JM\rangle$ sajátfüggvényére, az $|JM\rangle$-t csupán a többi M' értékű sajátfüggvény lineárkombinációjába transzformálhatja:

$$\mathbf{R}(\phi,\theta,\chi)|JM\rangle = \sum_{M'} D^J_{M'M}(\phi,\theta,\chi)|JM'\rangle\,, \tag{5}$$

ahol a transzformációs koefficiensek,

$$D^J_{M'M}(\phi,\theta,\chi) = \langle JM'|\mathbf{R}(\phi,\theta,\chi)|JM\rangle\,, \tag{6}$$

egy $(2J+1)\times(2J+1)$-es unitér mátrixnak, az úgynevezett forgatási mátrixnak alkotják az elemeit. Azt is írhattuk volna, hogy $\mathbf{R}(\phi,\theta,\chi)|J\tau M\rangle = \sum_{M'} D^J_{M'M}(\phi,\theta,\chi)|J\tau M'\rangle$, ahol $|J\tau M\rangle$ az aszimmetrikus pörgettyű sajátfüggvényeit jelöli (lehet szimmetrikus pörgettyűt is használni, de ez nem szükséges). A forgatási mátrixot szokás Wigner-féle nagy **D** mátrixnak is nevezni.

Mielőtt továbblépnénk, lássuk be a következő azonosságot:

$$\begin{aligned}\exp(-iaJ_Z)|JM\rangle &= \sum_\nu \frac{1}{\nu!}(-ia)^\nu (J_Z)^\nu |JM\rangle = \\ &\sum_\nu \frac{1}{\nu!}(-iaM)^\nu |JM\rangle = \exp(-iaM)|JM\rangle\end{aligned}\,. \tag{7}$$

Ez az azonosság nagymértékben segíti a (3) forgatás alkalmazását, hiszen benne két esetben is a kitüntetett Z kvantálási tengely körül történik a forgatás.

A (3) és (7) egyenletek segítségével felírhatjuk, hogy

$$D^J_{M'M}(\phi,\theta,\chi) = \exp(-i\phi M')d^J_{M'M}(\theta)\exp(-i\chi M), \qquad (8)$$

ahol $d^J_{M'M}(\theta)$ az alábbi mátrixelemeknek felel meg:

$$d^J_{M'M}(\theta) = \langle JM'|\exp(-i\theta J_Y)|JM\rangle. \qquad (9)$$

A $d^J_{M'M}(\theta)$ mátrixot szokás Wigner-féle kis **d** mátrixnak (vagy redukált forgási mátrixnak) nevezni.

A forgatási mátrixok tulajdonságainak tárgyalásánál központi helyet foglal el a $d^J_{M'M}(\theta)$ mennyiségek kiszámítása. Wigner volt az első, aki megmutatta, hogy $d^J_{M'M}(\theta)$ kiszámítható, mint $\theta/2$ félszög argumentumú véges polinom:

$$\boxed{\begin{aligned} d^J_{M'M}(\theta) &= [(J+M)!(J-M)!(J+M')!(J-M')!]^{1/2} \\ &\times \sum_\nu \frac{(-1)^\nu}{(J-M'-\nu)!(J+M'-\nu)!(\nu+M'-M)!\nu!} \\ &\times \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]^{2J+M-M'-2\nu} \left[-\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right]^{M'-M+2\nu} \end{aligned}} \qquad (10)\mathrm{M}$$

ahol ν mindazon egész értékeken végigfut, melyre a faktoriális nemnegatív.

(10) bizonyításával nem foglalkozunk, ld. Zare 86. oldal.

Megjegyzendő, hogy a $d^J_{MK}(\theta)$ függvények a következő differenciálegyenlet megoldásfüggvényei:

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta} - \frac{(M-K\cos\theta)^2}{\sin^2\theta} + J(J+1) - K^2\right] d^J_{MK}(\theta) = 0 \ .$$

TABLE 3.1 **Algebraic Expressions for the $d^J_{M'M}(\theta)$ for $J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$, and 2.**

A. $J = 0$

$$d^0_{00}(\theta) = 1$$

B. $J = \frac{1}{2}$

$$d^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\theta) = d^{\frac{1}{2}}_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}(\theta) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$d^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}(\theta) = -d^{\frac{1}{2}}_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta) = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

C. $J = 1$

$$d^1_{11}(\theta) = d^1_{-1,-1}(\theta) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{2}(1+\cos\theta)$$

$$d^1_{1,-1}(\theta) = d^1_{-1,1}(\theta) = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{2}(1-\cos\theta)$$

$$d^1_{01}(\theta) = d^1_{-1,0}(\theta) = -d^1_{0,-1}(\theta) = -d^1_{10}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$$

$$d^1_{00}(\theta) = \cos\theta$$

D. $J = \frac{3}{2}$

$$d^{\frac{3}{2}}_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}(\theta) = d^{\frac{3}{2}}_{-\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}(\theta) = \cos^3\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$d^{\frac{3}{2}}_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}(\theta) = d^{\frac{3}{2}}_{-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}(\theta) = -d^{\frac{3}{2}}_{\frac{1}{2}\frac{3}{2}}(\theta) = -d^{\frac{3}{2}}_{-\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}(\theta) = -\sqrt{3}\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$d^{\frac{3}{2}}_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}(\theta) = d^{\frac{3}{2}}_{-\frac{1}{2}\frac{3}{2}}(\theta) = d^{\frac{3}{2}}_{\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}(\theta) = d^{\frac{3}{2}}_{-\frac{3}{2}\frac{1}{2}}(\theta) = \sqrt{3}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$d^{\frac{3}{2}}_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}(\theta) = -d^{\frac{3}{2}}_{-\frac{3}{2}\frac{3}{2}}(\theta) = -\sin^3\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$d^{\frac{3}{2}}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\theta) = d^{\frac{3}{2}}_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(\theta) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\left[3\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - 2\right]$$

$$d^{\frac{3}{2}}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(\theta) = -d^{\frac{3}{2}}_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\theta) = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\left[3\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - 2\right]$$

E. $J = 2$

$$d^2_{22}(\theta) = d^2_{-2-2}(\theta) = \cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$d^2_{21}(\theta) = -d^2_{12}(\theta) = -d^2_{-2-1}(\theta) = d^2_{-1-2}(\theta) = -\frac{1}{2}\sin\theta(1+\cos\theta)$$

$$d^2_{20}(\theta) = d^2_{02}(\theta) = d^2_{-20}(\theta) = d^2_{0-2}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{8}}\sin^2\theta$$

$$d^2_{2-1}(\theta) = d^2_{1-2}(\theta) = -d^2_{-21}(\theta) = -d^2_{-12}(\theta) = \frac{1}{2}\sin\theta(\cos\theta - 1)$$

$$d^2_{2-2}(\theta) = d^2_{-22}(\theta) = \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$d^2_{11}(\theta) = d^2_{-1-1}(\theta) = \frac{1}{2}(2\cos\theta - 1)(\cos\theta + 1)$$

$$d^2_{1-1}(\theta) = d^2_{-11}(\theta) = \frac{1}{2}(2\cos\theta + 1)(1 - \cos\theta)$$

$$d^2_{10}(\theta) = d^2_{0-1}(\theta) = -d^2_{01}(\theta) = -d^2_{-10}(\theta) = -\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta\cos\theta$$

$$d^2_{00}(\theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$$

A (10) kifejezésből következően a $d^J_{M'M}(\theta)$ "polinomok" számtalan hasznos szimmetriatulajdonsággal rendelkeznek, ezek közül álljon itt néhány:

$$d^J_{M',M}(\theta) = d^J_{-M,-M'}(\theta)\,, \tag{11}$$

$$d^J_{M',M}(-\theta) = (-1)^{M'-M}\, d^J_{M',M}(\theta) = d^J_{M,M'}(\theta)\,, \tag{12}$$

Bizonyítás:

A $-\theta$ szöggel történő forgatás a θ szöggel történő forgatás inverze, így azt írhatjuk, hogy

$$d^J_{M',M}(-\theta) = \left[d^J_{M',M}(\theta)\right]^{-1}.$$

Továbbá, minthogy d-k valósak és egy unitér transzformáció mátrixreprezentációi egy ortonormált bázison, így

$$\left[d^J_{M',M}(\theta)\right]^{-1} = \left[d^J_{M',M}(\theta)\right]^{+} = d^J_{M,M'}(\theta)\,.$$

$$d^J_{M',M}(\theta) = (-1)^{M'-M}\, d^J_{M,M'}(\theta) = (-1)^{M'-M}\, d^J_{-M',-M}(\theta)\,, \tag{13}$$

$$d^J_{M',M}(0) = \delta_{M',M}\,, \tag{14}$$

$$d^J_{M',M}(\pi) = (-1)^{J+M'}\, \delta_{M',-M}\,, \tag{15}$$

$$d^J_{M',M}(-\pi) = (-1)^{J-M'}\, \delta_{M',-M}\,, \tag{16}$$

$$d^J_{M',M}(2\pi) = (-1)^{2J}\, d^J_{M',M}(0)\,. \tag{17}$$

A (17) egyenlet különösen érdekes. Azt mutatja, hogy J egész értékeire, a fizikai intuícióval megegyezően, a $\theta = 2\pi$ -vel és a $\theta = 0$ -val történő forgatás azonos eredményt ad. Azonban J félegész értékeire előjelváltás történik, a $[0,\ 2\pi)$ intervallumban a spin impulzusmomentum függvényei kétértékűek, a két érték egymástól a -1 fázisfaktorban tér el. Ez újabb megjelenése a spin impulzusmomentum különleges viselkedésének. Azaz ezek a függvények 4π periódussal periodikusak (már a gömbfüggvények tárgyalásánál láttuk, hogy a spinek nem hozhatók kapcsolatba egy gömbfelületen történő mozgással, így a forgatással sem)!

A forgatási mátrixok unitér voltából következő összefüggések:

$$\sum_{M'}\left[D^J_{M'M}(R)\right]^+ D^J_{M'N}(R) = \sum_{M'} d^J_{MM'}(\theta)\, d^J_{M'N}(\theta) = \delta_{MN} \tag{18}$$

$$\sum_{M}\left[D^J_{M'M}(R)\right]^+ D^J_{N'M}(R) = \sum_{M'} d^J_{MM'}(\theta)\, d^J_{N'M}(\theta) = \delta_{M'N'}, \tag{19}$$

ahol az R változó a ϕ, θ, χ Euler-szögeket jelöli. Azaz a Wigner-féle $d^J_{M'M}(\theta)$ mátrixok unitér mátrixok (unitér operátorok reprezentációi ortonormált bázison).

Nézzük L egész értékeit csupán. Így kapcsolatot tudunk teremteni a forgatási mátrixok és a pálya impulzusmomentum sajátfüggvényei között. Némi algebrai manipuláció árán [pl. felhasználva a gömbharmonikusok összegzésére vonatkozó

$$P_L(\cos\theta_{ij}) = \frac{4\pi}{2L+1}\sum_M Y^*_{LM}(\theta_i,\phi_i)Y_{LM}(\theta_j,\phi_j)$$

összefüggést, ahol (θ_i, ϕ_i) és (θ_j, ϕ_j) az i és j részecskék gömbi polár koordinátái, míg θ_{ij} a két részecske helyvektorai által bezárt szög, amiből L = 1-re azt kapjuk, hogy $\cos\theta_{ij} = \cos\theta_i\cos\theta_j + \sin\theta_i\sin\theta_j\cos(\phi_i - \phi_j)$], megmutathatók a következő fontos összefüggések:

- $D^L_{M0}(\phi,\theta,\chi) = \left(\frac{4\pi}{2L+1}\right)^{1/2} Y^*_{LM}(\theta,\phi) \Leftrightarrow Y_{LM}(\theta,\phi) = \left(\frac{2L+1}{4\pi}\right)^{1/2} D^{L*}_{M0}(\phi,\theta,\chi)$
- $D^L_{00}(\phi,\theta,\chi) = P_L(\cos\theta)$
- $D^L_{0M}(\phi,\theta,\chi) = \left(\frac{4\pi}{2L+1}\right)^{1/2} Y_{L,-M}(\theta,\chi)$
- a forgatási mátrix elemei L = 1-re előállíthatók, mint iránykoszinusz mátrix elemek lineárkombinációi (és vice versa), $D^{1*}_{MM'}(\phi,\theta,\chi)$-t és $\Phi_{\mathrm{Fg}}(\phi,\theta,\chi)$-t egy unitér transzformáció köti össze.

Tehát összefüggéseket teremtettünk az eddig megismert 3-D (Wigner nagy D), 2-D (gömbharmonikusok) és 1-D (associált Legendre és Legendre) ortogonális polinomok között.

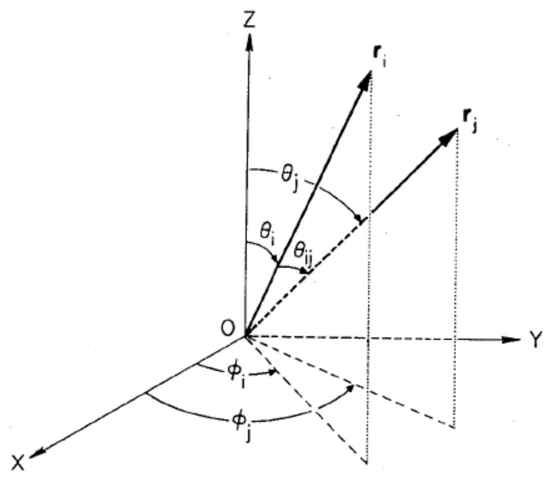


FIGURE 3.5 Spherical coordinates of particles i and j.

A $d^J_{M'M}(\theta)$ mátrixelemek számításának gyakorlása

Definíció szerint $d^J_{M'M}(\theta) = \langle J\tau M' | \exp(-i\theta J_Y) | J\tau M\rangle$. Továbbá,

$$J_Y |J\tau N\rangle = N |J\tau N\rangle \qquad\qquad N = -J, -J+1, ..., 0, ..., J \;.$$

Írjuk be az egységfelbontást (kétszer is):

$$d^J_{M'M}(\theta) = \sum_{NN'} \langle J\tau M' | J\tau N'\rangle \langle J\tau N' | \exp(-i\theta J_Y) | J\tau N\rangle \langle J\tau N | J\tau M\rangle$$

$$d^J_{M'M}(\theta) = \sum_{NN'} \langle J\tau M' | J\tau N'\rangle \langle J\tau N | J\tau M\rangle \delta_{NN'} \exp(-i\theta N)$$

$$d^J_{M'M}(\theta) = \sum_{N=-J}^{+J} \langle J\tau M' | J\tau N\rangle \langle J\tau M | J\tau N\rangle^* \exp(-i\theta N)$$

Az utolsó sorban szereplő mennyiségek nem mások, mint a J_Y mátrix sajátvektorai a $|J\tau M\rangle$ bázison. Ahogy az impulzusmomentum algebrában általánosan megszokott, a J_Y (és persze a J_X) operátorok helyett dolgozzunk a $J_\pm$ operátorral:

$$J_Y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \qquad\qquad J_\pm |JM\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M+1)}\,|J, M\pm 1\rangle$$

$$\langle JM | J_Y | JM'\rangle = \tfrac{1}{2i}\left(\sqrt{J(J+1) - M'(M'+1)}\,\delta_{M,M'+1} - \sqrt{J(J+1) - M'(M'-1)}\,\delta_{M,M'-1}\right)$$

Vizsgáljuk a $J = 1$ esetet

A $\langle JM | J_Y | JM'\rangle$ mátrix:

M/M'	1	0	-1
1	0	$-i/\sqrt{2}$	0
0	$i/\sqrt{2}$	0	$-i/\sqrt{2}$
-1	0	$i/\sqrt{2}$	0

Ezen, csak diagonálison kívüli elemeket tartalmazó mátrix sajátértékei, ahogy azt tudjuk is:

$$-\lambda(\lambda^2 - 1) + \tfrac{i}{\sqrt{2}}\left(-i\lambda / \sqrt{2}\right) = 0 \Rightarrow \lambda(1 - \lambda^2) = 0 \Rightarrow N = (-1, 0, +1),$$

A sajátvektorokra a következőt kaphatjuk:

		N		
		1	0	–1
M'	1	1/2	$1/\sqrt{2}$	1/2
	0	$i/\sqrt{2}$	0	$-i/\sqrt{2}$
	–1	–1/2	$1/\sqrt{2}$	–1/2

Most már meg tudjuk konstruálni a Wigner-féle kis **d** mátrix elemeit a sajátvektorok skaláris szorzatának és a megfelelő exponenciális tagoknak a figyelembe vételével:

$$d^1_{11} = \tfrac{1}{4}\exp(-i\theta) + \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{4}\exp(i\theta) = \tfrac{1}{2}(1+\cos\theta) = d^1_{-1,-1}$$

$$d^1_{00} = \frac{-i^2}{2}\exp(-i\theta) - \frac{i^2}{2}\exp(i\theta) = \cos\theta$$

$$d^1_{1,-1} = -\tfrac{1}{4}\exp(-i\theta) + \tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{4}\exp(i\theta) = \tfrac{1}{2}(1-\cos\theta) = d^1_{-1,1}$$

$$d^1_{01} = \frac{i}{2\sqrt{2}}\exp(-i\theta) - \frac{i}{2\sqrt{2}}\exp(i\theta) = \frac{i}{2\sqrt{2}}(-2i\sin\theta) = \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} = d^1_{-1,0}$$

$$d^1_{10} = -\frac{i}{2\sqrt{2}}\exp(-i\theta) + \frac{i}{2\sqrt{2}}\exp(i\theta) = \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} = d^1_{0,-1}$$

A Clebsch–Gordan sorok

A következőkben tekintsük a csatolt illetve nem-csatolt reprezentációk kapcsolatát a forgatási transzformáció hatása alatt. Az így származtatható Clebsch-Gordan sor megadja, hogy milyen kapcsolat áll fenn, ha elforgatjuk a csatolt illetve nem-csatolt reprezentációt.

A korábban megismert definíciók alapján két impulzusmomentumra a következőt írhatjuk fel:

$$\left|J_1M_1\right\rangle\left|J_2M_2\right\rangle = \sum_{J_3=\left|J_1-J_2\right|}^{J_1+J_2}\sum_{M_3} C(J_1J_2J_3;M_1M_2M_3)\left|J_3M_3\right\rangle$$

és

$$\left|J_3M_3\right\rangle = \sum_{M_1}\sum_{M_2} C(J_1J_2J_3;M_1M_2M_3)\left|J_1M_1,J_2M_2\right\rangle \ .$$

Hasson az $\mathbf{R}(\phi,\theta,\chi)$ forgatási operátor ($\mathbf{R}\left|JM\right\rangle = \sum_{M'} D^J_{M'M}\left|JM'\right\rangle$) mindkét egyenletre:

$$\sum_{M_1'}\sum_{M_2'} D^{J_1}_{M_1'M_1}(R)D^{J_2}_{M_2'M_2}(R)\left|J_1M_1',J_2M_2'\right\rangle =$$

$$\sum_{J_3=\left|J_1-J_2\right|}^{J_1+J_2}\sum_{M_3'} C(J_1J_2J_3;M_1M_2M_3)D^{J}_{M_3'M_3}\left|J_3M_3'\right\rangle$$

és

$$\sum_{M_3'} D^{J_3}_{M_3'M_3}\left|J_3M_3'\right\rangle = \sum_{M_1,M_2}\sum_{M_1'M_2'} C(J_1J_2J_3;M_1M_2M_3)D^{J_1}_{M_1'M_1}D^{J_2}_{M_2'M_2}\left|J_1M_1',J_2M_2'\right\rangle$$

Projektáljuk a két egyenletet balról $\langle J_1 M_1', J_2 M_2' | \equiv \langle J_1 M_1' | \langle J_2 M_2' |$-vel, illetve $\langle J_3 M_3' |$-vel, így a Clebsch–Gordan sort ($M_3' = M_1' + M_2'$),

$$\boxed{\begin{aligned}&D^{J_1}_{M_1'M_1}(\phi,\theta,\chi)D^{J_2}_{M_2'M_2}(\phi,\theta,\chi) = \\ &\sum_{J_3} C(J_1J_2J_3;M_1M_2M_3)C(J_1J_2J_3;M_1'M_2'M_3')D^{J}_{M_3'M_3}(\phi,\theta,\chi)\end{aligned}}$$

illetve az inverz Clebsch–Gordan sort,

$$\boxed{\begin{aligned}&D^{J_3}_{M_3'M_3}(\phi,\theta,\chi) = \\ &\sum_{M_1M_1'} C(J_1J_2J_3;M_1M_2M_3)C(J_1J_2J_3;M_1'M_2'M_3')D^{J_1}_{M_1'M_1}(R)D^{J_2}_{M_2'M_2}(R)\end{aligned}}$$

állítjuk elő ($M_1 + M_2 = M_3$, $M_1' + M_2' = M_3'$).

Ezeket a kifejezéseket felírhatjuk a Wigner-féle 3-*j* szimbólumokkal is:

$$D^{J_1}_{M_1'M_1}(R)D^{J_2}_{M_2'M_2}(R) = \sum_{J_3}(2J_3+1)\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ M_1' & M_2' & M_3' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} D^{J_3^*}_{M_3'M_3}(R)$$

$$D^{J_3^*}_{M_3'M_3}(R) = \sum_{M_1M_1'}(2J_3+1)\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ M_1' & M_2' & M_3' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} D^{J_1^*}_{M_1'M_1}(R)D^{J_2}_{M_2'M_2}(R)\ .$$

A forgatási mátrixok, mint a merev test forgási hullámfüggvényei

Legyen $\mathbf{J}^2$ és J_z sajátfüggvénye $\psi_{JM}(\phi,\theta,\chi)$, a merev test forgási hullámfüggvénye, a kvantumszámok és az Euler-szögek rendelkezzenek szokásos jelentésükkel. Forgassuk el a merev testet az $\mathbf{R}_1=\mathbf{R}_1(\phi_1,\theta_1,\chi_1)$ forgatási operátorral. Nyilván

$$\mathbf{R}_1(\phi_1,\theta_1,\chi_1)\psi_{JM}(\phi,\theta,\chi)=\sum_{M'}D^J_{M'M}(\phi_1,\theta_1,\chi_1)\psi_{JM'}(\phi,\theta,\chi)\,, \qquad (1)$$

ahol a $\psi'_{JM}=\mathbf{R}_1\psi_{JM}$ elforgatott hullámfüggvény értéke megegyezik az eredeti $\psi_{JM}=|JM\rangle$ hullámfüggvény értékével egy olyan P' pontban, melyet az $\mathbf{R}_1$ forgatás P-be visz át (aktív vs. passzív forgatások):

$$\psi_{JM}(\phi',\theta',\chi')=\sum_{M'}D^J_{M'M}(\phi_1,\theta_1,\chi_1)\psi_{JM'}(\phi,\theta,\chi)\,. \qquad (2)$$

Az Euler-szögeket kétféle értelemben is használjuk itt: (1) mint azon koordinátákat, melyek a ψ_{JM} és ψ'_{JM} merev-test hullámfüggvényeket leírják a tércentrált koordinátarendszerhez képest, és (2) mint az $\mathbf{R}_1=\mathbf{R}_1(\phi_1,\theta_1,\chi_1)$ forgatás argumentumait a $D^J_{M'M}$ forgatási mátrixban.

Legyen $\mathbf{R}_1=\mathbf{R}$, azaz $\phi_1=\phi,\ \theta_1=\theta,\ \chi_1=\chi$ a (2) egyenletben. Ennek az a hatása, hogy $\phi'=0,\ \theta'=0,$ és $\chi'=0$. Ekkor a (2) egyenlet új alakja:

$$\psi_{JM}(0,0,0)=\sum_{M'}D^J_{M'M}(\phi,\theta,\chi)\psi_{JM'}(\phi,\theta,\chi)\,. \qquad (3)$$

Szorozzuk meg a (3) egyenlet mindkét oldalát $D^{J^*}_{M''M}(\phi,\theta,\chi)$-vel és összegezzünk M-re. A forgatási mátrixok unitér voltából adódik, hogy

$$\sum_{M}D^{J^*}_{M''M}(\phi,\theta,\chi)\psi_{JM}(0,0,0)=\sum_{M}\sum_{M'}D^{J^*}_{M''M}(\phi,\theta,\chi)D^J_{M'M}(\phi,\theta,\chi)\psi_{JM}(\phi,\theta,\chi)=$$
$$\sum_{M'}\delta_{M'M''}\psi_{JM'}(\phi,\theta,\chi)=\psi_{JM''}(\phi,\theta,\chi) \qquad (4)$$

Írjunk most M-t M'' helyett és K-t M helyett, ekkor (4)-t fordítva felírva

$$\psi_{JM}(\phi,\theta,\chi) = \sum_K D_{MK}^{J*}(\phi,\theta,\chi)\psi_{JK}(0,0,0)\ . \qquad (5)$$

Fontos eredményünk, hogy aszimmetrikus pörgettyűk hullámfüggvénye megadható forgatási mátrixok elemeinek lineárkombinációjaként.

Vegyük fel merev testünk egy forgástengelyét a z tengely mentén. Ekkor ezen tengely körüli tetszőleges forgatás a $\psi_{JM}(\phi,\theta,\chi)$ hullámfüggvényt – esetleg egy fázisfaktortól eltekintve – változatlanul hagyja. Azaz megkövetelhetjük a $\psi_{JM}(\phi,\theta,\chi)$ hullámfüggvénytől, hogy a z tengely körüli χ szögű forgatásra változatlan maradjon (szimmetrikus pörgettyű becsempészése a tárgyalásba). Ha figyelembe vesszük a forgatási mátrixok ismert alakját, $D_{MK}^{J*}(\phi,\theta,\chi) = \exp(iM\phi) d_{MK}^{J} \exp(iK\chi)$ (a komplex konjugáció miatt nincs negative előjel az exponenciálisokban), ez a feltétel csakis úgy teljesíthető, ha az (5) egyenletben (a K-ra történő összegzésnél) a $\psi_{JM}(\phi,\theta,\chi)$ hullámfüggvény arányos valamelyik forgatási mátrixszal, legyen ez $D_{MK}^{J*}(\phi,\theta,\chi)$. Ha azt is megköveteljük, hogy a hullámfüggvény normált legyen (segítségként ld. Forgatási mátrixok szorzatainak integráljait), akkor egy szimmetrikus pörgettyű forgási hullámfüggvényére a következőt írhatjuk:

$$\boxed{\left|JKM\right\rangle = \left[\frac{2J+1}{8\pi^2}\right]^{1/2} D_{M,K}^{J*}(\phi,\theta,\chi) = (-1)^{M-K}\left[\frac{2J+1}{8\pi^2}\right]^{1/2} D_{-M,-K}^{J}(\phi,\theta,\chi)} \qquad (6)$$

Lineáris molekulákra $K = 0$ (**J** merőleges a z molekulatengelyre), a $\left|J0M\right\rangle$ hullámfüggvény pedig a $\left|JM\right\rangle = Y_{JM}(\theta,\phi) = \left(\frac{2J+1}{4\pi}\right)^{1/2} D_{M,0}^{J*}(\phi,\theta,\chi)$ gömbharmonikusokra egyszerűsödik, feltéve, hogy a χ szög szerint nem integrálunk.

Forgatási mátrix szorzatok integráljainak számítása

Számítsuk ki először a következő integrált: $\left\langle D^{J_1}_{M_1' M_1} \middle| D^{J_2}_{M_2' M_2} \right\rangle$

$$\left\langle D^{J_1}_{M_1' M_1} \middle| D^{J_2}_{M_2' M_2} \right\rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{2\pi} d\chi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta (D^{J_1 *}_{M_1' M_1} D^{J_2}_{M_2' M_2}) =$$

$$= (-1)^{M_1' - M_1} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{2\pi} d\chi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta (D^{J_1}_{-M_1', -M_1} D^{J_2}_{M_2' M_2}) ,$$

ahol a forgatási mátrixok az ismert módon függenek az Euler-szögektől. A zárójelben lévő mennyiségre a Clebsch–Gordan sor Wigner-féle 3-*j* szimbólum segítségével megadott kifejezését alkalmazva

$$\left\langle D^{J_1}_{M_1' M_1} \middle| D^{J_2}_{M_2' M_2} \right\rangle = (-1)^{M_1' - M_1} \sum_{J_3} (2J_3 + 1) \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ -M_1' & M_2' & M_3' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ -M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} \times$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{2\pi} d\chi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \left(\exp(i\phi M_3') d^{J_3}_{M_3' M_3} \exp(i\chi M_3) \right)$$

ahol nyilván $M_3' = M_2' - M_1'$ és $M_3 = M_2 - M_1$.

Minthogy $\int_0^{2\pi} \exp(in\phi) d\phi = 2\pi\delta_{n,0}$, így az adódik, hogy

$$\left\langle D^{J_1}_{M_1' M_1} \middle| D^{J_2}_{M_2' M_2} \right\rangle = (-1)^{M_1' - M_1} \sum_{J_3} (2J_3 + 1) \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ -M_1' & M_2' & M_3' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ -M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} \times$$

$$4\pi^2 \delta_{M_3', 0} \delta_{M_3, 0} \int_0^{\pi} \sin\theta \, d^{J_3}_{M_3' M_3} d\theta$$

azaz csupán egy 1-D integrált kell kiszámítanunk. Minthogy a Legendre-polinomok ortogonalitása miatt

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \, d^{J_3}_{00}(\theta) d\theta = \int_0^{\pi} \sin\theta \, P_{J_3}(\cos\theta) d\theta = \int_{-1}^{1} P_{J_3}(x) dx = \int_{-1}^{1} P_0(x) P_{J_3}(x) dx =$$

$$= \frac{2}{2J_3 + 1} \delta_{J_3, 0} = 2\delta_{J_3, 0}$$

így azt kapjuk, hogy

$$\left\langle D^{J_1}_{M_1'M_1} \middle| D^{J_2}_{M_2'M_2} \right\rangle = 8\pi^2 (-1)^{M_1'-M_1} \sum_{J_3} (2J_3+1) \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & 0 \\ -M_1' & M_2' & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & 0 \\ -M_1 & M_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Az eredményt tovább tudjuk alakítani, hiszen

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & 0 \\ -M_1 & M_2 & 0 \end{pmatrix} = \delta_{J_1J_2} \delta_{M_1M_2} (-1)^{J_1+M_1} \Big/ \sqrt{2J_1+1}$$

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & 0 \\ -M_1' & M_2' & 0 \end{pmatrix} = \delta_{J_1J_2} \delta_{M_1'M_2'} (-1)^{J_1+M_1'} \Big/ \sqrt{2J_1+1},$$

így

$$\left\langle D^{J_1}_{M_1'M_1} \middle| D^{J_2}_{M_2'M_2} \right\rangle = \frac{8\pi^2}{2J_1+1} \delta_{J_1J_2} \delta_{M_1M_2} \delta_{M_1'M_2'} (-1)^{2J_1+M_1+M_1'+M_1'-M_1} = \\ = \frac{8\pi^2}{2J_1+1} \delta_{J_1J_2} \delta_{M_1M_2} \delta_{M_1'M_2'} .$$

Ily módon megkaptuk a szimmetrikus pörgettyű hullámfüggvények normálási tényezőjét: $\left(\frac{2J+1}{8\pi^2}\right)^{1/2} D^J_{M'M}(\mathbf{R})$ a normált forgatási matrix.

Most számítsuk ki a következő integrált: $\left\langle D^{J_3}_{M_3'M_3} \middle| D^{J_2}_{M_2'M_2} \middle| D^{J_1}_{M_1'M_1} \right\rangle$.

$$\left\langle D^{J_3}_{M_3'M_3} \middle| D^{J_2}_{M_2'M_2} \middle| D^{J_1}_{M_1'M_1} \right\rangle =$$

$$= (-1)^{M'-M} \sum_J (2J+1) \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ M_1' & M_2' & M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ M_1 & M_2 & M \end{pmatrix} \left\langle D^{J_3}_{M_3'M_3} \middle| D^{J}_{-M',-M} \right\rangle =$$

$$= \sum_J (2J+1) \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ M_1' & M_2' & M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ M_1 & M_2 & M \end{pmatrix} (-1)^{M'-M} \left(\frac{8\pi^2}{2J+1}\right) \delta_{J,J_3} \delta_{-M',M_3'} \delta_{-M,M_3} =$$

$$= 8\pi^2 \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ M_1' & M_2' & -M_3' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ M_1 & M_2 & -M_3 \end{pmatrix}$$

továbbá $M' = M_1' + M_2'$ és $M = M_1 + M_2$. Ennek az eredménynek a forgási vonalak intenzitásának számolásánál lehet(ne) nagy hasznát venni.