11 MOMENT HYBNOSTI. ROTÁCIE

11.1 ÚVOD

Moment hybnosti má v kvantovej mechanike ešte dôležitejšiu úlohu ako v klasickej mechanike. Mnohé vlastnosti viazaných stavov a pravdepodobností prechodov možno totiž pochopiť bez podrobného riešenia dynamických rovníc, len na základe znalosti momentu hybnosti uvažovaných stavov. Venujeme preto problematike momentu hybnosti samostatnú kapitolu.

S momentom hybnosti sme sa už v doterajšom výklade stretli viackrát. Hovorili sme o orbitálnom momente hybnosti a v kapitole 5 o spine $\frac{1}{2}$. Tu jednak zovšeobecníme tieto poznatky na prípad ľubovoľného momentu hybnosti, jednak sa na moment hybnosti pozrieme z iného aspektu: všimneme si jeho súvislosť s rotáciami sledovanej fyzikálnej sústavy.

Východiskom pri zisťovaní vlastných stavov a vlastných hodnôt operátorov momentu hybnosti J_i (i = 1, 2, 3) budú komutačné vzťahy[181] (porovnaj s (4.9.3))

$$[\mathsf{J}_i, \mathsf{J}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\mathsf{J}_k \tag{1}$$

teda komutačné vzťahy pre operátory orbitálneho momentu hybnosti

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} \tag{2}$$

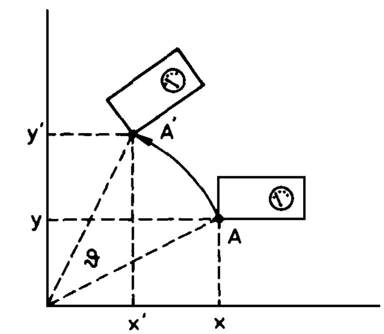
Fyzikálnou motiváciou pre postulovanie komutačných vzťahov (1) je okrem analógie s orbitálnym momentom hybnosti i súvis momentu hybnosti s rotáciami. Ukážeme si najprv v čom spočíva tento súvis, na jeho základe budeme postulovať vzťah (1) a v ďalšom určíme dôsledky tohto vzťahu.

11.2 SÚVIS MOMENTU HYBNOSTI S ROTÁCIAMI

Fyzikálnu analýzu problému rotácie fyzikálnej sústavy (pre s = $\frac{1}{2}$) sme urobili v článku 5.2. Tu overíme ďalší špeciálny prípad rotácie stavu bezspinovej častice,

[181] V tomto vzťahu sú operátory J_i vyjadrené v jednotkách $\hbar$, inak treba pravú stranu násobiť faktorom $\hbar$. V texte budeme Často používať rovnicu (1) v tom tvare ako je zapísaná.

opísaného vlnovou funkciou. Uvažujme nejaký stav $\psi(x, y, z)$ a pýtajme sa, aká vlnová funkcia zodpovedá tomuto stavu po rotácii napríklad o uhol ϑ okolo osi z. Pod touto nie úplne presnou formuláciou rozumieme nasledovné: Stav $\psi'(x, y, z)$ je „pripravovaný“ určitým makroskopickým prístrojom (napríklad žeravá katóda a štrbiny vymedzujúce úzky zväzok). Môžeme si teraz predstaviť rovnaký prístroj, iba pootočený voči pôvodnému o istý uhol. Stav pripravovaný týmto prístrojom[182] označme $\psi'(x, y, z)$.



Obr. 11.1

Obrázok 11.1 znázorňuje rotáciu „pripravujúceho prístroja“. Bod A so súradnicami (x, y, z) je nejaký bod na pôvodnom prístroji, bod A' so súradnicami (x', y', z') je rovnaký bod na otočenom prístroji. Na základe obrázku sa dá ľahko ukázať, že súradnice bodov A a A' spolu súvisia vzťahmi[183]

$$\begin{aligned} x' &= x\cos\vartheta - y\sin\vartheta \\ y' &= x\sin\vartheta + y\cos\vartheta \end{aligned} \tag{2}$$

Vzťahy (2) je užitočné zapísať v maticovom tvare

$$x_i' = \sum_{k=1}^{3} [R_z(\vartheta)]_{ik}\, x_k \tag{3}$$

[182] Všimnime si, že argumenty funkcie $\psi'(x, y, z)$ nepíšeme „s čiarkami“. Argumenty so stavom nemajú nič spoločné, označujú bod v priestore (nehybný!), v ktorom nás zaujíma pravdepodobnosť registrácie častice. V pôvodnom stave je to $|\psi(x, y, z)|^2$ a v stave po rotácii je to $|\psi'(x, y, z)|^2$.

[183] Upozorňujeme na našu znamienkovú konvenciu. Znamienko uhla rotácie je dané tak, že kladný uhol zodpovedá pravotočivej rotácii (t. j. proti smeru pohybu hodinových ručičiek), v rovine x, y pri pohľade zo strany kladnej polosi z. Cyklickou zámenou x, y, z dostaneme konvencie pre rotácie okolo ďalších osí.

kde $(x'_1, x'_2, x'_3) = (x', y', z')$, $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ a podľa (2) pre maticu $\boldsymbol{R}_z(\vartheta)$ platí:

$$\boldsymbol{R}_z(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\sin\vartheta & 0 \\ \sin\vartheta & \cos\vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4a}$$

Analógy rovnice (3) pre rotácie o uhly ϑ okolo osí x a y možno odvodiť podobne. Príslušné matice budú mať tvar

$$\boldsymbol{R}_x(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\vartheta & -\sin\vartheta \\ 0 & \sin\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{R}_z(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & 0 & \sin\vartheta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\vartheta & 0 & \cos\vartheta \end{pmatrix} \tag{4b}$$

Pre infinitezimálne rotácie položíme $\vartheta = \varepsilon$ a zanedbáme v rovniciach (4) vyššie mocniny ε. V tomto priblížení $\cos\varepsilon \approx 1$, $\sin\varepsilon \approx \varepsilon$, matice $\boldsymbol{R}_x$, $\boldsymbol{R}_y$, $\boldsymbol{R}_z$ prejdú na tvar

$$\boldsymbol{R}_x(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{R}_z(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{R}_z(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Všimnime si teraz, že ak vykonáme dve rotácie za sebou (vzhľadom na rôzne osi) tak výsledná rotácia závisí na tom, v akom poradí tieto rotácie vykonáme[184]. Tak napríklad ak vyjadríme rotačné matice s presnosťou do *druhého* rádu v ε, potom s touto presnosťou

$$\boldsymbol{R}_x(\varepsilon)\boldsymbol{R}_y(\varepsilon) \neq \boldsymbol{R}_y(\varepsilon)\boldsymbol{R}_x(\varepsilon) \tag{6}$$

ale v tomto ráde platí (ako sa možno presvedčiť priamym výpočtom)

$$\boldsymbol{R}_x(\varepsilon)\boldsymbol{R}_y(\varepsilon)\boldsymbol{R}_z(-\varepsilon^2) = \boldsymbol{R}_y(\varepsilon)\boldsymbol{R}_x(\varepsilon) \tag{7}$$

zo vzťahu (7) neskôr odvodíme komutačné pravidlá (1.1). Upozorníme ešte raz, že vzťahy ako (3), (6), (7) sú vzťahy pre rotáciu makroskopického „pripravujúceho prístroja“. Preto ich „klasické odvodenie“ na základe *obrázku 11.1* ostáva v platnosti i v kvantovej mechanike.

Pýtajme sa teraz, aký stav $\psi'(x, y, z)$ pripraví prístroj pootočený voči pôvodnému podľa vzťahov (2). Uvažujme dva body $B(x, y, z)$ a $B'(x', y', z')$ pričom do bodu B' sa z bodu B dostaneme tou istou rotáciou, ktorou sme pootočili prístroj z pôvodnej do novej polohy. Bod B' je v rovnakej relatívnej polohe voči pootočenému

[184] Vykonaniu dvoch rotácií za sebou pritom zodpovedá vynásobenie príslušných rotačných matíc $\boldsymbol{R}$.

prístroju, ako bol bod B voči pôvodnému. Je preto rozumné predpokladať, že ψ' v bode B' je rovnaké ako ψ v bode B. Preto

$$\psi'(x', y', z') = \psi(x, y, z) \tag{8}$$

kde argumenty spolu súvisia vzťahom (2).

Obrátením (2) pri infinitezimálnom $\vartheta = \varepsilon$ dostaneme

$$x = x' + y'\varepsilon, \quad y = -x'\varepsilon + y', \quad z' = z \tag{9}$$

Ak dosadíme (9) na pravú stranu (8), máme

$$\psi'(x', y', z') = \psi(x' + y'\varepsilon, y' - x'\varepsilon +, z')$$

Táto rovnica platí pre všetky hodnoty (x', y', z'). Pretože na oboch stranách rovnice sú tie isté premenné (x', y', z'), môžeme čiarky v argumentoch vynechať a napísať:

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x + y\varepsilon, y - x\varepsilon +, z) \tag{10}$$

Pravú stranu (10) teraz rozvinieme do Taylorovho radu, a pretože ide o infinitezimálne ε, ponechávame v rozvoji len členy lineárne v ε. Dostaneme:

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x, y, z) - \varepsilon\left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi(x, y, z) \tag{11}$$

Výraz v hranatej zátvorke sa rovná $(\mathrm{i}/\hbar)\mathsf{L}_z$, kde L_z je z-zložka operátora momentu hybnosti. Namiesto ψ' často používame aj symbol $U_z(\varepsilon)\psi$, aby sme znázornili, že ψ' vznikla z funkcie ψ rotáciou o uhol ε okolo osi z. Rovnicu (11) potom prepíšeme nasledovne:[185]

$$U_z(\varepsilon)\psi(x, y, z) = \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon\mathsf{L}_z\right)\psi(x, y, z) \tag{12}$$

Rotáciu o konečný uhol ϑ okolo osi z si môžeme približne predstaviť ako výsledok n rotácií o uhol $\varepsilon = \vartheta/n$. V takomto prípade dostaneme približný vzťah

$$U_z(\vartheta)\psi(x, y, z) \approx \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon\mathsf{L}_z\frac{\vartheta}{n}\right)^n \psi(x, y, z)$$

[185] Symboliku v (12) treba podrobnejšie vysvetliť. Výraz $U_z(\varepsilon)\psi(x, y, z)$ neznamená pôsobenie akéhosi operátora na číslo $\psi(x, y, z)$, ale má význam hodnoty funkcie $U_z(\varepsilon)\psi$ v bode (x, y, z). Trochu ťažkopádna, ale pritom jasnejšia forma zápisu by bola $[U_z(\varepsilon)\psi](x, y, z)$.

Posledný vzťah sa stane presným, ak urobíme limitu $n \to \infty$. S využitím známeho vzťahu

$$\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{x}{n}\right)^n = \mathrm{e}^x$$

potom dostaneme[186]

$$U_z(\vartheta)\psi(x, y, z) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon \mathsf{L}_z\vartheta\right)\psi(x, y, z) \tag{13}$$

Doteraz sme uvažovali len rotáciu okolo osi z. Vo všeobecnom prípade si môžeme predstaviť, že os rotácie v priestore je daná jednotkovým vektorom $\boldsymbol{n}$ a skúmať rotáciu okolo tejto osi o uhol ϑ. Funkciu, ktorú dostaneme touto rotáciou z funkcie ψ budeme označovať $\mathsf{U}_n(\vartheta)\psi$ a príslušné zovšeobecnenie vzorca (13) zrejme bude:

$$U_{\boldsymbol{n}}(\vartheta)\psi(x, y, z) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}.\hat{\boldsymbol{L}}\vartheta\right)\psi(x, y, z) \tag{14}$$

Rovnicu (14) netreba osobitne dokazovať, pretože vo vzťahu (13) sme uvažovali rotáciu okolo špeciálne vybranej osi z. Faktor pod exponentom v (13) môžeme preto napísať v tvare $-\mathrm{i}\boldsymbol{n}.\hat{\boldsymbol{L}}/\hbar$, kde $\boldsymbol{n}$ je jednotkový vektor v smere osi z. Ak zmeníme označenie súradnicových osí, dostaneme hneď rovnicu (14). Z rovnice (14) vidno význam operátora momentu hybnosti pre transformáciu vlnovej funkcie pri rotáciách.

Zaujímame sa teraz o strednú hodnotu nejakej veličiny A v stave[187] po rotácii

$$|\psi'\rangle = \mathsf{U}|\psi\rangle \tag{15}$$

Strednú hodnotu vypočítame štandardným spôsobom

$$\langle\psi'|\mathsf{A}|\psi'\rangle = \langle\psi|\mathsf{U}^{+}\mathsf{A}\mathsf{U}|\psi\rangle \tag{16}$$

Stredná hodnota veličiny A v stave $|\psi'\rangle$ bude teda vo všeobecnosti odlišná od strednej hodnoty tejto veličiny v stave $|\psi\rangle$. Tvrdenie je, pravda, triviálne: ide o to, že jedným meracím prístrojom (označme ho M), ktorý meria veličinu A, meriame túto veličinu na dvoch rôznym spôsobom pripravených stavoch. Ľahko si však

[186] Rovnicu (13) sme tu odvodili intuitívne. Matematicky korektný postup by bol založený na Stoneovej vete, s ktorou sa čitateľ môže zoznámiť v učebniciach funkcionálnej analýzy.

[187] Na miestach, kde je to technický výhodné, budeme namiesto reprezentácie pomocou vlnových funkcií používať všeobecný Diracov formalizmus.

možno predstaviť rovnaký prístroj M', ktorý má voči prístroju M rovnakú polohu (je rovnako pootočený), ako má prístroj pripravujúci stav $|\psi'\rangle$ voči prístroju pripravujúcemu stav $|\psi\rangle$. Potom meranie prístrojom M' na stavoch po rotácii musí dávať štatisticky rovnaké výsledky ako meranie prístrojom M na pôvodných stavoch[188].

Ukážeme si teraz, že ak je fyzikálnej veličine meranej prístrojom M priradený operátor A, potom je veličine meranej prístrojom M' priradený operátor

$$\mathsf{A}' = \mathsf{U}\mathsf{A}\mathsf{U}^{+} \tag{17}$$

Skutočne, operátor U definovaný v x-reprezentácii vzťahom (14) je unitárny

$$\mathsf{U}^{-1} = \mathsf{U}^{+} = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vartheta \boldsymbol{n}.\hat{\boldsymbol{L}}\right) \tag{18}$$

preto stredná hodnota veličiny A' v stave $|\psi'\rangle$ bude

$$\langle \psi'|\mathsf{A}|\psi'\rangle = \langle \psi|\mathsf{U}^{+}\mathsf{U}\mathsf{A}\mathsf{U}^{+}\mathsf{U}|\psi\rangle = \langle \psi|\mathsf{A}|\psi\rangle \tag{19}$$

Poznamenajme na záver, že v niektorých učebniciach je možné stretnúť sa s odlišnou definíciou rotácie. Je to tzv. *pasívny zmysel*, pri ktorom namiesto fyzikálnej sústavy (*aktívny zmysel*) rotujeme sústavu súradníc v priestore. Potom sa zaujímame o vzťah medzi vlnovou funkciou (nemenného) stavu v pôvodnej sústave a v súradnicovej sústave po rotácii.

Po formálnej stránke sú oba prístupy značne podobné. Tu budeme uvažovať rotácie v aktívnom zmysle.

11.3 MOMENT HYBNOSTI – VŠEOBECNÝ PRÍPAD

Doteraz sme sa zaoberali prípadom orbitálneho momentu hybnosti a prípadom čisto spinového momentu hybnosti pre spin 1/2. Vo všeobecnosti sú možné aj prípady vyšších spinov, aj prípady, v ktorých celkový moment hybnosti vznikne napríklad zložením orbitálneho a spinového momentu hybnosti. V tomto článku zistíme tie vlastnosti operátorov momentu hybnosti, ktoré nezávisia od detailov skúmanej sústavy. Moment hybnosti budeme chápať ako trojicu operátorov J_1, J_2, J_3, spĺňajúcich komutačné vzťahy

$$[\mathsf{J}_i, \mathsf{J}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\mathsf{J}_k \tag{1}$$

Tieto vzťahy možno chápať ako zovšeobecnenie vzťahov $[\mathsf{L}_i, \mathsf{L}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\mathsf{L}_k$, $[\mathsf{s}_i, \mathsf{s}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\mathsf{s}_k$ platných pre orbitálny a spinový moment hybnosti (spin 1/2).

---

[188] Porovnaj s obdobnou diskusiou o rotácii Sternovho-Gerlachovho prístroja v kapitole o spine.

Skutočný dôvod platnosti vzťahov (1) je ale hlbší a súvisí priamo s opisom transformácií vlnových funkcií pri rotáciách.

Uvažujme určitý stav $|\psi\rangle$ a stav $|\psi'\rangle$, ktorý z neho dostaneme infinitezimálnou rotáciou o uhol ε okolo osi z. Zapíšeme

$$|\psi'\rangle = \mathsf{U}_z(\varepsilon)|\psi\rangle$$

Je prirodzené žiadať, aby $\mathsf{U}_z(\varepsilon)$ bol unitárnym operátorom (potom $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$ Ak je ε infinitezimálne, môžeme zanedbať veličiny druhého rádu a písať

$$\mathsf{U}_z(\varepsilon) = 1 - \mathrm{i}\varepsilon\mathsf{J}_z$$

kde J_z je hermitovský, ak $\mathsf{U}_z(\varepsilon)$ má byť unitárny. Skutočne

$$\mathsf{U}_z^+(\varepsilon)\mathsf{U}_z(\varepsilon) = (1 - \mathrm{i}\varepsilon\mathsf{J}_z)(1 + \mathrm{i}\varepsilon\mathsf{J}_z^+) = 1 - \mathrm{i}\varepsilon(\mathsf{J}_z - \mathsf{J}_z^+) + O(\varepsilon^2)$$

kde $O(\varepsilon^2)$ označuje veličiny rádu ε^2. Ak sa má pravá strana v ráde ε rovnať 1, musí byť J_z skutočne hermitovský.

Rotácie majú ale mimoriadne dôležitú vlastnosť: konečnú rotáciu možno zložiť z infinitezimálnych[189]. Preto, podobne ako v predchádzajúcom článku, pre konečnú rotáciu o uhol ϑ okolo osi z platí

$$\mathsf{U}_z(\varepsilon) = \lim_{n\to\infty}\left(1 - \mathrm{i}\frac{\vartheta}{n}\mathsf{J}_z\right)^n = \exp(-\mathrm{i}\vartheta\mathsf{J}_z)$$

Podobne ako v predchádzajúcom článku môžeme prejsť k rotáciám okolo osi $\boldsymbol{n}$ a napokon prídeme k tomu, že pri rotácii o uhol ϑ okolo osi $\boldsymbol{n}$ sa stav $|\psi\rangle$ zmení na

$$|\psi'\rangle = \mathsf{U}_n(\vartheta)|\psi\rangle = \exp(-\mathrm{i}\vartheta\boldsymbol{n}\,.\,\hat{\mathsf{J}}_z)\,|\psi\rangle \tag{2}$$

kde J_1, J_2, J_3 je trojica hermitovských operátorov.

Zdôrazníme opäť, že na tomto štádiu o operátoroch J_1, J_2, J_3 vieme len to, že sú hermitovské. Napriek tomu ich budeme zatiaľ nazývať *operátormi celkového momentu hybnosti* (v jednotkách $\hbar$).

Pre rotácie súradníc platí ale vzťah[190] (2.7), ktorý nám hovorí, že tri rotácie na ľavej strane sú do rádu ε^2 úplne ekvivalentné dvom rotáciám na pravej strane.

---

[189] Neskôr ešte uvedieme podrobnejšie, že tieto jednoduché tvrdenia možno zhrnúť tým, že rotácie okolo určitej osi tvoria spojitú grupu.

[190] Vzťah (2.7) vyzerá na prvý pohľad ako istá technická drobnosť týkajúca sa rotácií. Nie je tomu tak; je to vzťah, v ktorom sídli „duša rotácií“. Vieme už totiž, že rotácie okolo určitej osi môžeme vybudovať postupne z infinitezimálnych rotácií. Vzťah (2.7) nám hovorí, ako súvisia infinitezimálne rotácie okolo rôznych osí. Tým je fakticky daná celá štruktúra všetkých rotácií. Podrobnejšie sa s týmto stretneme ešte v kapitole o symetriách.

Toto tvrdenie musí potom platiť pre rotáciu ľubovoľného stavu. Odtiaľ dostávame podmienku (do rádu ε^2 vrátane)

$$\mathsf{U}_x(\varepsilon)\mathsf{U}_y(\varepsilon)\mathsf{U}_z(-\varepsilon^2) = \mathsf{U}_y(\varepsilon)\mathsf{U}_x(\varepsilon) \tag{3}$$

Po dosadení výrazov typu (2) máme

$$(1 - \mathrm{i}\varepsilon\mathsf{J}_x - \frac{1}{2}\varepsilon^2\mathsf{J}_x^2)(1 - \mathrm{i}\varepsilon\mathsf{J}_x - \frac{1}{2}\ \varepsilon^2\mathsf{J}_y^2)(1 + \mathrm{i}\varepsilon^2\mathsf{J}_z) =$$

$$= (1 - \mathrm{i}\varepsilon\mathsf{J}_y - \frac{1}{2}\varepsilon^2\mathsf{J}_y^2)(1 - \mathrm{i}\varepsilon\mathsf{J}_x - \frac{1}{2}\ \varepsilon^2\mathsf{J}_x^2)$$

a po zachovaní členov do rádu ε^2 dostaneme

$$\mathsf{J}_x\mathsf{J}_y - \mathsf{J}_y\mathsf{J}_x = \mathrm{i}\mathsf{J}_z \tag{4}$$

čo je jeden zo vzťahov (1). Ostatné dostaneme cyklickými zámenami zo (4).

V ďalšom budeme hľadať vlastné stavy a vlastné hodnoty momentu hybnosti vychádzajúc len zo vzťahu (1). Základná myšlienka postupu bude po technickej stránke veľmi podobná na tú, ktorú sme použili, keď sme hľadali spektrum oscilátora čisto algebraickými metódami (v kap. 10).

Definujme napred operátor druhej mocniny momentu hybnosti:

$$\mathsf{J}^2 = \mathsf{J}_x^2 + \mathsf{J}_y^2 + \mathsf{J}_z^2 \tag{5}$$

V dôsledku (1) platí:

$$[\mathsf{J}_x, \mathsf{J}^2] = [\mathsf{J}_y, \mathsf{J}^2] = [\mathsf{J}_z, \mathsf{J}^2] = 0 \tag{6}$$

Zo štvorice operátorov J_x, J_y, J_z, J^2 vyberieme dva navzájom komutujúce: J_z a J^2. Ich spoločné vlastné funkcie a vlastné hodnoty označíme nasledovne:

$$\begin{aligned} \mathsf{J}^2|j, m\rangle &= \eta_j|j, m\rangle \\ \mathsf{J}_z|j, m\rangle &= m|j, m\rangle \end{aligned} \tag{7}$$

Z definície (5) je pritom zrejmé, že $\eta_j \geq 0$.

Pretože J^2 a J_z sú hermitovské operátory, budú stavy $|j, m\rangle$ tvoriť ortogonálny systém. Ak ich normujeme na jednotku, dostaneme :

$$\langle j', m'|j, m\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{8}$$

Zaveďme teraz operátory J_+ a J_- vzťahom

$$\mathsf{J}_\pm = \mathsf{J}_x \pm \mathrm{i}\mathsf{J}_y \tag{9}$$

Vychádzajúc z (1) odvodíme komutačné vzťahy

$$[\mathsf{J}_z, \mathsf{J}_+] = \mathsf{J}_+ \quad [\mathsf{J}_z, \mathsf{J}_-] = -\mathsf{J}_- \quad [\mathsf{J}_+, \mathsf{J}_-] = 2\mathsf{J}_z \tag{10}$$

Podobne môžeme odvodiť vzťahy

$$\begin{aligned} \mathsf{J}_+\mathsf{J}_- &= \mathsf{J}^2 - \mathsf{J}_z^2 + \mathsf{J}_z \\ \mathsf{J}_-\mathsf{J}_+ &= \mathsf{J}^2 - \mathsf{J}_z^2 - \mathsf{J}_z \end{aligned} \tag{11}$$

Skúmajme teraz stavové vektory

$$|j, m\rangle_+ = \mathsf{J}_+|j, m\rangle, \quad |j, m\rangle_- = \mathsf{J}_-|j, m\rangle$$

Pretože $[\mathsf{J}_+, \mathsf{J}^2] = [\mathsf{J}_-, \mathsf{J}^2] = 0$ platí:

$$\mathsf{J}^2|j, m\rangle_+ = \eta_j|j, m\rangle_+ \quad \mathsf{J}^2|j, m\rangle_- = \eta_j|j, m\rangle_-$$

Na základe prvých dvoch rovníc (10) dostaneme tiež

$$\mathsf{J}_z|j, m\rangle_+ = \mathsf{J}_z\mathsf{J}_+|j, m\rangle = \{[\mathsf{J}_z, \mathsf{J}_+] + \mathsf{J}_+\mathsf{J}_z\}|j, m\rangle = (\mathsf{J}_+ + m\mathsf{J}_+)|j, m\rangle = (m+1)|j, m\rangle_+$$

Podobne postupujeme pri výpočte $\mathsf{J}_z|j, m\rangle_-$ a dostaneme:

$$\begin{aligned} \mathsf{J}_z\{\mathsf{J}_+|j, m\rangle\} &= (m+1)\{\mathsf{J}_+|j, m\rangle\} \\ \mathsf{J}_z\{\mathsf{J}_-|j, m\rangle\} &= (m-1)\{\mathsf{J}_-|j, m\rangle\} \end{aligned} \tag{12}$$

odkiaľ vyplýva

$$\begin{aligned} \mathsf{J}_+|j, m\rangle &= \mathrm{C}_{jm}^{(+)}|j, m+1\rangle \\ \mathsf{J}_-|j, m\rangle &= \mathrm{C}_{jm}^{(-)}|j, m-1\rangle \end{aligned} \tag{13}$$

Rovnice (13) ukazujú význam operátorov J_+ a J_-. Ich pôsobením na stav $|j, m\rangle$ vzniká nový stav, ktorý je opäť vlastným stavom operátorov J^2 a J_z, pričom vlastná hodnota J^2 je nezmenená a vlastná hodnota J_z narastie (alebo pri pôsobení J_- poklesne) o jednotku.

Preto niekedy nazývame J_+ *zvyšovacím* a J_- *znižovacím operátorom*. Určíme teraz konštanty $\mathrm{C}_{jm}^{(+)}$ a $\mathrm{C}_{jm}^{(-)}$. Využijeme normovanosť stavov $|j, m\rangle$ danú rovnicou (8) a všimneme si, že operátor J_+ je hermitovsky združený s operátorom J_-. Potom z rovníc (13) vyplýva

$$\begin{aligned} |\mathrm{C}_{jm}^{(+)}|^2 &= \langle j, m|\mathsf{J}_-\mathsf{J}_+|j, m\rangle \\ |\mathrm{C}_{jm}^{(-)}|^2 &= \langle j, m|\mathsf{J}_+\mathsf{J}_-|j, m\rangle \end{aligned}$$

Využijeme ďalej (11) a (8) a dostaneme:

$$\begin{aligned} |\mathrm{C}_{jm}^{(+)}|^2 &= \eta_j - m(m+1) \\ |\mathrm{C}_{jm}^{(-)}|^2 &= \eta_j - m(m-1) \end{aligned} \tag{14}$$

Z rovníc (14) okamžite vyplýva ohraničenie

$$\eta_j \geq m(m+1) \qquad \eta_j \geq m(m-1) \quad \text{pre všetky } m \tag{15}$$

Pri danom η_j je teda m ohraničené zhora aj zdola. Na druhej strane pôsobením J_+ na stav $|j, m\rangle$ dostaneme podľa rovnice (13) stav $|j, m+1\rangle$), ktorý má m o jednotku väčšie. Nový stav nedostaneme len vtedy, ak pre určité m_0 platí $\eta_j = m_0(m_0+1)$, vtedy podľa rovnice (8) sa konštanta $C^{(+)}_{jm_0}$ v rovnici (13) rovná nule a nedostávame stav s vyšším m. Takéto m_0 označujeme v ďalšom symbolom j, čiže platí :

$$m \leq j, \qquad \eta_j = j(j+1) \tag{16}$$

Podľa (15) musí byť m ohraničené aj zdola. Podobne ako v predchádzajúcom prípade musí byť konštanta $C^{(-)}_{j\mu}$ nulová. Z rovnice (14) vidíme, že musí platiť:

$$\eta_j = j(j+1) = \mu(\mu+1); \qquad \mu = m_{\min} \tag{17}$$

Rovnica (17) má riešenia $\mu = -j$, $\mu = j+1$. Prvé z nich je zrejme hľadaná najmenšia hodnota m. Keď to zhrnieme, dostávame:

$$\eta_j = j(j+1) \tag{18}$$

$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j \tag{19}$$

Pri fixovanom j môže teda m nadobúdať $2j+1$ možných hodnôt uvedených v (19). „Počet hodnôt“ je ale celé číslo, preto musí byť číslo $2j+1$ celé a aj $2j$ musí byť celé a nezáporné. Vlastné hodnoty a vlastné stavy operátorov J^2 a J_z majú preto nasledujúce vlastnosti:

$$\mathsf{J}^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle \tag{20}$$

$$2j = \text{celé číslo}, \ j \geq 0$$

$$\mathsf{J}_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle, \qquad m \text{ je z (19)}$$

Vrátime sa teraz k rovniciam (13). Rovnice (14) a (15) určujú konštanty $C^{(+)}_{jm}$ a $C^{(-)}_{jm}$ až na fázový faktor. Výber tohto faktora je ekvivalentný výberu relatívnych fáz jednotlivých stavov $|j, m\rangle$. Najčastejšie sa tento výber robí tak, aby $C^{(+)}_{jm}$ a $C^{(-)}_{jm}$ boli reálne kladné veličiny. Ak využijeme vzťahy

$$j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1)$$

$$j(j+1) - m(m-1) = (j+m)(j-m+1)$$

dostaneme

$$\begin{aligned} \mathsf{J}_+|j, m\rangle &= \{(j-m)(j+m+1)\}^{1/2}|j, m+1\rangle \\ \mathsf{J}_-|j, m\rangle &= \{(j+m)(j-m+1)\}^{1/2}|j, m-1\rangle \end{aligned} \tag{21}$$

Fázová konvencia (21) sa niekedy nazýva *Condonova-Shortleyho konvencia*.

Ak si pripomenieme vzťahy (9), ľahko odvodíme z predchádzajúcich dvoch rovníc

$$\mathsf{J}_x|j,m\rangle = \frac{1}{2}\{(j-m)(j+m+1)\}^{1/2}|j,m+1\rangle + \frac{1}{2}\{(j+m)(j-m+1)\}^{1/2}|j,m-1\rangle$$

$$\mathsf{J}_y|j,m\rangle = \frac{1}{2\mathrm{i}}\{(j-m)(j+m+1)\}^{1/2}|j,m+1\rangle - \frac{1}{2\mathrm{i}}\{(j+m)(j-m+1)\}^{1/2}|j,m-1\rangle \qquad (22)$$

Spolu so vzťahmi (20) nám posledné tri rovnice umožňujú nájsť maticové elementy operátorov J_x, J_y, J_z v ľubovoľnom systéme funkcií $|j, m\rangle$.

Podstatný rozdiel medzi všeobecným prípadom, ktorý sme práve sledovali a prípadom orbitálneho momentu hybnosti, pri ktorom sme vychádzali z definície $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$, je v prípustných hodnotách j, m. Pre orbitálny moment hybnosti musia byť j, m celé čísla, kým vo všeobecnom prípade môžu byť j a m aj polocelé (číslo x nazývame polocelým, ak $x = n + 1/2$, n je celé). Polocelé hodnoty j sa nedajú realizovať ako orbitálny moment hybnosti, preto napríklad spin 1/2 nemôže mať klasický analóg.

Všimnime si, že formalizmus spinu 1/2 diskutovaný v 5. kapitole nie je nič iné ako prípad $j = 1/2$ v reprezentácii danej bázou

$$\{|j = 1/2,\ m = 1/2\rangle,\quad |j = 1/2,\ m = -1/2\rangle\}$$

Stavovému vektoru je potom priradená jednostĺpcová matica

$$|\psi\rangle \to \boldsymbol{\psi}_m = \langle 1/2, m|\psi\rangle, \quad m = 1/2, -1/2 \qquad (23)$$

a operátorom matica typu 2 × 2:

$$\mathsf{A} \to A_{m,m'} = \langle 1/2, m|\mathsf{A}|1/2, m'\rangle \qquad (24)$$

Pretože vektory $|j, m\rangle$ tvoria úplný systém stavov, budeme vedieť rotáciu ľubovoľného stavového vektora vyjadriť, ak budeme poznať, ako pôsobí operátor rotácie U na vektory $|j, m\rangle$, t. j. ak budeme poznať maticové elementy

$$\langle j', m'|\mathsf{U}|j, m\rangle \qquad (25)$$

Ich výpočet je najjednoduchší v prípade rotácie o uhol φ okolo osi z. Potom totiž platí

$$\mathsf{U} = \exp(-\mathrm{i}\mathsf{J}_z\varphi) \qquad (26)$$

a podľa (20):

$$\mathsf{U}|j, m\rangle = e^{-im\varphi}|j, m\rangle \tag{27}$$

Vo všeobecnom prípade rotácie okolo osi $\boldsymbol{n}$ o uhol ϑ maticové elementy

$$\langle j', m'|\exp(-i\vartheta\boldsymbol{n}.\boldsymbol{J})|j, m\rangle \tag{28}$$

môžeme vypočítať pomocou vzťahov (20) a (22) ak exponenciálu v (28) rozvinieme do mocninového radu. Výpočet je technicky komplikovaný, uvedieme iba výsledok pre $j = 1/2$. Na základe (28) sa dá ukázať, že spinory sa transformujú pri rotácii o uhol ϑ *okolo osi* $\boldsymbol{n}$ podľa vzťahu

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \left\{ \cos\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) - i\boldsymbol{n}.\boldsymbol{\sigma}\sin\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) \right\} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{29}$$

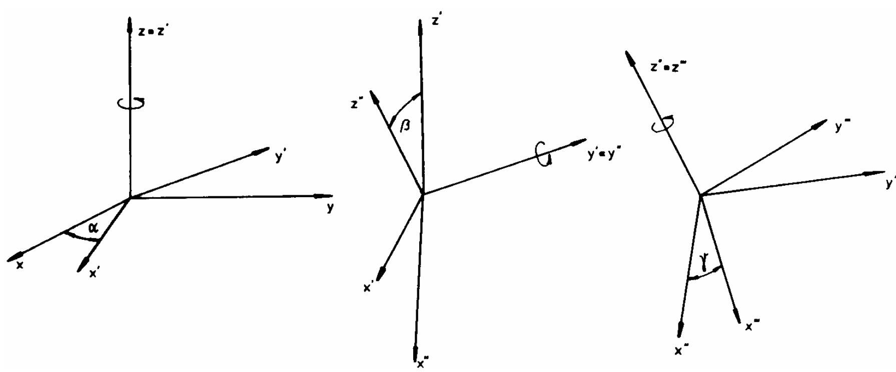
kde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sú Pauliho matice.

V aplikáciách sa často používa iné vyjadrenie rotácie, a to pomocou Eulerových uhlov. Rotáciu okolo ľubovoľnej osi totiž možno vždy vyjadriť ako zloženú transformáciu skladajúcu sa z troch špeciálnych rotácií (*obr. 11.2)*

a) z rotácie o uhol a okolo osi z

b) z rotácie o uhol 0 okolo (novej polohy[191]) osi y

c) z rotácie o uhol y okolo (ďalšej novej polohy) osi z.



Obr. 11.2

[191] S rotovaným telesom si môžeme myslieť s ním spojenú súradnicovú sústavu, ktorá sa pôvodne kryje s pevnou referenčnou sústavou. Osi rotácií, o ktorých je reč, sú osi sústavy pevne spojenej s telesom, ich poloha v priestore sa teda rotáciami postupne mení.

Prvá z týchto rotácií je zrejme opísaná operátorom

$$\exp(-\mathrm{i}J_z\,.\,\alpha)$$

druhá operátorom

$$\exp(-\mathrm{i}J'_y\,.\,\alpha)$$

kde J'_y je operátor momentu hybnosti vzhľadom na novopoloženú os y. Podľa (2.17) môžeme operátor J'_y vyjadriť pomocou J_y ako

$$J'_y = UJ_yU^+$$

kde U je operátor rotácie, ktorým sme pôvodnú os y previedli do novej polohy. Ak za U dosadíme $U = \exp(-\mathrm{i}\alpha J_z)$, dostaneme

$$\exp(-\mathrm{i}J'_y\beta) = \exp(-\mathrm{i}J_z\alpha)\,\exp(-\mathrm{i}J_y\beta)\,\exp\,(+\mathrm{i}J_z\alpha)$$

kde J_y je už operátor momentu hybnosti vzhľadom na os y v jej pôvodnej (v priestore nehybnej) polohe. Operátor, ktorý prevádza stav sústavy z pôvodného stavu do stavu po dvoch rotáciách (okolo osi z o uhol α a okolo osi y' o uhol β), potom je

$$U_{21} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta J'_y}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha J_z} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta J_y}$$

Ak konečnú polohu osi z označíme ako z'', máme pre tretiu rotáciu operátor

$$U_3 = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma J''_z} = U_{21}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma J_z}U^+_{21} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta J_y}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma J_z}\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\alpha J_z}$$

Takže celá rotácia vyjadrená pomocou Eulerových uhlov bude daná operátorom

$$U_3U_{21} = \exp(-\mathrm{i}J_z\alpha)\,\exp(-\mathrm{i}J_y\beta)\,\exp(-\mathrm{i}J_z\gamma) = R(\alpha,\beta,\gamma) \tag{30}$$

Zo vzťahov (20), (22) vyplýva, že pri rotácii stavu $|j, m\rangle$ sa nemení kvantové číslo j, preto možno písať

$$R(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle = \sum_{m'=-j}^{j}\mathscr{D}^{j}_{m',m}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle \tag{31}$$

kde $\mathscr{D}^{j}_{m',m}$ sú *rotačné matice*. Vzťah (31) je ich definičným vzťahom.

Podľa (30) je *zrejmé*, že rotačné matice sa dajú vyjadriť v tvare

$$\mathscr{D}^{j}_{m',m}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\alpha-\mathrm{i}m\gamma}d^{j}_{m',m}(\beta) \tag{32}$$

kde

$$d^{j}_{m',m}(\beta) = \langle j', m'|\exp(-\mathrm{i}\beta\mathbf{J}_y)|j, m\rangle \tag{33}$$

sú *Wignerove matice*. Ich maticové elementy možno vypočítať zo vzťahov (20) a (22). V špeciálnom prípade $j = 1/2$ dostaneme

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

11.4 SKLADANIE MOMENTOV HYBNOSTI, CLEBSCHOVE-GORDANOVE KOEFICIENTY

Moment hybnosti sústavy je často súčtom momentov hybnosti dvoch alebo viacerých podsústav. Napríklad pre elektrón v centrálne symetrickom poli sa celkový moment hybnosti skladá z orbitálneho a spinového momentu hybnosti. V atóme hélia (ak zanedbávame spiny elektrónov) bude celkový moment hybnosti daný súčtom orbitálnych momentov dvoch elektrónov. V tejto časti sa budeme zaoberať s formalizmom skladania dvoch momentov hybnosti v kvantovej mechanike. Situácia je tu formálne komplikovanejšia ako v klasickej mechanike, kde dva momenty hybnosti $\boldsymbol{L}_1$ a $\boldsymbol{L}_2$ sa skladajú na výsledný moment jednoducho podľa pravidla sčítania vektorov:

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1 + \boldsymbol{L}_2 \tag{1}$$

Vektorový súčet v (1) priamo implikuje nerovnosti

$$||\boldsymbol{L}_1| - |\boldsymbol{L}_2|| \leq |\boldsymbol{L}| \leq |\boldsymbol{L}_1| + |\boldsymbol{L}_2| \tag{2}$$

S kvantovým analógom týchto nerovností sa stretneme v ďalšom.

V kvantovej mechanike pri opise dvoch momentov hybnosti $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ a $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ uvažujeme dva súbory operátorov:

$$\begin{aligned} &\mathsf{J}_{1,x};\ \mathsf{J}_{1,y};\ \mathsf{J}_{1,z};\ \mathsf{J}_1^2 = \mathsf{J}_{1,x}^2 + \mathsf{J}_{1,y}^2 + \mathsf{J}_{1,z}^2 \\ &\mathsf{J}_{2,x};\ \mathsf{J}_{2,y};\ \mathsf{J}_{2,z};\ \mathsf{J}_2^2 = \mathsf{J}_{2,x}^2 + \mathsf{J}_{2,y}^2 + \mathsf{J}_{2,z}^2 \end{aligned} \tag{3}$$

Jednotlivé momenty hybnosti spĺňajú komutačné vzťahy:

$$\begin{aligned} &[\mathsf{J}_{1,x}, \mathsf{J}_{1,y}] = \mathrm{i}\mathsf{J}_{1,z} \text{ a cyklicky ďalej} \\ &[\mathsf{J}_{2,x}, \mathsf{J}_{2,y}] = \mathrm{i}\mathsf{J}_{2,z} \text{ a cyklicky ďalej} \\ &[\mathsf{J}_{1,x}, \mathsf{J}_1^2] = [\mathsf{J}_{1,y}, \mathsf{J}_1^2] = [\mathsf{J}_{1,z}, \mathsf{J}_1^2] = 0 \\ &[\mathsf{J}_{2,x}, \mathsf{J}_2^2] = [\mathsf{J}_{2,y}, \mathsf{J}_2^2] = [\mathsf{J}_{2,z}, \mathsf{J}_2^2] = 0 \end{aligned} \tag{4}$$

Spoločné vlastné vektory operátorov J_1^2 a $\mathsf{J}_{1,z}$ označíme $|j_1, m_1\rangle$ a spoločné vlastné vektory operátorov J_2^2 a $\mathsf{J}_{2,z}$ ako $|j_2, m_2\rangle$. Pre tieto funkcie platí

$$\mathsf{J}_1^2|j_1, m_1\rangle = j_1(j_1+1)|j_1, m_1\rangle$$

$$\mathsf{J}_2^2|j_2, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)|j_2, m_2\rangle$$

$$\mathsf{J}_{1,z}|j_1, m_1\rangle = m_1|j_1, m_1\rangle$$

$$\mathsf{J}_{2,z}|j_2, m_2\rangle = m_2|j_2, m_2\rangle$$

Operátory s indexom 1 pôsobia na iné premenné (len na stavy $|j_1, m_1\rangle$) ako operátory s indexom 2 (tie pôsobia len na stavy $|j_2, m_2\rangle$), a preto

každý operátor s indexom 1 komutuje
s každým operátorom s indexom 2 (5)

Operátor celkového momentu hybnosti (dvojčasticovej sústavy) definujeme analogicky ako v klasickom prípade[192]:

$$\mathsf{J}_x = \mathsf{J}_{1,x} + \mathsf{J}_{2,x} \qquad \mathsf{J}_y = \mathsf{J}_{1,y} + \mathsf{J}_{2,y} \qquad \mathsf{J}_z = \mathsf{J}_{1,z} + \mathsf{J}_{2,z} \tag{6}$$

V dôsledku (5) platí:

$$\begin{gathered}[\mathsf{J}_x, \mathsf{J}_y] = \mathrm{i}\mathsf{J}_z \qquad [\mathsf{J}_y, \mathsf{J}_z] = \mathrm{i}\mathsf{J}_x \qquad [\mathsf{J}_z, \mathsf{J}_x] = \mathrm{i}\mathsf{J}_y \\ [\mathsf{J}_x, \mathsf{J}^2] = [\mathsf{J}_y, \mathsf{J}^2] = [\mathsf{J}_z, \mathsf{J}^2] = 0\end{gathered} \tag{7}$$

Na základe predchádzajúcich komutačných vzťahov možno ľahko dokázať, že

$$\begin{gathered}[\mathsf{J}_1^2, \mathsf{J}^2] = [\mathsf{J}_2^2, \mathsf{J}^2] = 0 \\ [\mathsf{J}_1^2, \mathsf{J}_z] = [\mathsf{J}_2^2, \mathsf{J}_z] = 0\end{gathered} \tag{8}$$

Rovnice (3) až (8) ukazujú, že zo súboru operátorov:

$$\mathsf{J}_{1,x};\ \mathsf{J}_{1,y};\ \mathsf{J}_{1,z};\ \mathsf{J}_1^2;\ \mathsf{J}_{2,x};\ \mathsf{J}_{2,y};\ \mathsf{J}_{2,z};\ \mathsf{J}_2^2;\ \mathsf{J}_x;\ \mathsf{J}_y;\ \mathsf{J}_z \text{ a } \mathsf{J}^2$$

možno vybrať štyri navzájom komutujúce operátory.

Spravidla vyberáme súbor

$$\mathsf{J}_{1,z};\ \mathsf{J}_1^2;\ \mathsf{J}_{2,z};\ \mathsf{J}_2^2 \tag{9}$$

alebo súbor

$$\mathsf{J}^2;\ \mathsf{J}_z;\ \mathsf{J}_1^2;\ \mathsf{J}_2^2 \tag{10}$$

Vlastné stavy súboru (9) možno ľahko skonštruovať. Ak ich označíme ako $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$, tak môžeme hneď zapísať:[193]

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \tag{11}$$

---

[192] Pri takejto definícii operátory J_x, J_y, J_z opisujú rotácie zloženej sústavy. V tomto zmysle je teda definícia (6) nevyhnutná.

[193] Po formálnej stránke ide o tenzorový súčin dvoch vektorov, ktorý sme z matematického hľadiska striktne nedefinovali, intuitívne je však zrejmý. Pritom skalárny súčin vektorov $|a, b\rangle = |a\rangle|b\rangle$ a $|c, d\rangle = |c\rangle|d\rangle$ definujeme ako $\langle c, d|a, b\rangle = \langle c|a\rangle\langle d|b\rangle$.

Tieto stavy tvoria úplný systém a (ak považujeme j_1 a j_2 za pevné) spĺňajú vzťah ortogonálnosti

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, m_1', m_2' \rangle = \delta_{m_1, m_1'} \delta_{m_2 m_2'}$$

Pretože m_1 môže nadobúdať $(2j_1 + 1)$ a m_2 zase $(2j_2 + 1)$ hodnôt, vidíme, že počet lineárne nezávislých stavov typu (11) je:

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \tag{12}$$

Vlastné funkcie súboru operátorov (10) označíme ako $|j, m, j_1, j_2\rangle$; tieto stavy zrejme spĺňajú rovnice :

$$\begin{aligned} \mathsf{J}^2|j, m, j_1, j_2\rangle &= j(j + 1)|j, m, j_1, j_2\rangle \\ \mathsf{J}_z|j, m, j_1, j_2\rangle &= m|j, m, j_1, j_2\rangle \\ \mathsf{J}_1^2|j, m, j_1, j_2\rangle &= j_1(j_1 + 1)|j, m, j_1, j_2\rangle \\ \mathsf{J}_2^2|j, m, j_1, j_2\rangle &= j_2(j_2 + 1)|j, m, j_1, j_2\rangle \end{aligned} \tag{13}$$

Všimnime si teraz štruktúru systému stavov $|j, m, j_1, j_2\rangle$ a jeho súvis so stavmi (11). Pretože operátory J_x, J_y, J_z, J^2 spĺňajú komutačné vzťahy (3.1) možno stavy $|j, m, j_1, j_2\rangle$ usporiadať do nasledujúcich skupín

$$\{|j, j, j_1, j_2\rangle, |j, j - 1, j_1, j_2\rangle, \ldots, |j, -j, j_1, j_2\rangle\} \tag{14}$$

s rôznymi hodnotami j. Najvyššia možná hodnota j bude rovnaká ako najvyššia možná hodnota m. Takýto stav zostrojíme hneď, ak si uvedomíme, že platí $\mathsf{J}_z = \mathsf{J}_{1,z} + \mathsf{J}_{2,z}$:

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2, j_1, j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle|j_2, j_2\rangle \tag{15}$$

Aplikáciou operátorov J_-, $(\mathsf{J}_-)^2$, … na stav (15) možno podobne ako v 3. časti zostrojiť systém stavov (14) prislúchajúci k $j = j_1 + j_2$. Stav $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1, j_2\rangle$, bude istou kombináciou stavov $|j_1, j_1\rangle|j_2, j_2 - 1\rangle$ a $|j_1, j_1 - 1\rangle|j_2, j_2\rangle$. Ak zostrojíme kombináciu ortogonálnu k tejto, dostaneme zrejme stav

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1, j_1, j_2\rangle$$

Postupnou aplikáciou operátorov J_-, $(\mathsf{J}_-)^2$, … dostaneme teraz systém stavov (14), príslušný k $j = j_1 + j_2 - 1$. Ak tento postup opakujeme ďalej, môžeme zostrojiť všetky možné systémy stavov typu (14). Hodnoty j budú pritom z množiny hodnôt:

$$j \in \{j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \ldots |j_1 - j_2|\} \tag{16}$$

Tento výsledok nie je prekvapujúci, pretože zodpovedá presne vzťahu (2) platnému pre skladanie momentov hybnosti v klasickej mechanike. Z konštrukcie vidíme, že každý stav $|j, m, j_1, j_2\rangle$ je lineárnou kombináciou stavov$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$

$$|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j, m|j_1, m_1, j_2, m_2)|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \tag{17}$$

Koeficienty $C(j, m|j_1, m_1, j_2, m_2)$ v rovnici (17) sa nazývajú *Clebschove-Gordanove koeficienty* alebo *koeficienty vektorového skladania*[194]. Umožňujú vyjadriť vlastné stavy celkového momentu hybnosti a jeho tretej zložky pomocou vlastných stavov momentov hybnosti podsústav. Niekedy sa tiež používajú *Wignerove koeficienty* definované vzťahom

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 + m}}{\sqrt{2j+1}} C(j, m|j_1, m_1, j_2, m_2)$$

ktoré majú užitočné vlastnosti symetrie. Tabuľky niektorých Clebschových-Gordanových koeficientov uvádzame na konci tejto časti. Clebschove-Gordanove koeficienty sú uvedené vo fázovej konvencii Condona a Shortleyho, čiže všetky koeficienty sú reálne. Pretože určujú transformáciu medzi dvoma ortogonálnymi bázami, sú tieto koeficienty elementami unitárnej matice. Transformácia inverzná k (17) potom bude:

$$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j=j_1+j_2} C(j, m_1 + m_1|j_1, m_1, j_2, m_2)|j_1, m_1 + m_1, j_1, j_2\rangle \tag{18}$$

Ak pôsobíme operátorom $\mathsf{J}_z = \mathsf{J}_{1,\,z} + \mathsf{J}_{2,\,z}$ na (17), vidíme, že koeficient $C(j, m|j_1, m_1, j_2, m_2)$ je nenulový len vtedy, ak $m_1 + m_2 = m$. V opačnom prípade by totiž pravá, resp. ľavá strana v rovniciach (17) a (18) zodpovedala inej hodnote J_z. V rovnici (18) sme už túto skutočnosť explicitne využili.

Niektoré najčastejšie sa vyskytuje Clebschove-Gordanove koeficienty sú uvedené v *tab. 1* až *5*.

$C(j, m|j_1, 1/2, m_1, m_2)$ *Tabuľka 1*

j	$m_2 = 1/2$	$m_2 = -1/2$
$j_1 + 1/2$	$\left(\frac{j_1 + m + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{j_1 - m + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$
$j_1 - 1/2$	$\left(\frac{j_1 - m + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$	$-\left(\frac{j_1 + m + 1/2}{2j_1 + 1}\right)^{1/2}$

Pre Clebschove-Gordanove koeficienty sa v literatúre bežne používajú aj iné označenia. Symbol, ktorý tu označujeme ako $C(j, m|j_1, m_1, j_2, m_2)$, sa niekedy značí výstižne ako $\langle j, m|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$ alebo ako $\langle j, m|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$

Tabuľka 2

$C(j, m|j_1, 1, m_1, m_2)$

j	$m_2 = 1$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$j_1 + 1$	$\left[\frac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1-m+1)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$
j_1	$-\left[\frac{(j_1+m)(j_1-m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\frac{m}{\sqrt{j_1(j_1+1)}}$	$\left[\frac{(j_1-m)(j_1+m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{1/2}$
$j_1 - 1$	$\left[\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$-\left[\frac{(j_1-m)(j_1+m)}{j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(j_1+m+1)(j_1+m)}{(2j_1)(2j_1+1)}\right]^{1/2}$

Tabuľka 3

$\frac{1}{2}\times\frac{1}{2}$		1			
		+1	1	0	
+1/2	+1/2	1	0	0	
	+1/2	−1/2	1/2	1/2	1
	−1/2	+1/2	1/2	−1/2	−1
			−1/2	−1/2	1

Tabuľka 4

$1\times\frac{1}{2}$		3/2					
		+3/2	3/2	+1/2			
+1	+1/2	1	+1/2	1/2			
	+1	−1/2	1/3	2/3	3/2	1/2	
	0	+1/2	2/3	−1/3	−1/2	−1/2	
			0	−1/2	2/3	1/3	3/2
			−1	+1/2	1/3	−2/3	−3/2
					−1	−1/2	1

Tabuľka 5

1×1		2								
		+2	2	1						
+1	+1	1	+1	+1						
	+1	0	1/2	1/2	2	1	0			
	0	+1	1/2	−1/2	0	0	0			
			+1	−1	1/6	1/2	1/3			
			0	0	2/3	0	−1/3	2	1	
			−1	+1	1/6	−1/2	1/3	−1	−1	
						0	−1	1/2	1/2	2
						−1	0	1/2	−1/2	−2
								−1	−1	1

V *tabuľkách 3* až *5* používame označenie

		J	J	…
		M	M	…
m_1	m_2	C. G. koeficienty		
m_1	m_2			
⋮	⋮			

Vo všetkých koeficientoch je vynechaný symbol odmocniny. Napr. −1/3 znamená koeficient $\sqrt{-1/3}$.

Predchádzajúca časť výkladu bola snáď trocha príliš abstraktná. Ilustrujme si preto celú schému na tom najjednoduchšom príklade – skladaní dvoch spinov 1/2. Operátory momentu hybnosti častíc označovaných ako 1, 2 budú potom

$$\mathsf{s}_x^{(a)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_a, \qquad \mathsf{s}_y^{(a)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}_a, \qquad \mathsf{s}_z^{(a)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_a$$

kde a = 1 alebo a = 2 podľa toho, či matica pôsobí na spinor prvej alebo druhej častice. Zvyšovacie a znižovacie operátory pre jednotlivé častice sú

$$\mathsf{s}_+^{(a)} = \mathsf{s}_x^{(a)} + \mathrm{i}\mathsf{s}_y^{(a)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_a$$

$$\mathsf{s}_-^{(a)} = \mathsf{s}_x^{(a)} - i\mathsf{s}_y^{(a)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_a$$

Celkový znižovací operátor bude

$$\mathsf{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_1 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2 \tag{19}$$

pričom prvá matica pôsobí iba na stavy prvej a druhá iba na stavy druhej častice.

Najvyšší priemet momentu hybnosti dostaneme vtedy, ak obe častice sú v stave $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, čo zapíšeme ako

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \tag{20}$$

kde symbol $\otimes$ znamená direktný súčin, t. j. súčin dvoch stavov závisiacich od rôznych premenných. Ak operátorom (19) pôsobíme na stav (20) dostaneme stav

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \tag{21}$$

Tento stav nie je normovaný na 1, ale ako vidno z (3.14) alebo okamžite, normovaným stavom bude

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right] \tag{22}$$

Ďalším pôsobením operátora S_- prídeme k stavu

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \tag{23}$$

Stavy (20), (22) a (23) odpovedajú celkovému spinu rovnému 1 a priemetom na os z rovným 1, 0, −1 v uvedenom poradí. Ostáva nám nájsť ešte stav s celkovým momentom hybnosti 0 a priemetom na os z tiež nulovým. Tento stav musí byť lineárnou kombináciou členov

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \quad \text{a} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$$

pričom koeficienty musia byť také, aby stav, ktorý dostaneme, bol ortogonálny na stav (22). Výsledok až na fázový faktor, ktorý určujeme konvenciou, je zrejme

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right] \tag{24}$$

Doteraz sme používali označenie spinorov ako stĺpcov a operátorov ako matíc, teraz prepíšeme výsledky do tvaru používaného predtým.

Stavy zloženej sústavy píšeme ako $|S, S_z, s_1, s_2\rangle$ a stavy jednotlivých častíc ako $|s_a, s_{za}\rangle$. V označení ako v rovnici (17) potom máme

$$
\begin{aligned}
|1, 1, 1/2, 1/2\rangle &= \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\
|1, 0, 1/2, 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right] \\
|1, -1, 1/2, 1/2\rangle &= \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle
\end{aligned}
\tag{25}
$$

a napokon pre (24)

$$|0, 0, 1/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right]$$

Odtiaľ porovnaním so (17) môžeme okamžite nájsť hodnoty Clebschových-Gordanových koeficientov pre tento prípad. Koeficienty, ktoré takto získame, sú uvedené v *tab. 3*. Odporúčame čitateľovi, aby sa o tom presvedčil a všimol si pritom poznámku za ostatnou tabuľkou, kde je vysvetlené označenie. Poznamenajme ešte, že niekedy sa spinové stavy častíc značia aj symbolmi $\chi_+(1)$, $\chi_-(1)$, čo označuje stavy so spinom „hore“, resp. „dolu“ pre časticu číslo „1“. V tomto označení pravá strana v druhej z rovníc (25) by bola

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2),]$$

a čitateľ si ľahko prepíše aj ostatné.

11.5 TENZOROVÉ OPERÁTORY, WIGNEROVA-ECKARTOVA VETA

Pri výpočtoch pravdepodobnosti prechodu atómu zo stavu „1“ do stavu „2“ sme sa v 9. kapitole stretli s výrazmi typu

$$\int \psi_2^* \boldsymbol{r} \psi_1 \,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

kde ψ_1 je vlnová funkcia začiatočného a ψ_2 konečného stavu atómu. Indexy 1, 2 boli stručným označením pre tri kvantové čísla: hlavné, orbitálne a magnetické. Podrobnejšie: 1 ~ (n, l, m), 2 ~ (n', l', m'). V uvedenom maticovom elemente poznáme transformačné vlastnosti oboch vlnových funkcií pri rotáciách a správanie sa $\boldsymbol{r}$ pri rotáciách je tiež dobre známe. Základná myšlienka je jednoduchá. Pretože operátor $\boldsymbol{r}$ sa pri rotáciách transformuje veľmi podobne ako stav s momentom hybnosti 1 (v zmysle uvedenom nižšie) správa sa výraz $\boldsymbol{r}\psi_l$ ako stav získaný zložením momentov hybnosti 1 a l. Závislosť skalárneho súčinu takéhoto stavu so stavom s momentom hybnosti l' na niektorých kvantových číslach je preto triviálna. Vychádzajúc len zo správania sa funkcií $\psi_{n,\,l,\,m}$, $\psi_{n',\,l',\,m'}$ a operátora $\boldsymbol{r}$ pri rotáciách môžeme odvodiť viaceré dôležité vlastnosti uvedeného maticového elementu. V tejto časti sa budeme zaoberať všeobecnou formuláciou takýchto úloh.

Tenzorové operátory. Uvažujme rotáciu[195]

$$x_i \to x_i' = \boldsymbol{R}_{ik}x_k \tag{1}$$

Stavy $|\psi\rangle$ sa pri rotácii (1) transformujú nasledovne

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \mathsf{U}(\mathbf{R})|\psi\rangle \tag{2}$$

kde $\mathsf{U}(\mathbf{R})$ je unitárny operátor priradený rotácii (1). Operátor A sa podľa (2.17) pri rotácii (1) transformuje nasledovne

$$\mathsf{A} \to \mathsf{A}' = \mathsf{U}(\mathbf{R})\mathsf{A}\mathsf{U}^{+}(\mathbf{R}) \tag{3}$$

Sústavu $(2L + 1)$ operátorov

$$\mathsf{T}^L_M; \quad M = -L, (-L + 1), \ldots, (L - 1), L \tag{4}$$

kde L je celé číslo nazývame (*ireducibilným*) *tenzorovým operátorom*, ak pri transformácii (3) platí:

$$\mathsf{U}(\mathbf{R})\mathsf{T}^L_M\mathsf{U}^{+}(\mathbf{R}) = \sum_{M'}\mathsf{T}^L_{M'}\mathscr{D}^L_{M',\,M}(\mathbf{R}) \tag{5}$$

kde matica $\mathscr{D}^L_{M',\,M}(\mathbf{R})$ je daná rovnicou (3.31) a symbol $\mathbf{R}$ v (5) označuje Eulerove uhly (α, β, γ).

Nech $|(\alpha), j, m\rangle$ označuje stav, pre ktorý platí[196]

$$\begin{aligned} \mathsf{J}^2|(\alpha), j, m\rangle &= j(j + 1)|(\alpha), j, m\rangle \\ \mathsf{J}_z|(\alpha), j, m\rangle &= m|(\alpha), j, m\rangle \end{aligned} \tag{6}$$

---

[195] V rovnici (1) používame označenie $(x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$ a na pravej strane používame sumačnú konvenciu – sčítavame podľa opakovaného indexu k. Ak je rotácia daná Eulerovymi uhlami α, β, γ tak matica $\boldsymbol{R}_{ik}$ je tiež jednoznačne daná týmito uhlami a v podrobnom zápise by sme mali písať $\boldsymbol{R}(\alpha, \beta, \gamma)_{ik}$. V ďalšom budeme symbolom $\mathbf{R}$ (tam, kde to nemôže viesť k nedorozumeniu) označovať aj trojicu Eulerových uhlov, určujúcich rotáciu.

[196] Symbol a v $|(\alpha), j, m\rangle$ označuje všetky kvantové čísla, odlišné od j, m.

kde J^2, J_z sú druhá mocnina a tretí komponent celkového momentu hybnosti sústavy. Podľa (3.31) pri rotácii (1) platí:

$$|(\alpha), j, m\rangle \to \mathsf{U}(\mathbf{R})|(\alpha), j, m\rangle = \sum_{M'} \mathscr{D}^{j}_{m',m}(\mathbf{R})|(\alpha), j, m\rangle \tag{7}$$

Definujme teraz vektor (nie nevyhnutne normovaný)

$$|(\alpha, T^L), j, m, L, M\rangle = \mathsf{T}^L_M|(\alpha), j, m'\rangle \tag{8}$$

Podľa rovníc (5) a (7) sa tento vektor pri rotácii (1) transformuje nasledovne:

$$\mathsf{U}(\mathbf{R})|(\alpha, T^L), j, m, L, M\rangle = \mathsf{U}(\mathbf{R})\, \mathsf{T}^L_M \mathsf{U}^+(\mathbf{R})\mathsf{U}(\mathbf{R})|(\alpha), j, m\rangle =$$
$$= \sum_{M' m'} \mathscr{D}^{L}_{M',M}(\mathbf{R})\mathscr{D}^{j}_{m',m}(\mathbf{R})\mathsf{T}^L_{M'}|(\alpha), j, m'\rangle$$

teda tak isto, ako by sa transformoval direktný súčin dvoch stavov $|j, m\rangle|L, M\rangle$. Túto skutočnosť sme v zápise vektora $|(\alpha, T^L), j, m, L, M\rangle$ znázornili tým, že do zátvorky sme dali symboly, ktoré naznačujú, ako daný stav vznikol a mimo zátvorku kvantové čísla určujúce jeho transformačné vlastnosti pri rotáciách. So stavmi typu $|j, m, L, M\rangle$ sme sa už stretli v 4. časti a rozkladali sme ich pomocou Clebschových-Gordanových koeficientov do stavov s určitou hodnotou celkového momentu hybnosti. Dá sa teda predpokladať, že existuje systém vektorov, $|(\alpha, T^L, j), J, \mu\rangle$, ktoré sa transformujú pri rotáciách ako stavy s celkovým momentom hybnosti J a s priemetom na os z rovnajúcim sa μ, pričom

$$|(\alpha, T^L), j, m, L, M\rangle = \sum_{J=|L-j|}^{J=L+j} C(J, M+m|j, m, L, M)|(\alpha, T^L, j), J, M+m\rangle \tag{9}$$

Táto rovnica je zrejme analogická k rovnici (4.18). Vzťah inverzný k vzťahu (9), ktorý je analógom (4.17) možno potom považovať za definíciu vektorov $|(\alpha, T^L, j), J, \mu\rangle$ a ukázať, že tieto vektory majú spomínané vlastnosti. Z transformačných vlastností vektorov $|(\alpha, T^L, j), J, \mu\rangle$ pri rotáciách vyplýva, že $|(\alpha, T^L, j), J, \mu\rangle$ je stav s celkovým momentom hybnosti J a s priemetom na os z rovnajúcim sa μ.

Pokúsime sa teraz nájsť závislosť maticových elementov

$$\langle(\alpha'), j', m'|\mathsf{T}^L_M|(\alpha), j, m\rangle \tag{10}$$

od kvantových čísel m', M, m.

Vyjadríme $T^L_M|(\alpha), j, m\rangle$ pomocou rozkladu (9) a po dosadení do (10) máme:

$$\langle(\alpha'), j', m'|\mathsf{T}^L_M|(\alpha), j, m\rangle =$$
$$\sum_{J=|L-j|}^{J=L+j} C(J, M+m|j, m, L, M)\,\langle(\alpha'), j', m'|(\alpha, T^L, j), J, M+m\rangle \tag{11}$$

Dva vlastné stavy operátora J^2 sú navzájom ortogonálne, ak nezodpovedajú tej istej vlastnej hodnote a to isté platí pre operátor J_z. Navyše, maticový element $\langle(\alpha), j, m|(\beta), j, m\rangle$ nezávisí od kvantového čísla m. Toto tvrdenie dokážeme o chvíľu. Preto maticový element v (11) bude nulový pre $j' \neq J$, $m' \neq M + m$ a môžeme písať

$$\langle(\alpha'), j', m'|(\alpha, T^L, j), J, M + m\rangle = \delta_{j', J}\delta_{m', (M+m)}\,\langle\alpha', j'\|\mathrm{T}^{\mathrm{L}}\|\alpha, j\rangle$$

Tento vzťah je definíciou redukovaného maticového elementu $\langle\alpha', j'\|T_L\|\alpha, j\rangle$, ktorý, podľa toho, čo sme vyššie povedali, závisí iba od α', j', α, j a je rovnaký pre všetky operátory T^L_M pre rôzne M. Po dosadení dostaneme

$$\langle(\alpha'), j', m'|\mathsf{T}^L_M|(\alpha), j, m\rangle = C(j', m'|j, m, L, M)\frac{\langle\alpha', j'\|T^L\|\alpha, j\rangle}{\sqrt{2j'+1}} \qquad (12)$$

Na pravej strane sme vynechali faktor $\delta_{m'(M+m)}$, ktorý je zbytočný, pretože Clebschove-Gordanove koeficienty sa rovnajú nule pre $m' \neq m + M$.

Rovnica (12) sa nazýva Wignerovou-Eckartovou vetou. Fyzikálny význam Wignerovej-Eckartovej vety je v tom, že závislosť maticového elementu (12) od magnetických kvantových čísel m, M, m' je daná výlučne Clebschovým-Gordanovým koeficientom. Pomer dvoch maticových elementov pri pevnom α', α, j', j, L je jednoznačne daný vzťahom (12). Navyše Clebschov-Gordanov koeficient v (12) je rôzny od nuly len vtedy, ak $m' = M + m$ a ak $|L - j| \leq j' \leq L + j$. Odtiaľ vyplývajú rôzne výberové pravidlá.

Dokážeme ešte tvrdenie, použité za rovnicou (11). Podľa neho maticový element $\langle(\alpha), j, m|(\alpha'), j, m\rangle$ nezávisí od kvantového čísla m, pritom nie je podstatné, aký je význam kvantových čísel α, α'. Využijeme tu operátory J_+, J_- a rovnice (3.11) a (21). Podľa nich platí:

$$|(\alpha), j, m + 1\rangle = [(j - m)(j + m + 1)]^{-1/2}\mathsf{J}_+|(\alpha), j, m\rangle$$

a to isté pre $|(\alpha'), j, m + 1\rangle$. Odtiaľ

$$\langle(\alpha), j, m + 1|(\alpha'), j, m + 1\rangle = \\ [(j - m)(j + m + 1)]^{-1}\langle(\alpha), j, m|\mathsf{J}_-\mathsf{J}_+|(\alpha'), j, m\rangle$$

Ďalej platí

$$\mathsf{J}_-\mathsf{J}_+|(\alpha'), j, m\rangle = (\mathsf{J}^2 - \mathsf{J}_z^2 - \mathsf{J}_z)|(\alpha'), j, m\rangle = \\ = [j(j + 1) - m^2 - m]\,|(\alpha'), j, m\rangle$$

Z dvoch posledných rovníc dostaneme ihneď

$$\langle(\alpha), j, m+1|(\alpha'), j, m+1\rangle = \langle(\alpha), j, m|(\alpha'), j, m\rangle$$

Pretože toto tvrdenie platí pre ľubovoľné $m = -j, \ldots, j-1, j$, vyplýva odtiaľ nezávislosť maticového elementu od m.

Ako ilustráciu uveďme, že trojica operátorov (v x-reprezentácii)

$$\mathsf{T}_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x+\mathrm{i}y), \qquad \mathsf{T}_0^1 = z, \qquad \mathsf{T}_{-1}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x-\mathrm{i}y) \tag{13}$$

je v zmysle definície (5) tenzorovým operátorom, o čom sa možno presvedčiť priamym výpočtom. V maticovom elemente typu

$$\int \psi_2^* \boldsymbol{r} \psi_1 \, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14}$$

potom môžeme vyjadriť $\boldsymbol{r}$ pomocou operátorov T_M^1vzťahmi inverznými k (13). Orbitálne kvantové čísla stavov ψ_1 a ψ_2 označme l_1 a l_2. Podľa *tabuľky 2* CG koeficientov z predchádzajúceho článku je podľa (12) i bez počítania zrejmé, že maticový element (14) môže byť nenulový iba pre $l_2 = l_1$ alebo $l_2 = l_1 + 1$ alebo $l_2 = l_1 - 1$. Zložením momentov hybnosti l_1 a 1 totiž môžeme dostať iba niektorý z vyššie uvedených momentov hybnosti. Z diskusie v 9. kapitole však vieme, že pre $l_2 = l_1$ je maticový element nulový kvôli parite. Pomocou Wignerovej-Eckartovej vety sme teda dokázali jednoduché výberové pravidlo (porovnaj s kapitolou 9): elektrické dipólové prechody sú v prvom ráde možné iba medzi stavmi, ktorých orbitálne kvantové čísla sa líšia o jednotku.

11.6 ZHRNUTIE

Bez podrobnejšieho komentára zopakujeme prehľadne základné vzťahy:
Operátory momentu hybnosti spĺňajú komutačný vzťah

$$[\mathsf{J}_i, \mathsf{J}_k] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hbar \mathsf{J}_k \quad \text{(sumovanie!)}$$

Vlastné stavy:

$$\mathsf{J}^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle \qquad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$$

$$\mathsf{J}_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle \qquad m = -j, -j+1, \ldots, j$$

Pre operátory $\mathsf{J}_+ = \mathsf{J}_x + \mathrm{i}\mathsf{J}_y$, $\mathsf{J}_- = \mathsf{J}_x - \mathrm{i}\mathsf{J}_y$ platí

$$\mathsf{J}_+|j, m\rangle = \{(j-m)(j+m+1)\}^{1/2}\hbar|j, m+1\rangle$$

$$\mathsf{J}_-|j, m\rangle = \{(j+m)(j-m+1)\}^{1/2}\hbar|j, m-1\rangle$$

Skladanie momentov hybnosti (definícia CG koeficientov)

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(J, M|j_1, m_1, j_2, m_2)|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$$

$$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle = \sum_j C(J, m_1 + m_2|j_1, m_1, j_2, m_2)|J, m_1 + m_2\rangle$$

Pri rotácii o uhol ϑ okolo osi $\boldsymbol{n}$ sa transformujú stavy podľa vzťahu

$$|\psi'\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{n}.\hat{\boldsymbol{J}}\right)|\psi'\rangle$$

Ak je rotácia zadaná Eulerovými uhlami α, β, γ.

$$|\psi'\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}J_z\alpha\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}J_y\alpha\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}J_z\alpha\right)|\psi\rangle = R(\alpha, \beta, \gamma)|\psi\rangle$$

Vlastné stavy momentu hybnosti sa transformujú pri rotáciách podľa vzťahu (definícia Wignerových matíc)

$$R(\alpha, \beta, \gamma)|j, m\rangle = \sum_{m'=j}^{j} e^{-im'\alpha - im\gamma} d^j_{m'm}(\beta)|j, m'\rangle$$

11.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Nájdite stredné hodnoty operátorov J_x, J_y, J_z v stave $|J, M\rangle$!

2. Vypočítajte strednú kvadratickú odchýlku

$$\overline{(\Delta J_x)^2} = \langle JM|(J_x - \bar{J}_x)^2|JM\rangle$$

a to isté pre

$$\overline{(\Delta J_y)^2} = \langle JM|(J_y - \bar{J}_y)^2|JM\rangle$$

3. Odvoďte vzťah (3.29) na základe vzťahu (3.28). Návod: použite vzťah (5.4.19).

4. Nech $R = \exp(-i\frac{\vartheta}{2}\boldsymbol{\sigma}_z)$ (operátor rotácie spinoru okolo osi z). Ukážte, že platí

$$\boldsymbol{\sigma}'_x = R^+\boldsymbol{\sigma}_x R = \boldsymbol{\sigma}_x\cos\vartheta - \boldsymbol{\sigma}_x\sin\vartheta$$

$$\boldsymbol{\sigma}'_y = R^+\boldsymbol{\sigma}_y R = \boldsymbol{\sigma}_y\sin\vartheta - \boldsymbol{\sigma}_y\cos\vartheta$$

$$\boldsymbol{\sigma}'_z = R^+\boldsymbol{\sigma}_z R = \boldsymbol{\sigma}_z$$

Návod: použite vzťah (5.4.19).

5. Nájdite Wignerovu maticu (pozrite vzťah (3.33)) pre prípad spinu 1/2.

6. Odvoďte CG koeficienty uvedené v *tab. 1* vo 4. článku.

7. Uvažujme dve častice so spinom 1/2 Dvojčasticová spinová funkcia môže odpovedať celkovému spinu jedna alebo nula (alebo ich superpozícii) Nájdite operátory P_0, P_1, ktoré z dvojčasticovej vlnovej funkcie vyprojektujú stavy s celkovým spinom 0 resp 1.
8. Častica so spinom 1/2 sa pohybuje v centrálne symetrickom poli tak, že jej orbitálny moment hybnosti je l Nájdite projekčné operátory $P_{l+1/2}$, $P_{l-1/2}$, ktoré vyberajú z celkovej vlnovej funkcie stavy s $j = l + 1/2$, $j = l - 1/2$.
9. Nestabilná častica s momentom hybnosti l a s priemetom momentu hybnosti do osi z rovným m sa rozpadá na dve bezspinové častice Nájdite uhlové rozdelenie produktov rozpadu v pokojovej sústave rozpadajúcej sa častice.
10. Ukážte, že trojica $(\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z)$ tvorí vektorový operátor.
11. Uvažujte vlnové funkcie v atóme vodíka $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ a trojicu maticových elementov

$$\int \varphi^*_{n'l'm'}(\boldsymbol{r}) x_i \, \psi_{n\,l\,m}(\boldsymbol{r}) \, \mathrm{d}V, \quad i = 1, 2, 3$$

Vyjadrite x_i, $i = 1, 2, 3$ pomocou guľových funkcií Y_{lm}, $m = -1, 0, 1$, rozdeľte uhlovú a radiálnu časť maticového elementu a spočítajte pomocou CG koeficientov uhlovú časť. Zovšeobecnite potom príklad tak, že x_i nahradíte výrazmi $Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi)$ pri pevnom λ a premennom μ. Interpretujte výsledky pomocou Wignerovej-Eckartovej vety.

12. Elektricky kvadrupólový moment náboja rozloženého s hustotou $\rho(\boldsymbol{r})$ je v klasickom prípade definovaný ako tenzor

$$\boldsymbol{Q}_{ik} = \int \rho(\boldsymbol{r})(3x_i x_k - \delta_{ik} r^2) \, \mathrm{d}V, \quad i, k = 1, 2, 3$$

Pretože zrejme platí $\boldsymbol{Q}_{ik} = \boldsymbol{Q}_{ki}$, $\Sigma \boldsymbol{Q}_{ii} = 0$, má tento tenzor len 5 nezávislých komponentov. Vyjadrite tieto komponenty pomocou piatich veličín

$$\boldsymbol{Q}_{ik} = \int \rho(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{r}^2 Y_{2m}(\vartheta, \varphi) \, \mathrm{d}V$$

kde $m = -2, -1, 0, 1, 2$ Aká je kvantovomechanická analógia týchto vzťahov? Pokúste sa sformulovať na základe Wignerovej-Eckertovej vety výberové pravidlá pre elektrický kvadrupólový moment.