22 Twierdzenie Wignera-Eckarta

22.1 Transformacja wektora wodzącego

W rozdziale 21 wyprowadziliśmy wzór na transformację dowolnego operatora pod wpływem transformacji symetrii

$$\hat{O} = \hat{U}_R^{\dagger}(\vec{\varphi})\hat{O}_R\hat{U}_R(\vec{\varphi}). \tag{22.1}$$

Przypomnijmy, że $\hat{O}$ to operator $\hat{O}_R$ „widziany" z układu przed transformacją.

Rzeczywiście jeżeli stany transformują się jak

$$|\beta\rangle = \hat{U}_R(\vec{\varphi})\,|\alpha\rangle$$

to element macierzowy (o którym zakładamy, że jest niezmienniczy) można zapisać jako (pamiętając, że $U_R^{\dagger}U_R = 1$)

$$\langle\beta'|\,\hat{O}_R\,|\beta\rangle = \langle\alpha'|\,\hat{U}_R^{\dagger}(\vec{\varphi})\,\hat{O}_R\hat{U}_R(\vec{\varphi})\,|\alpha\rangle = \langle\alpha'|\,\hat{O}\,|\alpha\rangle$$

skąd wynika przekształcenie (22.1). Przyjmując, że $\vec{\varphi}$ są *infinitenzymalne* otrzymujemy

$$\hat{O} = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\hat{J}\right)\hat{O}_R\left(1 - \frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\hat{J}\right) = \hat{O}_R + \frac{i}{\hbar}\sum_k \varphi_k\left[\hat{J}_k, \hat{O}_R\right] + \ldots\,. \tag{22.2}$$

Przypomnijmy, że w analogiczny sposób wyprowadziliśmy w rozdziale 21 wzór (21.19) na przekształcenie operatora położenia pod wpływem translacji. Z równania (22.2) widać, że własności transformacyjne operatora można wyznaczyć znając jego reguły komutacji z generatorami transformacji symetrii. W dalszym ciągu dyskutować będziemy grupę obrotów, ale wnioski, do których dojdziemy będą słuszne także dla innych grup symetrii.

Jeżeli $\hat{O}_R$ komutuje z generatorami (jak np. Hamiltonian), to mamy do czynienia z operatorem *niezmienniczym* względem grupy obrotów. Jednak wiele operatorów przekształca się pod wpływem obrotów. Przyjmijmy, że w układzie obróconym $\hat{O}_R = \vec{n}$. Z punktu widzenia układu wyjściowego $\hat{O} = \vec{n}'$. Zastanówmy się, jak transformuje się wektor wodzący $\vec{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$. Zamiast skorzystać z jawnej postaci operatorów $\hat{J}_{x,y,z}$ i jawnej postaci $\vec{n}$ w celu wyliczenia reguł komutacj, zauważmy, że

$$\begin{aligned}
n_x &= \sin\theta\cos\varphi = -\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^1(\theta,\varphi) - Y_1^{-1}(\theta,\varphi)\right),\\
n_y &= \sin\theta\sin\varphi = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^1(\theta,\varphi) + Y_1^{-1}(\theta,\varphi)\right),\\
n_z &= \cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0(\theta,\varphi).
\end{aligned} \tag{22.3}$$

gdzie funkcje kuliste dane są wzorami:

$$l = 1 \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \\ Y_1^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}, \end{array} \right. \tag{22.4}$$

Warto wprowadzić

$$n_\pm = n_x \pm i n_y \tag{22.5}$$

co daje

$$n_+ = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^1(\theta,\varphi), \quad n_- = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^{-1}(\theta,\varphi). \tag{22.6}$$

A zatem aby znaleźć prawo transformacji wektora $\vec{n}$ musimy znaleźć reguły komutacji $\hat{J}_i$ z funkcjami kulistymi $Y_l^m(\theta,\varphi)$.

Zauważmy najpierw, że podziałanie operatorem $\hat{J}_3$ na iloczyn funkcji kulistej $Y_l^m(\theta,\varphi)$ i dowolnej funkcji f zależnej od kątów daje

$$\hat{J}_3 \left(Y_l^m(\theta,\varphi) f(\theta,\varphi)\right) = \hbar m Y_l^m(\theta,\varphi) f(\theta,\varphi) + Y_l^m(\theta,\varphi)\, \hat{J}_3 f(\theta,\varphi)$$

co można przepisać jako

$$\left[\hat{J}_3, Y_l^m(\theta,\varphi)\right] f(\theta,\varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta,\varphi) f(\theta,\varphi)$$

lub

$$\left[\hat{J}_3, Y_l^m(\theta,\varphi)\right] = \hbar m Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{22.7}$$

Analogicznie otrzymamy

$$\left[\hat{J}_\pm, Y_l^m(\theta,\varphi)\right] = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\, Y_l^{m\pm 1}(\theta,\varphi). \tag{22.8}$$

Nawiasem mówiąc przyjęte przez nas fazy dla funkcji kulistych zostały tak dobrane, aby spełnione były relacje (22.8). Dla Y_1^1 otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\left[\hat{J}_3, Y_1^0\right] &= 0, \quad \left[\hat{J}_3, Y_1^{\pm 1}\right] = \pm\hbar Y_1^{\pm 1}, \quad \left[\hat{J}_\pm, Y_1^0\right] = \hbar\sqrt{2} Y_1^{\pm 1}, \\
\left[\hat{J}_\pm, Y_1^{\mp 1}\right] &= \hbar\sqrt{2} Y_l^0, \quad \left[\hat{J}_\pm, Y_1^{\pm 1}\right] = 0.
\end{aligned}$$

Widzimy zatem, że wektor $\vec{n}$ transformuje się w następujący sposób

$$\begin{aligned}
\left[\hat{J}_3, n_z\right] &= 0, \quad \left[\hat{J}_3, n_\pm\right] = \pm\hbar\, n_\pm, \\
\left[\hat{J}_\pm, n_z\right] &= \mp\hbar\, n_\pm, \quad \left[\hat{J}_\pm, n_\pm\right] = 0, \\
\left[\hat{J}_\pm, n_\mp\right] &= \pm 2\hbar\, n_z.
\end{aligned} \tag{22.9}$$

Teraz jesteśm już gotowi policzyć

$$\delta_i = \sum_k \varphi_k \left[\hat{J}_k, n_i\right] = \frac{1}{2}\varphi_+ \left[\hat{J}_-, n_i\right] + \frac{1}{2}\varphi_- \left[\hat{J}_+, n_i\right] + \varphi_3 \left[\hat{J}_3, n_i\right], \tag{22.10}$$

gdzie

$$\vec{n}' = \vec{n} + \frac{i}{\hbar}\vec{\delta}. \tag{22.11}$$

Dla $i = z, \pm$ otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\delta_3 &= \frac{\hbar}{2}\left(\varphi_+ n_- - \varphi_- n_+\right) = -i\hbar\,(\vec{\varphi}\times\vec{n})_3\,, \\
\delta_+ &= \hbar\left(-\varphi_+ n_z + \varphi_3 n_+\right), \\
\delta_- &= \hbar\left(\varphi_- n_z - \varphi_3 n_-\right), \qquad (22.12)
\end{aligned}$$

gdzie

$$\delta_\pm = \delta_1 \pm i\delta_2, \qquad (22.13)$$

co dla $i = 1, 2$ daje

$$\begin{aligned}
\delta_1 &= \frac{1}{2}\left(\delta_+ + \delta_-\right) = -i\hbar\left(\varphi_2 n_z - \varphi_3 n_y\right) = -i\hbar\,(\vec{\varphi}\times\vec{n})_1\,, \\
\delta_2 &= \frac{-i}{2}\left(\delta_+ - \delta_-\right) = -i\hbar\left(-\varphi_1 n_z + \varphi_3 n_x\right) = -i\hbar\,(\vec{\varphi}\times\vec{n})_2\,. \qquad (22.14)
\end{aligned}$$

Zatem $\delta_i = -i\hbar\,(\vec{\varphi}\times\vec{n})_i$ i infinitenzymalne przekształcenie wektora $\vec{n}$ (traktowanego jako operator) przyjmuje postać

$$\vec{n}' = \vec{n} + (\vec{\varphi}\times\vec{n})\,. \qquad (22.15)$$

Zatem operator wektora wodzącego $\vec{n}$ w stanach obróconych jest równy odpowiednim elementom macierzowym operatora $\vec{n} + (\vec{\varphi}\times\vec{n})$ w stanach wyjściowych. Jest to oczywiście znany wzór, jednak wyprowadzony w nowy sposób, mianowicie w oparciu o reguły komutacji operatora $\vec{n}$ z generatorami symetrii. W analogiczny sposób wyprowadzaliśmy już wzór na transformację operatora położenia przy przesunięciu układu współrzędnych.

22.2 Nieprzywiedlne opertaory tensorowe

Wyobraźmy sobie, że mamy zbiór operatorów $\hat{O}^j_m$, których reguły komutacji z $\hat{J}_i$ „naśladują” reguły komutacji (22.7) funkcji kulistych Y^m_j:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{J}_3, \hat{O}^m_j\right] &= \hbar m \hat{O}^m_j, \\
\left[\hat{J}_\pm, \hat{O}^m_j\right] &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\,\hat{O}^{m\pm 1}_j. \qquad (22.16)
\end{aligned}$$

Wskaźnik m numeruje poszczególne operatory, natomiast dolny wskaźnik j informuje nas o wartości j w drugiej z reguł komutacji (22.16). Operator o regułach komutacji zadanych przez (22.16) nazywamy *nieprzywiedlnym (nieredukowalnym) operatorem tensorowym.* W poprzednim paragrafie pokazaliśmy, że operator o $j = 1$ transformuje się jak tensor pierwszego rzędu, czyli wektor ($\vec{n}$). Słowo *nieprzywiedlny* oznacza, że mamy do czynienia z operatorem odpowiadającym określonemu j, a nie np. z mieszaniną operatorów o różnych j.

Łatwo się przekonać, że operator będący iloczynem dwóch nieprzywiedlnych operatorów tensorowych $\hat{A}^{j_1}_{m_1}$ i $\hat{B}^{j_2}_{m_2}$nie jest nieprzywiedlny (jest bowiem mieszaniną operatorów o $j = |j_1 - j_2| \ldots j_1 + j_2$). Niemniej jednak można utworzyć pewne kombinacje liniowe

$\hat{A}^{m_1}_{j_1}$ i $\hat{B}^{m_2}_{j_2}$, których reguły komutacji będą takie, jak dla operatora nieredukowalnego. Pokażemy, że kombinacja liniowa wzorowana na szeregu Clebscha Gordana dla stanów $|j,m\rangle$ jest nieprzywiedlnym operatorem tensorowym o zadanym j:

$$\hat{C}^m_j = \sum_{m_1+m_2=m} \hat{A}^{m_1}_{j_1}\hat{B}^{m_2}_{j_2} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right). \tag{22.17}$$

Aby wyliczyć komutatory $\hat{J}$ i $\hat{C}^j_m$dkorzystamy ze wzoru

$$\left[\hat{J},\hat{A}\hat{B}\right] = \left[\hat{J},\hat{A}\right]\hat{B} + \hat{A}\left[\hat{J},\hat{B}\right].$$

Dla $\hat{J}_z$ mamy

$$\begin{aligned}
\left[\hat{J}_z,\hat{C}^m_j\right] &= \sum_{m_1+m_2=m} \left[\hat{J}_z,\hat{A}^{m_1}_{j_1}\hat{B}^{m_2}_{j_2}\right] \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \\
&= \sum_{m_1+m_2=m} \hbar\,(m_1+m_2)\,\hat{A}^{m_1}_{j_1}\hat{B}^{m_2}_{j_2} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \\
&= \hbar m \sum_{m_1+m_2=m} \hat{A}^{m_1}_{j_1}\hat{B}^{m_2}_{j_2} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right). \qquad (22.18)
\end{aligned}$$

Dla $\hat{J}_\pm$ otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\left[\hat{J}_\pm,\hat{C}^m_j\right] &= \sum_{m_1+m_2=m} \left[\hat{J}_+,\hat{A}^{m_1}_{j_1}\hat{B}^{m_2}_{j_2}\right] \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \\
&= \hbar \sum_{m_1+m_2=m} \Big(\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\pm 1)}\hat{A}^{m_1\pm 1}_{j_1}\hat{B}^{m_2}_{j_2} \\
&\quad + \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2\pm 1)}\hat{A}^{m_1}_{j_1}\hat{B}^{m_2\pm 1}_{j_2} \Big) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right). (22.19)
\end{aligned}$$

Zmieniając wskaźniki sumowania otrzymujemy dalej

$$\begin{aligned}
\ldots &= \hbar \sum_{m_1,m_2} \Bigg(\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\mp 1)} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1\mp 1 & m_2 & m \end{array} \right) \\
&\quad + \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2\mp 1)} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2\mp 1 & m \end{array} \right) \Bigg) \hat{A}^{m_1}_{j_1}\hat{B}^{m_2}_{j_2}. (22.20)
\end{aligned}$$

Teraz możemy zastosować wyprowadzony uprzednio związek rekurencyjny dla współczynników Clebscha Gordana:

$$\ldots = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)} \sum_{m_1,m_2} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m+1 \end{array} \right) \hat{A}^{m_1}_{j_1}\hat{B}^{m_2}_{j_2} = \hat{C}^{m\pm 1}_j. \tag{22.21}$$

Udowodniliśmy zatem, że zdefiniowana wzorem (22.17) kombinacja liniowa nieredukowalnych operatorów tensorowych jest nieredukowalnym operatorem tensorowym.

22.3 Działanie nieredukowalnych operatorów tensorowych na stany $|j,m\rangle$

Pokażemy teraz, że stan utworzony jako kombinacja liniowa analogiczna do (22.17) jest stanem $|j,m\rangle$:

$$|j,m\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{m_1+m_2=m} \hat{O}^{m_1}_{j_1} |j_2,m_2\rangle \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right). \tag{22.22}$$

Aby to wykazać musimy sprawdzić czy działanie operatorów $\hat{J}_\pm$ i $\hat{J}_z$ na stan $|j,m\rangle$ daje standardowe wzory i czy stan $|j,m\rangle$ jest unormowany. Na ogół stała normalizacyjna $\mathcal{N}$ w równaniu (22.22) nie jest równa 1, ale, jak zaraz się przekonamy nie zależy od m.

Zauważmy, że

$$\hat{J}\hat{O} = \left[\hat{J},\hat{O}\right] + \hat{O}\hat{J}. \tag{22.23}$$

Korzystając z tego wzoru możemy łatwo wyliczyć działanie $\hat{J}_i$ na stan (22.22):

$$\hat{J}_i\,|j,m\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{m_1+m_2=m} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \left\{ \left[\hat{J}_i, \hat{O}^{m_1}_{j_1}\right] |j_2,m_2\rangle + \hat{O}^{m_1}_{j_1}\hat{J}_i\,|j_2,m_2\rangle \right\}. \tag{22.24}$$

Dla $\hat{J}_3$ otrzymujemy od razu, że $\hat{J}_i\,|j,m\rangle = \hbar(m_1+m_2)\,|j,m\rangle = \hbar m\,|j,m\rangle$. Dla $\hat{J}_\pm$ rozumowanie analogiczne do przedstawionego w poprzednim paragrafie doprowadzi nas do wniosku, że stan zdefiniowany wzorem (22.22) jest proporcjonalny do $|j,m\rangle$. O stałej normalizacyjnej możemy tylko powiedzieć, że nie zależy od m (inaczej działanie $\hat{J}_i$ na stan $1/\mathcal{N}\ |j,m\rangle$ nie redukowałoby się do standardowych wzorów), natomiast może zależeć od j, a także od j_1 i j_2. Na ogół stała $\mathcal{N}$ zależy od rodzaju operatora.

Udowodnimy teraz bardzo ważne twierdzenie, które pozwoli nam wyliczać elementy macierzowe nieredukowalnych operatorów tensorowych. Zauważmy, że korzystając z ortogonalności współczynników Clebscha Gordana

$$\sum_{j,m} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1' & m_2' & m \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) = \delta_{m_1' m_1}\delta_{m_2' m_2}$$

możemy relację (22.22) odwrócić, zamieniając $j \to j'$ i $m \to m'$, i mnożąc ją stronami przez współczynnik

$$\left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j' \\ m_1' & m_2' & m' \end{array} \right)$$

oraz sumując po j', m':

$$\begin{aligned} &\sum_{j',m'} |j',m'\rangle\ \mathcal{N}_O(j',j_1,j_2) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j' \\ m_1' & m_2' & m' \end{array} \right) \\ &= \sum_{m_1+m_2=m'} \sum_{j',m'} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j' \\ m_1' & m_2' & m' \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j' \\ m_1 & m_2 & m' \end{array} \right) \hat{O}^{m_1}_{j_1} |j_2,m_2\rangle . \end{aligned} \tag{22.25}$$

Ostatecznie:

$$\hat{O}^{m_1}_{j_1}|j_2,m_2\rangle = \sum_{j',m'} |j',m'\rangle\, \mathcal{N}_O(j',j_1,j_2) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j' \\ m_1 & m_2 & m' \end{array} \right), \tag{22.26}$$

gdzie sumowanie przebiega po $j' = |j_1 - j_2|, \ldots, j_1 + j_2$, $m' = m_1 + m_2$, a stała normalizacyjna zależy od j, j_1i j_2, a także od operatora $\hat{O}$. Mnożąc równanie (22.26) z lewej strony przez $\langle j,m|$ otrzymujemy

$$\langle j,m|\,\hat{O}^{j_1}_{m_1}|j_2,m_2\rangle = \mathcal{N}_O(j,j_1,j_2) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right). \tag{22.27}$$

Wzór (22.27) zapisany w nieco innej postaci

$$\langle j,m|\,\hat{O}^{m_1}_{j_1}|j_2,m_2\rangle = \frac{(-)^{j_1-j_2+j}}{\sqrt{2j+1}} \langle j|\,|\hat{O}_{j_1}|\,|j_2\rangle \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \tag{22.28}$$

nosi nazwę *twierdzenia Wignera-Eckarta.* Ze stałej $\mathcal{N}_O(j,j_1,j_2)$ został wyciągnięty czynnik $(-)^{j_1-j_2+j}/\sqrt{2j+1}$. Nie zależącą od trzecich składowych stałą $\langle j|\,|\hat{O}_{j_1}|\,|j_2\rangle$ nazywamy *zredukowanym elementem macierzowym* operatora $\hat{O}_{j_1}$.

Trudno przecenić wagę twierdzenia Wignera–Eckarta we współczesnej fizyce. Po pierwsze upraszcza ono wyliczanie elementów macierzowych danych operatorów tensorowych, sprowadzając problem do wyliczenia jednej stałej – zredukowanego elementu macierzowego. Pokażemy to w następnym paragrafie dla operatora wektora wodzącego. Po drugie, twierdzenie to pozwoli rozstrzygnąć, które elementy danego opertora są równe zeru. Ma to szczególne zastosowanie przy badaniu przejść w atomach pod wpływem zaburzeń opisanych przy pomocy nieredukowalnych operatorów tensorowych. Po trzecie, pozwala ono powiązać między sobą różne elementy macierzowe bez wyliczynia zredukowanego elementu macierzowego. Najlepszym przykładem jest tu tzw. formuła masowa Gell-Manna–Okubo dla grupy[1] SU(3), która pozwoliła wyliczyć różnice mas hadronów przy pomocy kilku stałych. Np. różnice mas tzw. oktetu barionów (a więc 8 cząstek) wyrażają się przez dwie stałe, a dekupletu (10 cząstek) przez jedną stałą.

22.4 Zredukowane elementy macierzowy dla wektora wodzącego

Pokazaliśmy już, że wektor wodzący $\vec{n}$ jest nieredukowalnym operatorem tensorowym o $j = 1$. Zatem jego działanie na stan $|l,m\rangle$ (l całkowite) może dać w wyniku stan o $l' = l-1, l, l+1$. W ogólności zatem będziemy musieli znaleźć 3 zredukowane elementy

[1]Oczywiście tw. Wignera–Eckarta jest prawdziwe także dla innych grup, nie tylko dla grupy obrotów.

macierzowe. Najprościej wyliczyć je dla operatora n_z, który odpowiada $m=0$:

$$
\begin{aligned}
\langle l,m|\, n_z\, |l,m\rangle &= \frac{m}{\sqrt{l(l+1}}\mathcal{N}_n(l,l), \\
\langle l+1,m|\, n_z\, |l,m\rangle &= \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(l+1)}}\mathcal{N}_n(l+1,l), \\
\langle l-1,m|\, n_z\, |l,m\rangle &= -\sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)l}}\mathcal{N}_n(l-1,l).
\end{aligned} \tag{22.29}
$$

We wzorze (22.29) wypisaliśmy jawnie współczynniki Clebscha-Gordana (Abramowitz, Stegun tabela 27.9.2). Aby znaleźć stałe $\mathcal{N}_n(l',l)$ musimy jawnie wyliczyć trzy elementy macierzowe (22.29) korzystając ze wzoru

$$
\langle l',m|\, n_z\, |l,m\rangle = \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y_{l'}^{m*}(\theta,\varphi)\cos\theta\, Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{22.30}
$$

dla jednego, wybranego m. Na ogół są to dość żmudne obliczenia i nie będziemy ich tu wykonywać. Jednak dość prosto możemy znaleźć $\mathcal{N}_n(l,l)$. W tym celu musimy wziąć $m \neq 0$, gdyż dla $m=0$ element macierzowy (22.30) znika na mocy wzoru (22.29). Zauważmy, że

$$
\langle l,m|\, n_z\, |l,m\rangle \sim \int_{-1}^{1} dx\, x\, [P_l^m(x)]^2 . \tag{22.31}
$$

Ponieważ kwadrat wielomianu Legendre'a jest funkcją parzystą, więc całka, która zawiera x musi znikać. A zatem wszystkie elementy macierzowe $\langle l,m|\, n_z\, |l,m\rangle = 0$.

Aby wyliczyć stałe $\mathcal{N}_n(l \pm 1,l)$ musimy wykonać wielokrotnie całki przez części. Podamy tu tylko wynik:

$$
\mathcal{N}_n(l,l) = 0, \quad \mathcal{N}_n(l+1,l) = \sqrt{\frac{l+1}{2l+3}}, \quad \mathcal{N}_n(l-1,l) = -\sqrt{\frac{l}{2l-1}}. \tag{22.32}
$$

Warto zauważyć, że ze względu na rzeczywistość elementów macierzowych zachodzi

$$
\langle l+1,m|\, n_z\, |l,m\rangle = \langle l,m|\, n_z\, |l+1,m\rangle \tag{22.33}
$$

co tłumaczy się na stałe $\mathcal{N}_n$:

$$
\mathcal{N}_n(l,l+1) = -\sqrt{\frac{2l+3}{2l+1}}\mathcal{N}_n(l+1,l) \to \mathcal{N}_n(l-1,l) = -\sqrt{\frac{2l+1}{2l-1}}\mathcal{N}_n(l,l-1). \tag{22.34}
$$

Podstawiając do wzoru (22.34) $\mathcal{N}_n(l,l-1) = \sqrt{l/(2l+1)}$ otrzymujemy

$$
\mathcal{N}_n(l-1,l) = -\sqrt{\frac{l}{2l-1}}
$$

zgodnie ze wzorem (22.32). Zatem, aby znaleźć wszystkie elementy macierzowe wektora $\vec{n}$ musieliśmy faktycznie policzyć jawnie tylko jeden element macierzowy.

Na koniec podajmy wzór, który będzie nam potrzebny w dalszej części wykładu

$$\langle 1,0|\, n_z\, |0,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}. \tag{22.35}$$

23 Dodatek: obliczenie $\mathcal{N}_n(l+1,l)$

Rozważmy

$$\langle l+1,0|\, n_z\, |l,0\rangle = \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}\mathcal{N}_n(l+1,l), \tag{23.36}$$

gdzie

$$\langle l+1,0|\, n_z\, |l,0\rangle = \frac{\sqrt{(2l+1)(2l+3)}}{4\pi}\int\limits_0^{2\pi} d\varphi \int\limits_{-1}^{1} dx\, P_{l+1}(x)\, x\, dx\, P_l(x). \tag{23.37}$$

Skorzystaliśmy z faktu, że

$$Y_l^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta). \tag{23.38}$$

Skorzystamy teraz ze wzoru

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l. \tag{23.39}$$

Wykonyjąc całkę po $d\varphi$ otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle l+1,0|\, n_z\, |l,0\rangle &= \frac{\sqrt{(2l+1)(2l+3)}}{2^{\,2(l+1)}l!(l+1)!}\mathcal{I}, \\ \mathcal{I} &= \int\limits_{-1}^{1} dx\, \left[\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}(x^2-1)^{l+1}\right]\, x\, \left[\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l\right]. \end{aligned} \tag{23.40}$$

Całkę $\mathcal{I}$ wykonujemy całkując l razy przez części, absorbując znak $(-)^l$ do czynnika $(x^2-1)^l$:

$$\mathcal{I} = \int\limits_{-1}^{1} dx\, (1-x^2)^l \frac{d^l}{dx^l}\left[\left[\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}(x^2-1)^{l+1}\right]\, x\right]. \tag{23.41}$$

Zauważmy, że różniczkowanie d^{2l+1}/dx^{2l+1} przeżywają tylko dwa pierwsze człony rozwinięcia (pomnożone przez x):

$$(x^2-1)^{l+1} = x^{2(l+1)} - (l+1)x^{2l} + \ldots \tag{23.42}$$

Rozpatrzmy pierwszy człon w (23.42):

$$\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}x^{2(l+1)} = (2l+2)(2l+1)\dots(l+2)\,x^{l+1}. \tag{23.43}$$

Teraz mnożymy (23.43) przez x i różniczkujemy po d^l/dx^l:

$$\begin{aligned} \frac{d^l}{dx^l}\left[\left[\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}x^{2(l+1)}\right]x\right] &= (2l+2)(2l+1)\dots(l+2)\frac{d^l}{dx^l}x^{l+2} \\ &= \frac{1}{2}(2l+2)!(l+2)x^2. \end{aligned} \tag{23.44}$$

Z kolei drugi człon (23.42) ma postać:

$$\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}x^{2l} = 2l(2l-1)\dots l\,x^{l-1} \tag{23.45}$$

i dalej

$$\frac{d^l}{dx^l}\left[\left[\frac{d^{l+1}}{dx^{l+1}}x^{2l}\right]x\right] = 2l(2l-1)\dots l\,\frac{d^l}{dx^l}x^l = (2l)!l. \tag{23.46}$$

Mamy zatem w sumie

$$\mathcal{I} = \frac{1}{2}(2l+2)!(l+2)\int\limits_{-1}^{1} dx(1-x^2)^l x^2 - (2l)!(l+1)l\int\limits_{-1}^{1} dx(1-x^2)^l. \tag{23.47}$$

Mamy zatem do wykonania dwie całki po dx, które zamienimy najpierw na całki od 0 do 1, a potem wykonamy podstawienia

$$x^2 = t,\ dx = \frac{dt}{2t^{1/2}}.$$

Całki te dają się wyrazić przez funkcje B Eulera:

$$\begin{aligned} \int\limits_{-1}^{1} dx(1-x^2)^l x^2 &= \int\limits_{0}^{1} dt\, t^{1/2}(1-t)^l = B(3/2, l+1) \\ &= \frac{\Gamma(3/2)\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+5/2)} = \frac{2^{2l+2}(l+1)!l!}{(2l+3)!} \end{aligned} \tag{23.48}$$

oraz

$$\begin{aligned} \int\limits_{-1}^{1} dx(1-x^2)^l &= \int\limits_{0}^{1} dt\, t^{-1/2}(1-t)^l = B(1/2, l+1) \\ &= \frac{\Gamma(1/2)\Gamma(l+1)}{\Gamma(l+3/2)} = \frac{2^{2l+1}l!\,l!}{(2l+1)!}. \end{aligned} \tag{23.49}$$

Skorzystaliśmy tu z własności

$$z\Gamma(z) = \Gamma(z+1).$$

Ostatecznie mamy

$$\begin{aligned}
\mathcal{I} &= \frac{1}{2}(2l+2)!(l+2)\frac{2^{2l+2}(l+1)!l!}{(2l+3)!} - (2l)!(l+1)l\frac{2^{2l+1}l!\,l!}{(2l+1)!} \\
&= 2^{2l+1}(l+1)!\,l!\left[\frac{l+2}{2l+3} - \frac{l}{2l+1}\right] = 2^{2l+1}(l+1)!\,l!\frac{l+1}{(2l+3)(2l+1)}. \qquad (23.50)
\end{aligned}$$

W rezultacie

$$\begin{aligned}
\langle l+1, 0|\, n_z\, |l, 0\rangle &= \frac{\sqrt{(2l+1)(2l+3)}}{2^{\,2(l+1)}l!(l+1)!}2^{2l+1}(l+1)!\,l!\frac{l+1}{(2l+3)(2l+1)} \\
&= \frac{l+1}{\sqrt{(2l+3)(2l+1)}}. \qquad (23.51)
\end{aligned}$$

Porównując (23.51) ze wzorem (23.36) otrzymujemy

$$\mathcal{N}_n(l+1, l) = \sqrt{\frac{l+1}{2l+3}}.$$