18.4.2 Kąty Eulera

W poprzednim rozdziale dowolny obrót *układu fizycznego* przedstawiliśmy jako złożenie trzech kolejnych obrotów względem osi $\hat{z}$, $\hat{x}$ i $\hat{y}$. Obecnie zastanowimy się jak zmieniają się funkcje własne operatora momentu pędu przy obrocie *układu współrzędnych.* Jest jasne, że obrót *układu fizycznego* o kąt φ względem pewnej osi $\hat{n}$ jest równoważny obrotowi *układu współrzędnych* ale o kąt $-\varphi$.

Okazuje się, że warto także wprowadzić inną parametryzację obrotu. Dotychczas obracaliśmy *układ fizyczny* względem ustalonego układu odniesienia. Teraz jednak chcemy obracać *układ współrzędnych*, dlatego wygodnie dowolny obrót, niekoniecznie infinitenzymalny, przedstawić jako złożenie trzech obrotów względem osi związanych z *obracanym układem odniesienia*:

1. Najpierw dokonujemy obrotu o kąt α $(0 \leqslant \alpha \leqslant 2\pi)$ względem osi z. Po tym przekształceniu osie x i y przechodzą w nowe osie x_1 i y_1 a oś $z = z_1$ pozostaje nie zmieniona.

2. Z kolei wykonujemy obrót względem *nowej* osi y_1. Kąt obrotu oznaczamy β, gdzie $0 \leqslant \beta \leqslant \pi$. Osie x_1 i $z = z_1$ przechodzą odpowiednio w osie x_2 i z_2, natomiast oś $y_1 = y_2$ pozostaje nie zmieniona.

3. I wreszcie wykonujemy trzeci obrót względem *nowej* osi z_2 o kąt γ $(0 \leqslant \gamma \leqslant 2\pi)$. Osie x_2 i y_2 przechodzą odpowiednio w osie x' i z', natomiast oś $z_2 = z'$ pozostaje nie zmieniona.

W ten sposób początkowy układ (x, y, z) przechodzi w nowy układ (x', y', z'), a transformację obrotu zapisujemy jako

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\gamma) R_y(\beta) R_z(\alpha). \tag{18.47}$$

18.5 Funkcje Wignera

Powstaje pytanie, jak przekształca się funkcja falowa pod wpływem takiego obrotu? Nasze rozumowanie z poprzedniego rozdziału można tu powtórzyć z jedną tylko zmianą: mianowicie kąty obrotu mają przeciwne znaki. A zatem

$$\hat{U}_{R_z}(\alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha \hat{J}_z},\ \hat{U}_{R_y}(\beta) = e^{\frac{i}{\hbar}\beta \hat{J}_y},\ \hat{U}_{R_z}(\gamma) = e^{\frac{i}{\hbar}\gamma \hat{J}_z} \tag{18.48}$$

i

$$\hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{U}_{R_z}(\gamma) \hat{U}_{R_y}(\beta) \hat{U}_{R_z}(\alpha). \tag{18.49}$$

Ponieważ operatory $\hat{U}_{R_i}$ komutują z $\hat{J}^2$

$$\hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) \left| j, m \right\rangle = \sum_{m'} \left| j, m' \right\rangle \left\langle j, m' \right| \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) \left| j, m \right\rangle, \tag{18.50}$$

a zatem w wyniku działania $\hat{U}$ na stan $|j,m\rangle$ otrzymujemy kombinację liniową stanów o tym samym j ale różnych m'. Współczynniki liczbowe takiej kombinacji liniowej oznaczamy jako

$$D^j_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle j,m'|\,\hat{U}_R(\alpha,\beta,\gamma)\,|j,m\rangle\,. \tag{18.51}$$

Noszą one nazwę *funkcji Wignera*, albo *funkcji D*, lub też *uogólnionych funkcji kulistych.* Warto zwrócić uwagę na konwencję polegającą na odwróceniu kolejności indeksów m i m' (np. za podręcznikiem Dawydowa).

Przypomnijmy sobie warunek niezmienniczości:

$$\hat{U}_R(\alpha,\beta,\gamma)\,\psi_a(R\boldsymbol{r}) = \psi_a(\boldsymbol{r}), \tag{18.52}$$

gdzie $\boldsymbol{r} = (r,\theta,\varphi)$, $R\boldsymbol{r} = (r,\theta',\varphi')$. Przyjmując $a = j,m$ równanie (21.52) możemy przepisać jako

$$\hat{U}_R(\alpha,\beta,\gamma)\ \langle\theta',\varphi'\,|j,m\rangle = \langle\theta,\varphi\,|j,m\rangle\,, \tag{18.53}$$

gdzie

$$\langle\theta,\varphi\,|j,m\rangle = Y^j_m(\theta,\varphi) \tag{18.54}$$

to znane nam już funkcje kuliste. Łącząc równanie (21.53) ze wzorem (21.50) otrzymujemy ważny wzór

$$\langle\theta,\varphi\,|j,m\rangle = \sum_k D^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\,\langle\theta',\varphi'\,|j,k\rangle\,, \tag{18.55}$$

gdzie

$$R(\alpha,\beta,\gamma) : (r,\theta,\varphi) \to (r,\theta',\varphi'). \tag{18.56}$$

Z postaci operatora U_R wynika, że jest on operatorem unitarnym; zatem macierze D są macierzami unitarnymi

$$\sum_m D^{*j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)D^j_{ml}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_m D^{*j}_{km}(\alpha,\beta,\gamma)D^j_{lm}(\alpha,\beta,\gamma) = \delta_{kl}. \tag{18.57}$$

Stąd łatwo znalęć przekształcenie odwrotne do (21.55):

$$\langle\theta',\varphi'\,|j,k\rangle = \sum_m \langle\theta,\varphi\,|j,m\rangle\,D^{*j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{18.58}$$

Wzory (21.55) i (21.58) można w jawny sposób zidentyfikować z mnożeniem macierzowym, jeżeli funkcje kuliste Y^j_m dla zadanego j zinterpretować jako wektory o wskaźniku m przebiegającym $2j+1$ wartości:

$$Y^j_m(\theta,\varphi) = D^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\,Y^j_k(\theta',\varphi'), \qquad Y^j_k(\theta',\varphi') = D^{\dagger j}_{km}(\alpha,\beta,\gamma)Y^j_m(\theta,\varphi). \tag{18.59}$$

Spróbujmy teraz znaleźć jawną postać funkcji D. Ponieważ stany $|j,m\rangle$ są stanami własnymi $\hat{J}_z$ jest oczywiste, że

$$D^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{im\alpha}\,\langle j,k|\,e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y}\,|j,m\rangle\,e^{ik\gamma} = e^{im\alpha}d^j_{mk}(\beta)e^{ik\gamma}. \tag{18.60}$$

Ze wzoru (21.60) widać jak parametryzacja Eulera upraszcza wyliczenie jawnej postaci macierzy obrotu. Bowiem macierzowy charakter funkcji D pochodzi jedynie od obrotu wokół osi $\hat{y}$. Aby wyliczyć macierze d musimy się posłużyć jawną reprezentacją operatora $\hat{J}_y$. Np. dla $j = 1/2$ $\hat{J}_y = \hbar/2\,\sigma_y$. Ponieważ

$$\sigma_y^{2n+1} = \sigma_y, \quad \sigma_y^{2n} = 1 \tag{18.61}$$

otrzymujemy $e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y}$

$$\begin{aligned} d(\beta) &= \left(e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y}\right)^T = \sum_{n=0} \frac{(-1)^n}{(2n)!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n} + i\,\sigma_y^T \sum_{n=0} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n+1} \sigma_y \\ &= \cos\frac{\beta}{2} + i\,\sigma_y^T \sin\frac{\beta}{2} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \cos\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{18.62}$$

Ponieważ macierz (21.62) posiada własność

$$\begin{bmatrix} \cos\frac{\beta+2\pi}{2} & -\sin\frac{\beta+2\pi}{2} \\ \cos\frac{\beta+2\pi}{2} & \cos\frac{\beta+2\pi}{2} \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \cos\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix} \tag{18.63}$$

funkcja $d^{1/2}$ określona jest z dokładnością do znaku

$$d^{1/2}(\beta) = \pm \begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \cos\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}. \tag{18.64}$$

Podobnie możemy znaleźć jawną postać macierzy D dla wyższych j. Nie jest to jednak konieczne, gdyż dla wielu zastosowań wystarczą nam ogólne własności macierzy D. Po pierwsze oznaczmy zbiór kątów $(\alpha, \beta, \gamma) = \vartheta$. Wówczas

$$D^j_{mk}(\vartheta_2) D^j_{kl}(\vartheta_1) = D^j_{ml}(\vartheta_2\vartheta_1) \tag{18.65}$$

gdzie $\vartheta_2\vartheta_1$oznacza obrót o kąty wynikające ze złożenia dwóch obrotów wyjściowych. Inna ważna własność dotyczy mnożenia macierzy D odpowiadających temu samemu obrotowi ϑ ale o różnych j-tach:

$$D^{j_1}_{m_1 k_1}(\vartheta) D^{j_2}_{m_2 k_2}(\vartheta) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^j_{mk}(\vartheta) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \end{array} \right). \tag{18.66}$$

Zauważmy najpierw, że w prosy sposób możemy złożyć obroty w prezstrzeniach dwóch różnych wartośniach $j_{1,2}$:

$$\begin{aligned} U^{(j_1)}(\vartheta) U^{(j_2)}(\vartheta) &= e^{\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_z^{(1)}} e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y^{(1)}} e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z^{(1)}} e^{\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_z^{(2)}} e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y^{(2)}} e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z^{(2)}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\gamma(\hat{J}_z^{(1)}+\hat{J}_z^{(2)})} e^{\frac{i}{\hbar}\beta(\hat{J}_y^{(1)}+\hat{J}_y^{(2)})} e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\hat{J}_z^{(1)}+\hat{J}_z^{(2)})} \\ &= U^{(j)}(\vartheta). \end{aligned} \tag{18.67}$$

Stąd

$$\begin{aligned} D^{j_1}_{m_1 k_1}(\vartheta) D^{j_2}_{m_2 k_2}(\vartheta) &= \langle j_1, k_1 | U^{(j_1)}(\vartheta) | j_1, m_1 \rangle \langle j_2, k_2 | U^{(j_2)}(\vartheta) | j_2, m_2 \rangle \\ &= \sum_{j,j'} \langle j', k | \hat{U}^{(j)}(\vartheta) | j, m \rangle \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j' \\ k_1 & k_2 & k \end{array} \right). \end{aligned} \tag{18.68}$$

Ponieważ

$$\langle j', k | \hat{U}(\vartheta) | j, m \rangle = \delta_{jj'} D^j_{mk}(\vartheta) \tag{18.69}$$

i stąd wzór (21.66). Korzystając z ortogonalności współczynników Clebscha-Gordana można wyprowadzić wzór odwrotny do (21.66):

$$D^j_{mk}(\vartheta) = \sum_{m_1,k_1} D^{j_1}_{m_1 k_1}(\vartheta) D^{j_2}_{m_2 k_2}(\vartheta) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \end{array} \right), \tag{18.70}$$

gdzie $k_2 = k - k_1$ i $m_2 = m - m_1$. Wzór ten pozwala wyliczyć funkcje Wignera o wyższym j ze znanych funkcji o niższym j_1 i j_2.

Istnieją związki między funkcjami D o pewnych szczególnie dobranych indeksach a funkcjami kulistymi. Przytoczymy tu bez dowodu jeden z nich, który będzie nam potrzebny w dalszych rozważaniach:

$$D^l_{00}(0, \beta, 0) = d^l_{00}(\beta) = P_l(\cos\beta), \tag{18.71}$$

gdzie P_l jest wielomianem Legendre'a stopnia l ($l = 0, 1, 2, \ldots$). Przydatna nam będzie jeszcze jedna własność:

$$D^j_{mk}(\alpha, \beta, \gamma) = (-)^{k-m} D^{*j}_{-m\,-k}(\alpha, \beta, \gamma). \tag{18.72}$$

Warto skonstruować miarę całkową względem której $D^j_{mk}(\alpha, \beta, \gamma)$ są ortogonalne. Okazuje się, że taką miarą jest

$$\int d\vartheta = \int_0^\pi \sin\beta \, d\beta \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\gamma. \tag{18.73}$$

Zauważmy, że

$$\begin{aligned} \int d\vartheta D^j_{mk}(\vartheta) &= \int_0^\pi d^j_{mk}(\beta) \sin\beta \, d\beta \int_0^{2\pi} e^{im\alpha} d\alpha \int_0^{2\pi} e^{ik\gamma} d\gamma \\ &= 4\pi^2 \delta_{m0} \delta_{k0} \int_{-1}^{1} d^j_{00}(\beta) \, d\cos\beta \\ &= 4\pi^2 \delta_{m0} \delta_{k0} \int_{-1}^{1} P_j(x) P_0(x) \, dx \\ &= 8\pi^2 \delta_{m0} \delta_{k0} \delta_{j0.} \end{aligned} \tag{18.74}$$

Skorzystaliśmy tu najpierw z faktu, że jeśli $m = k = 0$, to j musi być całkowite, następnie ze wzoru (21.71) i wreszcie z faktu, że $P_0(x) = 1$ pamiętając, że całka z P_j^2 wynosi $2/(2j+1)$. Teraz jesteśmy gotowi przeprowadzić dowód ortonalności funkcji D:

$$\begin{aligned}
\int d\vartheta\, D^{*j_1}_{m_1 k_1}(\vartheta) D^{j_2}_{m_2 k_2}(\vartheta) &= (-)^{m_1-k_1} \int d\vartheta\, D^{j_1}_{-m_1 -k_1}(\vartheta) D^{j_2}_{m_2 k_2}(\vartheta) \\
&= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ -m_1 & m_2 & m \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & j \\ -k_1 & k_2 & k \end{array} \right) \\
&\qquad (-)^{m_1-k_1} \int d\vartheta\, D^{j}_{mk}(\vartheta) \\
&= 8\pi^2 \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & 0 \\ -m_1 & m_2 & 0 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & 0 \\ -k_1 & k_2 & 0 \end{array} \right). \qquad (18.75)
\end{aligned}$$

Ze wzoru (21.75) wynika, że $m_1 = m_2$ i $k_1 = k_2$, gdyż inaczej współczyniki Clebscha-Gordana się zerują. Z kolei, aby wyliczyć wysętpujące we wzorze (21.75) współczynniki Clebscha-Gordana warto skorzystać z tożsamości

$$\left(\begin{array}{cc|c} j_1 & j_2 & 0 \\ -m & m & 0 \end{array} \right) = \frac{(-)^{j_1-m}}{\sqrt{2j_1+1}} \delta_{j_1 j_2}, \qquad (18.76)$$

stąd

$$\int d\vartheta\, D^{*j_1}_{m_1 k_1}(\vartheta) D^{j_2}_{m_2 k_2}(\vartheta) = \frac{8\pi^2}{2j_1+1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{k_1 k_2}. \qquad (18.77)$$