

Rozdział 18

Dodawanie momentów pędu

18.1 Całkowity moment pędu

18.1.1 Przypomnienie z mechaniki klasycznej

W mechanice klasycznej, gdy rozpatrujemy układ cząstek oddziałujących (przy czym zakładamy, że oddziaływanie spełnia III-cią zasadę dynamiki) pokazuje się, że momenty pędu poszczególnych cząstek mogą ulegać zmianom, jednak całkowity moment pędu takiego układu

$$\vec{\mathcal{L}} = \sum_{i=1}^N \vec{\mathcal{L}}_i = \text{const.}, \quad (18.1)$$

jest wielkością zachowaną. Podobna sytuacja ma miejsce w mechanice kwantowej.

18.1.2 Przykład kwantowo-mechaniczny

Rozważmy dwie cząstki (numerowane przez indeksy 1 i 2) poruszające się w polu centralnym (wspólnym dla obu cząstek). Załóżmy, że cząstki te nie oddziałują ze sobą, zatem każda oddzielnie ma hamiltonian

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 + V(r_1), \quad (18.2a)$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V(r_2), \quad (18.2b)$$

gdzie ∇_j^2 to laplasjan względem współrzędnych j -otej cząstki. Składowe momentu pędu każdej z cząstek spełniają kanoniczne relacje komutacyjne

$$[L_i^{(j)}, H_k] = 0, \quad i = 1, 2, 3; \quad j, k = 1, 2. \quad (18.3)$$

Przypadek $j = k$ dyskutowaliśmy już uprzednio (cząstka w polu centralnym), zaś dla $j \neq k$ relacja ta jest odzwierciedleniem faktu, że różne cząstki mają różne współrzędne. Oczywiście więc moment pędu każdej z cząstek komutuje z sumą hamiltonianów. Wnioskujemy stąd, że sumaryczny moment pędu komutuje z hamiltonianami (ich sumą), a więc jest stałą ruchu (tak jak w mechanice klasycznej).

Jeżeli jednak cząstki oddziałują ze sobą, to sytuacja nie jest już tak prosta. Załóżmy, że energia potencjalna oddziaływania cząstek zależy jedynie od odległości między nimi: $\phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \phi(r_{12})$, a więc hamiltonian układu ma postać

$$H = H_1 + H_2 + \phi(r_{12}). \quad (18.4)$$

Zbadamy teraz moment pędu jednej z cząstek, np. wybierzemy składową $L_z^{(1)}$. Obliczamy komutator z hamiltonianem całkowitym. Otrzymujemy

$$[L_z^{(1)}, H] = [L_z^{(1)}, H_1] + [L_z^{(1)}, H_2] + [L_z^{(1)}, \phi(r_{12})]. \quad (18.5)$$

W myśl poprzednich uwag, dwa pierwsze komutatory znikają. Pozostaje ostatni komutator, który zapisujemy w reprezentacji położeniowej

$$[L_z^{(1)}, H] = -i\hbar \left[\left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \right), \phi(r_{12}) \right]. \quad (18.6)$$

Obliczając komutator, pamiętamy, że jest to operator działający na pewną (dowolną) funkcję falową ψ , a zatem wykonując różniczkowania dostajemy

$$\begin{aligned} [L_z^{(1)}, H]\psi &= -i\hbar \left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \phi \psi + i\hbar \phi \left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \psi \\ &= -i\hbar \left(x_1 \psi \frac{\partial \phi}{\partial y_1} - y_1 \psi \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right). \end{aligned} \quad (18.7)$$

Na mocy dowolności funkcji falowej ψ , mamy więc

$$[L_z^{(1)}, H] = -i\hbar \left(x_1 \frac{\partial \phi}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right). \quad (18.8)$$

Pozostaje znaleźć pochodne energii potencjalnej ϕ

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_1} = \frac{\partial \phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial x_1} = \frac{\partial \phi(r_{12})}{\partial r_{12}} \cdot \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial x_1} = \frac{d\phi(r_{12})}{dr_{12}} \cdot \frac{(x_1 - x_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (18.9)$$

W zupełnie analogiczny sposób znajdziemy

$$\frac{\partial \phi}{\partial y_1} = \frac{d\phi(r_{12})}{dr_{12}} \cdot \frac{(y_1 - y_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (18.10)$$

Wykorzystując obie obliczone pochodne w komutatorze (18.8) dostajemy

$$\begin{aligned} [L_z^{(1)}, H] &= -i\hbar \frac{d\phi(r_{12})}{dr_{12}} \left(\frac{x_1(y_1 - y_2) - y_1(x_1 - x_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \\ &= -i\hbar \frac{d\phi(r_{12})}{dr_{12}} \left(\frac{y_1 x_2 - x_1 y_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right), \end{aligned} \quad (18.11)$$

co na ogół jest różne od zera. W każdym bądź razie nie widać żadnych przyczyn, dla których moglibyśmy oczekiwać, że komutator ten znika. Wnioskujemy więc, że w układzie dwóch cząstek oddziałujących moment pędu jednej z nich nie jest zachowany (rozumowanie powyższe możemy powtórzyć dla pozostałych składowych). Możemy także przeprowadzić te same obliczenia, ale dla drugiej cząstki. Wówczas, przez prostą zamianę indeksów otrzymamy

$$[L_z^{(2)}, H] = -i\hbar \frac{d\phi(r_{12})}{dr_{12}} \left(\frac{y_2 x_1 - x_2 y_1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right), \quad (18.12)$$

skąd wynika, że moment pędu drugiej cząstki też nie jest zachowany.

Dodajmy jednak oba uzyskane komutatory stronami

$$[L_z^{(1)} + L_z^{(2)}, H] = 0. \quad (18.13)$$

(analogiczne relacje mamy także dla dwóch pozostałych składowych). Wobec tego, bez trudu wykażemy, że

$$[\vec{L}_T^2, H] = 0, \quad (18.14)$$

gdzie $\vec{L}_T = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$. Oczywiście wnioskujemy, że całkowity (sumaryczny) moment pędu układu jest wielkością stałą – jest zachowany (tak samo jak w mechanice klasycznej). Wniosek ten nie jest nieoczekiwany, jeśli uświadomimy sobie, że nawiasy Poissona z mechaniki klasycznej przenoszą się na komutatory w mechanice kwantowej.

18.1.3 Oddziaływanie spin-orbita – dyskusja wstępna

Opisując uprzednio atom wodoropodobny nie uwzględnialiśmy spinu elektronu. Hamiltonian atomu (przy wszystkich niezbędnych założeniach, omawianych w poprzednich rozdziałach), był postaci

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r), \quad (18.15)$$

gdzie $V(r)$ – potencjał coulombowski. W rozwiązaniu zagadnienia własnego korzystaliśmy z faktu, że

$$[L_k, H] = 0, \quad [\vec{L}^2, H] = 0, \quad (18.16)$$

skąd oczywiście wynika, że orbitalny moment pędu jest stałą ruchu. Ponadto, operator momentu pędu ma własności komutacyjne

$$[L_k, \vec{L}^2] = 0. \quad (18.17)$$

Ze względu na wypisane reguły komutacyjne, operatory H_0 , \vec{L}^2 oraz L_3 tworzyły ZZOK, dla którego szukaliśmy funkcji i wartości własnych.

Jeżeli jednak uwzględnimy spin elektronu, to musimy ZZOK uzupełnić operatorami \vec{S}^2 i S_3 (ten pierwszy niewiele wnosi, bo spin elektronu $s = \frac{1}{2}$, czyli jest ustalony). Oczywiście operatory spinu wchodzi do ZZOK, komutują bowiem ze wszystkimi operatorami zależnymi od zmiennych orbitalnych. Spin jest więc także stałą ruchu.

W dalszej części wykładu pokażemy, że w bardziej realistycznym modelu atomu należy uwzględnić tak zwane oddziaływanie spin-orbita, które sprawia, że hamiltonian atomu trzeba uzupełnić za pomocą wyrażenia

$$H_{SO} = \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad (18.18)$$

gdzie $\xi(r)$ jest funkcją odległości elektronu od centrum siły coulombowskiej (w praktyce od jądra). Naturę fizyczną tego oddziaływania i postać funkcji $\xi(r)$ omówimy później. Zbadajmy teraz bardziej formalne konsekwencje pojawienia się dodatkowego członu w hamiltonianie. Mamy więc teraz hamiltonian postaci

$$H = H_0 + H_{SO}. \quad (18.19)$$

Rozważmy składową orbitalnego momentu pędu i jej komutator z nowym hamiltonianem

$$[L_k, H] = [L_k, H_0 + H_{SO}] = [L_k, H_{SO}], \quad (18.20)$$

bowiem komutator z H_0 znika. Idąc dalej, mamy

$$[L_k, H] = [L_k, \xi(r) L_p S_p] = \xi(r) S_p [L_k, L_p], \quad (18.21)$$

bo funkcja $\xi(r)$ nie zależy od kątów, a spin nie zależy od zmiennych orbitalnych. Na mocy kanonicznych relacji komutacyjnych otrzymujemy

$$[L_k, H] = \xi(r) S_p i\hbar \varepsilon_{kps} L_s = i\hbar \xi(r) \varepsilon_{kps} S_p L_s = i\hbar \xi(r) (\vec{S} \times \vec{L})_k. \quad (18.22)$$

Powtarzając bardzo podobne obliczenia, dla składowych spinu dostaniemy

$$\begin{aligned} [S_k, H] &= [S_k, H_{SO}] = \xi(r) L_p [S_k, S_p] \\ &= \xi(r) L_p i\hbar \varepsilon_{kps} S_s = i\hbar \xi(r) \varepsilon_{kps} L_p S_s = i\hbar \xi(r) (\vec{L} \times \vec{S})_k. \end{aligned} \quad (18.23)$$

Zwróćmy uwagę, że choć operatory L_p i S_q komutują, to jednak nie wolno (bez zmiany znaku) zamienić kolejności indeksów w tensorze ε_{ijk} (iloczyn wektorowy zmienia znak przy zamianie kolejności jego czynników). Oba powyższe komutatory nie znikają. A zatem w układzie (atomie), w którym występuje oddziaływanie spin-orbita, ani \vec{L} ani \vec{S} nie są stałymi ruchu, nie są zachowywane. Ponieważ operatory L_3 i S_3 nie komutują z hamiltonianem (18.19) więc przestają być dobrymi kandydatami do konstrukcji ZZOK.

Dodajmy jednak komutatory (18.22) i (18.23) stronami

$$[L_k + S_k, H] = i\hbar \xi(r) [(\vec{L} \times \vec{S})_k + (\vec{S} \times \vec{L})_k] = 0. \quad (18.24)$$

co wynika z komutacji \vec{L} i \vec{S} , oraz z antysymetrii iloczynu wektorowego. Oczywiście więc sumaryczny (całkowity) moment pędu cząstki o spinie \vec{S} i orbitalnym momencie pędu \vec{L} , zdefiniowany jako suma

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (18.25)$$

jest stałą ruchu, bowiem z (18.24) wynika oczywiście

$$[J_k, H] = 0. \quad (18.26)$$

Co więcej, w zupełnie analogiczny sposób obliczymy komutator

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, H] &= [J_k J_k, H] = J_k [J_k, H] + [J_k, H] J_k \\ &= J_k [L_k + S_k, H] + [L_k + S_k, H] J_k = 0. \end{aligned} \quad (18.27)$$

Z naszej dyskusji wynika, że L_3 i S_3 nie mogą wchodzić do ZZOK odpowiadającego hamiltonianowi $H = H_0 + H_{SO}$. Z drugiej strony, na mocy relacji komutacyjnych (18.25) i (18.27) widzimy, że kandydatami do nowego ZZOK będą operatory \vec{J}^2 i J_3 . Aby jednak omówić ZZOK właściwy dla atomu, w którym występuje oddziaływanie spin-orbita, musimy najpierw zbadać naturę i własności operatora $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

18.2 Dodawanie dwóch momentów pędu

18.2.1 Dyskusja i wprowadzenie

Z obu powyższych przykładów wynika konieczność kwantowo-mechanicznego dodawania dwóch momentów pędu i to niezależnie od ich natury orbitalnej czy spinowej. Operatory można dodawać (choć trzeba przy tym uważać, w jakich przestrzeniach one działają). Jak jednak wyglądają wartości i wektory własne operatora będącego sumą, jakie są dopuszczalne zakresy ich zmienności. Na pytania tego typu postaramy się teraz odpowiedzieć.

Rozważać będziemy sytuację ogólną i badać

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{J}}_1 + \vec{\mathbf{J}}_2, \quad (18.28)$$

gdzie $\vec{\mathbf{J}}_1$ i $\vec{\mathbf{J}}_2$ są operatorami momentu pędu (dowolnej natury fizycznej) posiadającymi wszelkie własności typowe dla momentu pędu. Składowe $j_k^{(1)}$ pierwszego moment pędu $\vec{\mathbf{J}}_1$ spełniają kanoniczne relacje komutacyjne

$$[j_k^{(1)}, j_p^{(1)}] = i\hbar \varepsilon_{kpq} j_q^{(1)}, \quad k, p, q = 1, 2, 3. \quad (18.29)$$

Operator ten ma ortonormalne stany własne $|j_1 m_1\rangle$, takie że

$$\vec{\mathbf{J}}_1^2 |j_1 m_1\rangle = \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1 m_1\rangle, \quad (18.30a)$$

$$j_3^{(1)} |j_1 m_1\rangle = \hbar m_1 |j_1 m_1\rangle. \quad (18.30b)$$

Liczba kwantowa $j_1 > 0$ (przypadek $j_1 = 0$ jest trywialny) przyjmuje wartości całkowite lub połówkowe. Liczba kwantowa m_1 przyjmuje wartości od $-j_1$ do $+j_1$, zmieniając się co 1. Dla ustalonej liczby kwantowej j_1

- mamy $(2j_1 + 1)$ stanów różniących się liczbami kwantowymi m_1 ;
- operator $\vec{\mathbf{J}}_1$ działa w podprzestrzeniach $\mathcal{E}(j_1)$ o wymiarze równym $(2j_1 + 1)$;
- operator $\vec{\mathbf{J}}_1$ (ani też żadna z jego funkcji) nie wyprowadza wektorów stanu poza podprzestrzeń $\mathcal{E}(j_1)$.

Zupełnie analogiczne relacje obowiązują i dla drugiego momentu pędu. Dla porządku wypiszemy je. A więc mamy relację komutacyjną

$$[j_k^{(2)}, j_p^{(2)}] = i\hbar \varepsilon_{kpq} j_q^{(2)}, \quad k, p, q = 1, 2, 3. \quad (18.31)$$

Ortonormalne stany $|j_2 m_2\rangle$, spełniają zagadnienia własne

$$\vec{\mathbf{J}}_2^2 |j_2 m_2\rangle = \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_2 m_2\rangle, \quad (18.32a)$$

$$j_3^{(2)} |j_2 m_2\rangle = \hbar m_2 |j_2 m_2\rangle. \quad (18.32b)$$

Liczba kwantowa $j_2 > 0$ jest całkowita lub połówkowa. Liczba $m_2 = -j_2, \dots, +j_2$ i zmienia się co 1. Dla ustalonego j_2 mamy $(2j_2 + 1)$ stanów o różnych liczbach kwantowych m_2 , operator $\vec{\mathbf{J}}_2$ działa w podprzestrzeniach $\mathcal{E}(j_2)$ o wymiarze $(2j_2 + 1)$ i nie wyprowadza z niej wektorów stanu.

Przypomnijmy jeszcze, że w teorii operatorów momentu pędu wprowadziliśmy operatory podnoszące i obniżające $j_{\pm}^{(k)} = j_1^{(k)} \pm i j_2^{(k)}$, ($k = 1, 2$). Operatory te działając w podprzestrzeniach $\mathcal{E}(j_k)$ na stany $|j_k m_k\rangle$ podnoszą lub obniżają liczbę m_k :

$$j_{\pm}^{(1)} |j_1 m_1\rangle = \hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} |j_1 m_1 \pm 1\rangle \quad (18.33a)$$

$$j_{\pm}^{(2)} |j_2 m_2\rangle = \hbar \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \pm 1)} |j_2 m_2 \pm 1\rangle \quad (18.33b)$$

Zwróćmy także uwagę, że operatory $\vec{\mathbf{J}}_1$ i $\vec{\mathbf{J}}_2$ są niezależne. Działają w różnych podprzestrzeniach, więc

$$[\vec{\mathbf{J}}_1, \vec{\mathbf{J}}_2] = 0, \quad \text{lub równoważnie} \quad [j_k^{(1)}, j_p^{(2)}] = 0. \quad (18.34)$$

Celem naszym jest zbadanie operatora $\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{J}}_1 + \vec{\mathbf{J}}_2$ (18.28). Operatorowi temu odpowiada przestrzeń $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ -wymiarowa, bo dla każdego wektora z $\mathcal{E}(j_1)$ (a jest ich $2j_1 + 1$) mamy $(2j_2 + 1)$ wektorów z $\mathcal{E}(j_2)$, i na odwrót. Chcemy poszukać odpowiedzi na kilka pytań:

- Jakie są najważniejsze własności operatora $\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{J}}_1 + \vec{\mathbf{J}}_2$?
- Jakie ma on wartości własne?
- Jak skonstruować bazę w przestrzeni $\mathcal{E}(J)$, która jest $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ -wymiarowa?

18.2.2 Podstawowe własności operatora $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$

Przede wszystkim badamy relację komutacyjną dla składowych operatora $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$.

$$\begin{aligned} [J_k, J_p] &= [j_k^{(1)} + j_k^{(2)}, j_p^{(1)} + j_p^{(2)}] \\ &= [j_k^{(1)}, j_p^{(1)}] + [j_k^{(1)}, j_p^{(2)}] + [j_k^{(2)}, j_p^{(1)}] + [j_k^{(2)}, j_p^{(2)}]. \end{aligned} \quad (18.35)$$

Drugi i trzeci komutator znikają, bowiem oba dodawane momenty pędu są z założenia niezależne (18.34). Pierwszy i czwarty wynikają z kanonicznych relacji komutacyjnych (18.29) i (18.31), otrzymujemy więc

$$[J_k, J_p] = i\hbar\varepsilon_{kpr}j_r^{(1)} + i\hbar\varepsilon_{kpr}j_r^{(2)} = i\hbar\varepsilon_{kpr}J_r. \quad (18.36)$$

Operator $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ spełnia więc kanoniczne relacje komutacyjne właściwe dla momentu pędu. Możemy więc go nazwać operatorem całkowitego (sumarycznego) momentu pędu. Na mocy ogólnej teorii wnioskujemy, że istnieją stany $|JM\rangle$ o własności

$$\langle JM | J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \quad (18.37)$$

a więc ortonormalne, które ponadto spełniają równania własne

$$\vec{J}^2 |JM\rangle = \hbar^2 J(J+1) |JM\rangle, \quad (18.38a)$$

$$J_3 |JM\rangle = \hbar M |JM\rangle, \quad (18.38b)$$

gdzie $M = -J, -J+1, \dots, J-1, J$. Możemy także i tutaj wprowadzić operatory podnoszący i obniżający $J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$:

$$J_{\pm} |JM\rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} |JM \pm 1\rangle \quad (18.39)$$

O liczbie kwantowej J wiemy, że jest nieujemna i całkowita lub połówkowa. W celu jej wyznaczenia rozumiemy w sposób następujący. Operatory \vec{J}_1 i \vec{J}_2 (dla ustalonych liczb j_1 i j_2) działają w podprzestrzeni stanów $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$ rozpiętej przez wektory $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ i mającej wymiar równy $(2j_1+1)(2j_2+1)$. W tej samej podprzestrzeni działa także operator \vec{J} , który, jako funkcja \vec{J}_1 i \vec{J}_2 , nie wyprowadza wektorów poza tę podprzestrzeń. Wobec tego operator \vec{J} dzieli tę podprzestrzeń na bloki o określonych liczbach J , przy czym każdy blok jest $(2J+1)$ -wymiarowy (bo tyle jest liczb M dla danego J). Powyższe stwierdzenia możemy sformułować inaczej. Stany własne operatorów \vec{J}_1 i \vec{J}_2 , dla danych (ustalonych) wartości liczb j_1 i j_2 tworzą

$$\{|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle\} \quad - \quad \text{baza } (2j_1+1)(2j_2+1) \text{ wymiarowa w } \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2). \quad (18.40)$$

Stany własne operatora \vec{J} tworzą natomiast bazę

$$\{|JM\rangle\} \quad - \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{pewna liczba bloków, każdy} \\ \text{o wymiarze } (2J+1) \end{array} \right\}. \quad (18.41)$$

Ponieważ mówimy o tej samej podprzestrzeni (w której działają różne operatory) więc obie bazy muszą być równoliczne. Wnioskujemy, że liczba J musi się zmieniać od pewnego J_{min} do J_{max} , w ten sposób aby

$$\sum_{J_{min}}^{J_{max}} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1). \quad (18.42)$$

Musimy więc ustalić liczby J_{min} oraz J_{max} , a także dokładnie określić zależność między bazami (18.40) i (18.41). Zanim do tego przejdziemy zauważmy, że wektory bazy (18.40), tj. $|j_1 m_2\rangle |j_2 m_2\rangle$ są stanami własnymi operatora J_3 , ponieważ

$$\begin{aligned} J_3 |j_1 m_2\rangle |j_2 m_2\rangle &= (j_3^{(1)} + j_3^{(2)}) |j_1 m_2\rangle |j_2 m_2\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2) |j_1 m_2\rangle |j_2 m_2\rangle. \end{aligned} \quad (18.43)$$

Niestety jednak nie są to stany własne operatora \vec{J}^2 . Wynika to stąd, że

$$\vec{J}^2 = (\vec{j}_1 + \vec{j}_2)^2 = \vec{j}_1^2 + \vec{j}_2^2 + 2\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2, \quad (18.44)$$

gdzie iloczyn mieszany jest konsekwencją relacji (18.34). Nie wiemy, jak iloczyn $\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2$ działa na wektory $|j_1 m_2\rangle |j_2 m_2\rangle$, dlatego też nie możemy stwierdzić, czy badane są wektorami własnymi \vec{J}^2 . Do iloczynu skalarnego wchodzi wszystkie składowe, więc iloczyn ten będzie zawierać operatory podnoszące i obniżające $j_{\pm}^{(1)}$ i $j_{\pm}^{(2)}$. Oznacza to, że iloczyn skalarny $\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2$ będzie mieszać stany o liczbach $m_1, m_1 \pm 1$ oraz m_2 i $m_2 \pm 1$. A zatem widzimy, że na ogół stany $|j_1 m_2\rangle |j_2 m_2\rangle$ nie są stanami własnymi \vec{J}^2 .

18.2.3 Wartości własne (liczby kwantowe) J oraz M

Operatory \vec{J}^2 i J_3 mają wartości własne oznaczone odpowiednio przez J i M . Ich własności wynikają z ogólnej teorii momentu pędu. Jak już mówiliśmy, problem polega na ustaleniu zakresu zmienności przede wszystkim liczby J . Jeśli to ustalimy, to z ogólnej teorii będziemy wiedzieć jakie są dopuszczalne M (dla danego J). Pomocą jest tu fakt, że stany $|j_1, m_2\rangle |j_2, m_2\rangle$ są stanami własnymi operatora J_3 . Z jednej strony mamy

$$J_3 |JM\rangle = \hbar M |JM\rangle, \quad (18.45)$$

zaś z drugiej (por. (18.43)) otrzymaliśmy

$$J_3 |j_1 m_2\rangle |j_2 m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |j_1 m_2\rangle |j_2 m_2\rangle. \quad (18.46)$$

W naturalny sposób wnioskujemy więc, że

$$M = m_1 + m_2. \quad (18.47)$$

Idąc dalej, na podstawie ogólnej teorii momentu pędu wnioskujemy, że $M_{max} = [m_1]_{max} + [m_2]_{max} = j_1 + j_2$. Oczywiście M_{max} musi odpowiadać J_{max} , a zatem

$$J_{max} = j_1 + j_2. \quad (18.48)$$

Pierwszy krok naszej analizy jest gotowy. Pozostaje określić odpowiednie J_{min} . Zanim do tego przejdziemy, zauważmy, że z uzyskanego rezultatu wynikają następujące wnioski

- Jeśli j_1 i j_2 są całkowite, to J też jest całkowite;
- Jeśli j_1 i j_2 są połówkowe, to J jest całkowite;
- Jeśli j_1 jest całkowite, a j_2 połówkowe (lub odwrotnie), to J jest połówkowe.
- Możliwe wartości liczby J rozpadają się na dwie klasy (tak jak w ogólnej teorii momentu pędu). Ponieważ M zmienia się zawsze co 1, więc J zmienia się także co 1 i jest albo połówkowe albo całkowite.

W dalszych rozważaniach przydatne są dwa następujące lematy.

Lemat 18.1 Dla liczb całkowitych zachodzi relacja

$$\sum_{k=0}^N (2k+1) = (N+1)^2. \quad (18.49)$$

Trywialny dowód przez indukcję pomijamy. ■

Lemat 18.2 Dla liczb całkowitych zachodzi relacja

$$\sum_{N_{min}}^{N_{max}} (2k+1) = (N_{max}+1)^2 - N_{min}^2. \quad (18.50)$$

Dowód. W oczywisty sposób mamy

$$\sum_{N_{min}}^{N_{max}} (2k+1) = \sum_{k=0}^{N_{max}} (2k+1) - \sum_{k=0}^{N_{min}-1} (2k+1). \quad (18.51)$$

Dwukrotne zastosowanie poprzedniego lematu daje natychmiast tezę. ■

Wracamy teraz do poszukiwania J_{min} . Wiemy już, że $J_{max} = j_1 + j_2$. Wobec tego w warunku (18.42) stosujemy lemat (18.50) i piszemy

$$\sum_{J_{min}}^{j_1+j_2} (2J+1) = (j_1+j_2+1)^2 - J_{min}^2 = (2j_1+1)(2j_2+1). \quad (18.52)$$

Elementarne mnożenie i uproszczenie prowadzi do równania

$$J_{min}^2 = j_1^2 + j_2^2 - 2j_1j_2 = (j_1 - j_2)^2. \quad (18.53)$$

A stąd oczywiście wynika (J_{min} nie może być ujemne)

$$J_{min} = |j_1 - j_2|, \quad (18.54)$$

co stanowi poszukiwany rezultat. Otrzymane wyniki pozwalają na sformułowanie dwóch ważnych wniosków.

1. Przy dodawaniu momentów pędu o ustalonych liczbach kwantowych j_1 i j_2 powstaje sumaryczny moment pędu, dla którego liczba J przyjmuje wartości

$$J = (j_1 + j_2), (j_1 + j_2) - 1, \dots, |j_1 - j_2|. \quad (18.55)$$

Liczby M są odpowiednie do J (zgodnie z ogólną teorią). Przebiegają co jeden od $-J$ do J .

2. Dla ustalonych j_1 i j_2 , przestrzeń $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$, w której stany $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ tworzą $(2j_1+1)(2j_2+1)$ -wymiarową bazę, jest podzielona na podprzestrzenie $\mathcal{E}(J)$. Każda z podprzestrzeni $\mathcal{E}(J)$ ma wymiar równy $(2J+1)$, przy czym liczba kwantowa J zmienia się co jeden od $J_{min} = |j_1 - j_2|$ do $J_{max} = j_1 + j_2$.

18.2.4 Wektory własne operatorów \vec{J}^2 i J_3

Ogólna dyskusja

Zajmiemy się teraz konstrukcją kolejnych podprzestrzeni $\mathcal{E}(J)$. Przestrzeń $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$ (dla ustalonych j_1 i j_2) została podzielona na bloki $\mathcal{E}(J)$, gdzie liczba kwantowa J zmienia się od $J_{min} = |j_1 - j_2|$ do $J_{max} = j_1 + j_2$. Wobec tego możemy napisać

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2) = & \mathcal{E}(J = j_1 + j_2) \oplus \mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1) \oplus \\ & \oplus \dots \oplus \mathcal{E}(J = |j_1 - j_2|) \end{aligned} \quad (18.56)$$

Przestrzeń $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$ tworzą wektory

$$|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \in \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2), \quad (18.57)$$

które nazwiemy bazą niesprzężoną. Natomiast wektory

$$|j_1 j_2, JM\rangle \in \bigoplus_{J=J_{min}}^{J_{max}} \mathcal{E}(J), \quad (18.58)$$

nazwiemy bazą sprzężoną. Będziemy szukać związków pomiędzy wektorami obu baz, lecz najpierw poczyńmy pewne uwagi.

- Po lewej stronie (18.58) ustalone liczby j_1 i j_2 służą jako parametry pomocnicze (żeby pamiętać, iż składamy momenty pędu odpowiadające liczbom j_1 i j_2).
- Stany obu baz są stanami własnymi operatora J_3 (porównaj relacje (18.45)–(18.47) i ich dyskusję). Wobec tego w związkach pomiędzy bazami musi być spełniony warunek

$$M = m_1 + m_2. \quad (18.59)$$

- Obie bazy rozpinają tę samą przestrzeń, są więc równoliczne i każda z nich zawiera po $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ wektorów. Zatem ich wymiary

$$\dim[\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)] = \dim \left[\bigoplus_{J=J_{min}}^{J_{max}} \mathcal{E}(J) \right] = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (18.60)$$

Podprzestrzeń $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$

Przypadek ten odpowiada maksymalnej wartości $J = J_{max} = j_1 + j_2$. Wobec tego liczba M może przybierać $(2J + 1) = [2(j_1 + j_2) + 1]$ wartości, co mówi nam, że

$$\dim \mathcal{E}(J = j_1 + j_2) = 2(j_1 + j_2) + 1. \quad (18.61)$$

Podprzestrzeń ta zawiera wektory postaci $|j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M\rangle$. Maksymalna wartość $M_{max} = J_{max} = j_1 + j_2$. Ponieważ obowiązuje warunek (18.47), tj. $M = m_1 + m_2$, więc M_{max} musi odpowiadać $m_1 = j_1$ oraz $m_2 = j_2$. Wnioskujemy więc, że wektorowi bazy sprzężonej $|j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle$ musi odpowiadać wektor $|j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2\rangle$ z bazy niesprzężonej. Napiszemy więc

$$|j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle = |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2\rangle, \quad (18.62)$$

co także określa relację faz pomiędzy obydwoma wektorami.

Kolejne wektory podprzestrzeni $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$ odpowiadają wartościom liczby M zmniejszającej się od $M = j_1 + j_2$ co jeden. Stany te zbudujemy stosując operator obniżający (18.39), którego działanie na wektory bazy sprzężonej zapiszemy teraz jako

$$J_- |j_1 j_2, JM\rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M-1)} |j_1 j_2, JM-1\rangle. \quad (18.63)$$

Kładąc po obu stronach $J = M = j_1 + j_2$, otrzymamy

$$\begin{aligned} J_- |j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle \\ = \hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (18.64)$$

Zamieniając miejscami lewą i prawą stronę, wyrażamy J_- jako sumę dwóch momentów pędu: $J_- = j_-^{(1)} + j_-^{(2)}$, a także podstawiamy relację (18.62). Dostajemy

$$\begin{aligned} & |j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)}} J_- |j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)}} (j_-^{(1)} + j_-^{(2)}) |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2\rangle. \end{aligned} \quad (18.65)$$

Stosując wyrażenia (18.33) odpowiednio dla $m_1 = j_1$ w pierwszym składniku i dla $m_2 = j_2$ w drugim, obniżamy liczby kwantowe m_1 i m_2 :

$$\begin{aligned} & |j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)}} \left[\hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - j_1(j_1 - 1)} |j_1, m_1 = j_1 - 1; j_2, m_2 = j_2\rangle \right. \\ &\quad \left. + \hbar \sqrt{j_2(j_2 + 1) - j_2(j_2 - 1)} |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle \right] \\ &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, m_1 = j_1 - 1; j_2, m_2 = j_2\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle \end{aligned} \quad (18.66)$$

Nietrudno sprawdzić, że tak otrzymany wektor jest unormowany i ortogonalny do wektora poprzedniego, tj. do (18.62). Widzimy również, że wektor bazy sprzężonej z $M = j_1 + j_2 - 1$ jest kombinacją liniową dwóch wektorów bazy niesprężonej, w których $m_1 = j_1 - 1$ i $m_2 = j_2$, oraz $m_1 = j_1$ i $m_2 = j_2 - 1$. W obu przypadkach oczywiście spełniony jest warunek $M = m_1 + m_2$.

Możemy dalej kontynuować tę procedurę i badać kolejny wektor bazy sprzężonej, należący do podprzestrzeni $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$, to jest wektor $|j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 2\rangle$. Robimy to analogicznie, działając operatorem J_- na obie strony wzoru (18.66). Otrzymamy wówczas

$$|j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 2\rangle = \begin{cases} \text{kombinacja liniowa trzech wektorów :} \\ |j_1, m_1 = j_1 - 2; j_2, m_2 = j_2\rangle \\ |j_1, m_1 = j_1 - 1; j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle \\ |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2 - 2\rangle \end{cases} \quad (18.67)$$

gdzie konkretne wartości trzech współczynników kombinacji liniowej można dość prosto wyliczyć. Procedura taka jest żmudna, ale w końcu wyczerpiemy podprzestrzeń $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$ konstruując wektory $|j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M\rangle$ bazy sprzężonej jako kombinacje liniowe wektorów bazy niesprężonej.

Podprzestrzeń $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1)$

Kolejny blok charakteryzuje liczba J o jeden mniejsza niż J_{max} , a więc $J = j_1 + j_2 - 1$. W tym wypadku, liczba $M_{max} = j_1 + j_2 - 1$, zaś $M_{min} = -j_1 - j_2 + 1$. Wymiar podprzestrzeni $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1)$ jest więc o dwa mniejszy niż poprzedniej

$$\dim \mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1) = 2(j_1 + j_2) - 1. \quad (18.68)$$

Rozumowanie nasze będzie podobnie jak w poprzednim przypadku. W podprzestrzeni $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1)$ wektorem o największej możliwej wartości liczby kwantowej M jest wektor $|j_1 j_2, J =$

$j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1 \rangle$. Ponieważ zawsze $M = m_1 + m_2$ więc oczekujemy, że wektor ten jest kombinacją liniową dwóch wektorów bazy niesprężonej

$$\begin{aligned} |j_1 j_2, J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1 \rangle \\ = \alpha |j_1, m_1 = j_1 - 1; j_2, m_2 = j_2 \rangle \\ + \beta |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2 - 1 \rangle, \end{aligned} \quad (18.69)$$

bowiem tylko w ten sposób można wyprodukować $M = j_1 + j_2 - 1 = m_1 + m_2$. Wektor (18.69) powinien być unormowany, a zatem powinien być spełniony warunek

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (18.70)$$

W tym miejscu musimy przypomnieć sobie, że w badanej w poprzednim punkcie podprzestrzeni $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$ występuje wektor (18.66) z tą samą liczbą $M = j_1 + j_2 - 1$. Wobec tego musimy zażądać, aby wektory (18.66) i (18.69) były ortogonalne. Ponieważ wektory bazy niesprężonej są z założenia ortonormalne, więc żądanie ortogonalności sprowadza się do warunku

$$\alpha \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} + \beta \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} = 0. \quad (18.71)$$

Równania (18.70) i (18.71) łatwo rozwiązujemy otrzymując $|\alpha|$ i $|\beta|$. Określają więc one liczby α i β z dokładnością do czynnika fazowego, który może być dowolny. Aby jednoznacznie określać wektory bazy sprężonej, potrzebna jest jakaś konwencja wyboru faz (do tego problemu wrócimy dalej). Konwencja taka rzeczywiście istnieje, za jej pomocą przyjmujemy wybór: β rzeczywiste i dodatnie, wtedy z (18.71) wynika, że α jest ujemne. W ten sposób mamy

$$\alpha = - \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}. \quad (18.72)$$

Wobec tego związek (18.69) przybiera postać

$$\begin{aligned} |j_1 j_2, J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1 \rangle = \\ = - \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, m_1 = j_1 - 1; j_2, m_2 = j_2 \rangle \\ + \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2 - 1 \rangle, \end{aligned} \quad (18.73)$$

Zbudowaliśmy więc pierwszy wektor (z maksymalnymi J i M) należący do podprzestrzeni $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1)$. Następne otrzymamy aplikując odpowiednią ilość razy operator $J_- = j_-^{(1)} + j_-^{(2)}$. Nietrudno zauważyć, że kolejny wektor $|j_1 j_2, J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 2 \rangle$ powstający z wektora (18.73) przez zastosowanie J_- będzie kombinacją liniową typu wektora (18.67), z którym trzeba będzie go ortogonalizować.

Dalsze podprzestrzenie $\mathcal{E}(J)$

Niech $J = J'$. W podprzestrzeni $\mathcal{E}(J')$ (o wymiarze $2J' + 1$) budujemy najpierw wektor z maksymalną możliwą wartością liczby M , tj. wektor

$$|j_1 j_2, J', M = J' \rangle. \quad (18.74)$$

Wektor ten jest kombinacją liniową wektorów $|j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle$ (należących do bazy niesprężonej) takich, że spełniony jest warunek $M = m_1 + m_2$. Żądanie unormowania wektora (18.74) daje

pierwsze równanie wiążące współczynniki kombinacji liniowej. Co więcej, w podprzestrzeniach $\mathcal{E}(J)$ takich, że $J > J'$, występowały już wektory z liczbami $M = M' = J'$. Konstruowany wektor (18.74) musi być ortogonalny do wektorów zbudowanych w poprzednich krokach. Warunki ortogonalności prowadzą do dalszych równań na współczynniki kombinacji, jaką jest wektor (18.74). Wyznaczając te współczynniki (wybierając fazy według pewnej konwencji) budujemy w końcu wektor (18.74). Następnie stosujemy operator J_- i konstruujemy dalsze wektory podprzestrzeni $\mathcal{E}(J')$. Procedura ta, choć wydaje się być koncepcyjnie prosta, jest bardzo pracochłonna.

Podsumowanie

Tabela zamieszczona na następnej stronie zbiera wyniki naszej dyskusji. Przedstawia ona wektory podprzestrzeni $\mathcal{E}(J)$ dla kolejnych J zmieniających się od $J_{max} = j_1 + j_2$ do $J_{min} = |j_1 - j_2|$. Pionowe kolumny s/a utworzone przez wektory postaci $|j_1 j_2, JM\rangle$ baz sprzężonych rozpinających podprzestrzenie $\mathcal{E}(J)$. W wektorach tych (dla zwarto/sci zapisu) nie zostały wpisane, pełni/ace rolę parametr/ow pomocniczych, liczby j_1 i j_2 . Ponadto, liczba J występująca w każdym z wektor/ow jest określona "numerem" odpowiedniej podprzestrzeni (pierwszy wiersz tabeli). Podkreślmy, /ze wszystkie wektory wypisane w tabeli s/a wzajemnie ortonormalne.

Warto jest także popatrzeć na tę tabelę "poziomo", to jest wzdłuż jej wierszy. W pierwszym wierszu mamy tylko jeden wektor, który zgodnie z (18.62) jest równy

$$|j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle = |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2\rangle. \quad (18.75)$$

W drugim wierszu mamy wektory które są kombinacjami liniowymi (18.66) lub (18.73). Możemy więc napisać

$$\left\{ \begin{array}{l} |j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 1\rangle \\ |j_1 j_2, J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1\rangle \end{array} \right\} \xleftrightarrow{\text{komb. lin.}} \left\{ \begin{array}{l} |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle \\ |j_1, m_1 = j_1 - 1; j_2, m_2 = j_2\rangle \end{array} \right\}, \quad (18.76)$$

co oznacza, że każdy wektor z lewej jest pewną kombinacją liniową dwóch wektorów z prawej.

Analogicznie możemy napisać dla trzeciego wiersza tabeli

$$\left\{ \begin{array}{l} |j_1 j_2, J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 2\rangle \\ |j_1 j_2, J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 2\rangle \\ |j_1 j_2, J = j_1 + j_2 - 2, M = j_1 + j_2 - 2\rangle \end{array} \right\} \xleftrightarrow{\text{komb. lin.}} \left\{ \begin{array}{l} |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2 - 2\rangle \\ |j_1, m_1 = j_1 - 1; j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle \\ |j_1, m_1 = j_1 - 2; j_2, m_2 = j_2\rangle \end{array} \right\}, \quad (18.77)$$

w którym każdy wektor po lewej jest kombinacją trzech po prawej. Możemy dalej kontynuować wypisywanie podobnych związków, aż wreszcie dojdziemy do $J = |j_1 - j_2|$ i skończymy tym samym całą procedurę.

$\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$	$\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1)$	$\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 2)$	$\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 3)$	$\mathcal{E}(J = j_1 - j_2)$
$ J, M = j_1 + j_2\rangle$					
$ J, M = j_1 + j_2 - 1\rangle$	$ J, M = j_1 + j_2 - 1\rangle$				
$ J, M = j_1 + j_2 - 2\rangle$	$ J, M = j_1 + j_2 - 2\rangle$	$ J, M = j_1 + j_2 - 2\rangle$			
$ J, M = j_1 + j_2 - 3\rangle$	$ J, M = j_1 + j_2 - 3\rangle$	$ J, M = j_1 + j_2 - 3\rangle$	$ J, M = j_1 + j_2 - 3\rangle$		
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	$ J, M = j_1 - j_2 \rangle$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	$ J, M = - j_1 - j_2 \rangle$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	
$ J, M = -j_1 - j_2 + 3\rangle$	$ J, M = -j_1 - j_2 + 3\rangle$	$ J, M = -j_1 - j_2 + 3\rangle$	$ J, M = -j_1 - j_2 + 3\rangle$		
$ J, M = -j_1 - j_2 + 2\rangle$	$ J, M = -j_1 - j_2 + 2\rangle$	$ J, M = -j_1 - j_2 + 2\rangle$			
$ J, M = -j_1 - j_2 + 1\rangle$	$ J, M = -j_1 - j_2 + 1\rangle$				
$ J, M = -j_1 - j_2\rangle$					

18.3 Współczynniki Clebscha-Gordana (CG)

18.3.1 Wprowadzenie

Przestrzeń $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$ (dla ustalonych j_1 i j_2) rozpiętą przez wektory bazy niesprężonej

$$|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \quad (18.78)$$

podzieliliśmy na bloki $\mathcal{E}(J)$ rozpięte przez wektory $|j_1 j_2, JM\rangle$. Pokazaliśmy, że wektory bazy sprężonej są kombinacjami liniowymi wektorów bazy niesprężonej. Obie bazy są równoliczne, bo rozpinają (choć na różne sposoby) jedną i tę samą przestrzeń. Wobec tego na relację pomiędzy wektorami obu baz możemy spojrzeć inaczej. Związek między obiema bazami musi być dany przez pewną transformację unitarną (bowiem tylko taka zachowuje ortonormalność). Szukamy więc transformacji

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \xrightarrow{\text{unitarnie}} |JM\rangle \equiv |j_1 j_2, JM\rangle \quad (18.79)$$

przy omówionych już warunkach, jakie muszą spełniać liczby J i M . Relację (18.79) zapisujemy teraz bardziej formalnie. Transformacja unitarna pomiędzy obiema dyskutowanymi bazami ma postać

$$|j_1 j_2, JM\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2, JM\rangle \quad (18.80a)$$

$$= \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle, \quad (18.80b)$$

gdzie skorzystaliśmy z relacji zupełności dla podprzestrzeni $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$ (przy ustalonych j_1 i j_2). Współczynniki tworzące unitarną macierz przejścia od bazy niesprężonej do sprężonej

$$\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2, JM\rangle = C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM}, \quad (18.81)$$

nazywamy współczynnikami Clebscha-Gordana (w skrócie CG). Podkreślmy raz jeszcze, że liczby j_1 oraz j_2 są tu ustalone (pełnią rolę parametrów). Współczynniki CG tworzą więc macierz kwadratową o wymiarach $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \times (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$, bo tyle możliwych wartości przebiegają zbiory par liczb (m_1, m_2) oraz (J, M) (co zresztą określa wymiary przestrzeni $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$). Elementy tej macierzy są numerowane zarówno przez liczby m_1 i m_2 , jak i przez J i M . Ze względu na dosyć skomplikowany sposób numeracji współczynników CG, metoda ich zapisu w postaci typowej tablicy liczbowej jest kwestią umowy. Pewne przykłady omówimy w dalszych częściach wykładu. Ogólne formuły pozwalające jawnie obliczyć wartości współczynników CG są bardzo złożone. Dalszą dyskusję ograniczymy do spraw zasadniczych i nie będziemy się zajmować szczegółami teorii.

Zwróćmy uwagę, że relacje (18.80) wyrażają wektory bazy sprężonej jako pewne kombinacje liniowe wektorów bazy niesprężonej. Wobec tego współczynniki CG są identyczne z współczynnikami kombinacji liniowych omawianych w poprzedniej części tego rozdziału. A zatem przedstawione metody konstrukcji bazy sprężonej można wykorzystać do znalezienia odpowiednich współczynników CG.

18.3.2 Własności współczynników CG

Przedstawimy najważniejsze własności współczynników Clebscha-Gordana (CG) (18.81). Będziemy na ogół pomijać ściśle dowody, skupiając się raczej na intuicyjnym omówieniu i wyjaśnieniu ich własności.

A. Nierówność trójkąta

Jak wiemy, liczby j_1 i j_2 odgrywają rolę parametrów, natomiast liczba J określająca całkowity moment pędu spełnia warunek (18.55), który zapiszemy w postaci

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2. \quad (18.82)$$

Warunek ten nazywamy nierównością trójkąta. Współczynniki CG, których numery nie spełniają nierówności trójkąta są tożsamościowo równe zero.

Na nierówność trójkąta można po prostu spojrzeć geometrycznie. Dowolny z boków trójkąta musi mieć długość nie mniejszą niż bezwzględna wartość różnicy długości dwóch pozostałych boków, i nie większą niż suma tych dwóch długości. Intuicyjnie wiemy, że suma dwóch wektorów tworzy trzeci bok trójkąta, w którym dwa pozostałe boki to dwa dodawane wektory.

B. Warunek na wartość liczby M

Jak już dyskutowaliśmy, zarówno wektory bazy niesprężonej jak i sprężonej są wektorami własnymi operatora J_3 . Dlatego też dla liczby M zachodzi relacja $M = m_1 + m_2$, (por. (18.47)). Współczynniki CG muszą więc wiązać tylko te stany, które spełniają ten warunek. Innymi słowy żądamy, aby współczynniki CG miały własność

$$C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} \equiv 0, \quad \text{jeśli} \quad m_1 + m_2 \neq M, \quad (18.83)$$

co oczywiście można zapisać równoważnie

$$C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} \neq 0, \quad \text{wtedy i tylko wtedy, gdy} \quad m_1 + m_2 = M. \quad (18.84)$$

C. Relacje ortogonalności dla współczynników CG

Współczynniki CG tworzą macierz unitarną, a więc powinny spełniać relacje ortogonalności właściwe dla macierzy tego typu. Jednak ich numeracja nie jest taka, do jakiej jesteśmy przyzwyczajeni. Dlatego też wyprowadzimy odpowiednie związki pomiędzy współczynnikami CG.

W naszych rozważaniach wykazaliśmy, że obie bazy są ortonormalne. Skorzystajmy więc z relacji ortonormalności dla bazy sprężonej

$$\langle j_1 j_2, J' M' | j_1 j_2, JM \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}. \quad (18.85)$$

Wykorzystując relację zupełności dla podprzestrzeni $\mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$ (j_1 i j_2 – ustalone) możemy napisać

$$\begin{aligned} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} &= \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2, J' M' | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2, JM \rangle \\ &= \sum_{m_1} \sum_{m_2} \left(C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{J' M'} \right)^* C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} \end{aligned} \quad (18.86)$$

co stanowi pierwszą z poszukiwanych relacji ortogonalności dla współczynników CG. Zwróćmy tutaj uwagę, że podwójna suma (suma względem m_1 i m_2) jest w gruncie rzeczy zbyteczna. Ponieważ musi być spełniony warunek (18.83), więc na przykład $m_2 = M - m_1$. Wybierając M i sumując po m_1 w każdym nieznikającym składniku indeks m_2 jest automatycznie ustalony.

Drugą relację ortogonalności otrzymamy w podobny sposób, ale "odwracając" rozumowanie. Zaczynamy od bazy niesprężonej, dla której mamy warunek ortonormalności

$$\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 m'_1; j_2 m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (18.87)$$

Relacja zupełności dla sumy podprzestrzeni $\mathcal{E}(J)$ musi uwzględniać fakt, że liczba J zmienia się w ramach nierówności trójkąta, tj. od $J_{min} = |j_1 - j_2|$ do $J_{max} = j_1 + j_2$. Wobec tego mamy teraz

$$\sum_{J=J_{min}}^{J_{max}} \sum_{M=-J}^J |j_1 j_2, JM\rangle \langle j_1 j_2, JM| = \hat{1}. \quad (18.88)$$

Stosując (18.88) we wzorze (18.87) dostajemy

$$\begin{aligned} \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} &= \sum_{J=J_{min}}^{J_{max}} \sum_M \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_1 j_2, JM \rangle \langle j_1 j_2, JM | j_1 m'_1; j_2 m'_2 \rangle \\ &= \sum_{J=J_{min}}^{J_{max}} \sum_M C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} \left(C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2}^{JM} \right)^*, \end{aligned} \quad (18.89)$$

a to jest druga relacja ortogonalności dla współczynników CG. W tym przypadku liczby m_1 i m_2 automatycznie określają $M = m_1 + m_2$, zatem suma względem M ogranicza się do jednego składnika (czyli znak sumy po M jest w gruncie rzeczy zbędny).

W obu relacjach ortogonalności występują sprzężenia zespolone współczynników CG. Pokażemy dalej, że można tak wybrać fazy, aby były one rzeczywiste, a więc "gwiazdka" oznaczająca sprzężenie zespolone jest w gruncie rzeczy zbyteczna, piszemy ją raczej dla porządku.

Współczynniki CG są (niestety) zapisywane w dość skomplikowany sposób. Formuły (18.80) wskazują jednak, że współczynniki te tworzą po prostu macierz przejścia z bazy niesprężonej do bazy sprężonej. Relacje ortogonalności zapewniają, że macierz przejścia jest unitarna (a nawet ortogonalna, bo współczynniki CG są rzeczywiste). Dzięki temu baza ortonormalna przechodzi w bazę ortonormalną, tak jak być powinno. Co więcej, jak zaraz pokażemy, współczynniki CG zapewniają także przejście w drugą stronę. Możemy więc napisać

$$\left(\begin{array}{c} \text{baza niesprężona} \\ |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle \end{array} \right) \xleftrightarrow[\text{transformacja unitarna}]{\text{współczynniki CG}} \left(\begin{array}{c} \text{baza sprężona} \\ |j_1 j_2; JM\rangle \end{array} \right) \quad (18.90)$$

i (jeśli tylko znamy odpowiednią macierz) możemy przechodzić od jednej bazy do drugiej.

D. Przejście od bazy sprężonej do niesprężonej

Formuła (18.80) definiująca współczynniki CG jest transformacją unitarną pozwalającą wyrazić wektory bazy sprężonej przez wektory bazy niesprężonej. Poszukamy teraz transformacji odwrotnej: z bazy sprężonej do niesprężonej. Wymaga to odwrócenia macierzy unitarnej. Najprościej to zrobić w następujący sposób. Przypomnijmy relację (18.80)

$$|j_1 j_2, JM\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \quad (18.91)$$

Pomnóżmy ją stronami przez współczynnik $(C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2}^{JM})^*$ i przesumujmy względem liczb J oraz M zmieniających się w odpowiednich zakresach. W rezultacie dostaniemy

$$\begin{aligned} \sum_J \sum_M \left(C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2}^{JM} \right)^* |j_1 j_2, JM\rangle &= \\ &= \sum_J \sum_M \sum_{m_1} \sum_{m_2} \left(C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2}^{JM} \right)^* C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \end{aligned} \quad (18.92)$$

Suma względem J i M po prawej stronie odtwarza relację ortogonalności (18.89), a więc produkuje odpowiednie delty Kroneckera. A zatem mamy

$$\sum_J \sum_M \left(C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2}^{JM} \right)^* |j_1 j_2, JM\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \quad (18.93)$$

Wykonując sumowanie, opuszczamy primy i dostajemy

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle = \sum_{J=J_{\min}}^{J_{\max}} \sum_{M=-J}^J \left(C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} \right)^* |j_1 j_2, JM\rangle. \quad (18.94)$$

Suma względem M jest zbyteczna, bowiem zadane po lewej m_1 i m_2 automatycznie określają nieznikające współczynniki CG, dla których $M = m_1 + m_2$. Ponieważ (czego jeszcze nie wykazaliśmy) współczynniki CG są rzeczywiste, więc również znak sprzężenia zespolonego jest niepotrzebny.

E. Relacje rekurencyjne dla współczynników CG

Do obliczeń i badania własności współczynników CG bardzo wygodne są relacje rekurencyjne, którymi teraz się zajmujemy. Weźmy teraz relację (18.80b) lub (18.91)

$$|j_1 j_2, JM\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \quad (18.95)$$

Ponieważ $J_{\pm} = j_{\pm}^{(1)} + j_{\pm}^{(2)}$, więc na lewą stronę (18.95) możemy podziać operatorem J_{\pm} (patrz (18.39)), a na prawą operatorem $j_{\pm}^{(1)} + j_{\pm}^{(2)}$ (por. (18.33)):

$$J_{\pm} |j_1 j_2, JM\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} \left(j_{\pm}^{(1)} + j_{\pm}^{(2)} \right) |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \quad (18.96)$$

Wobec relacji (18.33) i (18.39) mamy dalej

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} |j_1 j_2, JM \pm 1\rangle \\ &= \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} \left[\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)} |j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2\rangle \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} |j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1\rangle \right]. \end{aligned} \quad (18.97)$$

Domykamy obie strony za pomocą bra $\langle j_1 m'_1; j_2 m'_2 |$. Po prawej korzystamy z ortonormalności wektorów bazy niesprężonej

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \langle j_1 m'_1; j_2 m'_2 | j_1 j_2, JM \pm 1\rangle \\ &= \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{JM} \left[\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)} \delta_{m'_1, m_1 \pm 1} \delta_{m'_2, m_2} \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} \delta_{m'_1, m_1} \delta_{m'_2, m_2 \pm 1} \right] \end{aligned} \quad (18.98)$$

Iloczyn skalarny po lewej stronie to nic innego niż współczynnik CG (por. definicja (18.81)). Wykonując uważnie sumowania dostajemy

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2}^{JM \pm 1} \\ &= C_{j_1 m'_1 \mp 1, j_2 m'_2}^{JM} \sqrt{j_1(j_1+1) - (m'_1 \mp 1)m'_1} \\ & \quad + C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2 \mp 1}^{JM} \sqrt{j_2(j_2+1) - (m'_2 \mp 1)m'_2}. \end{aligned} \quad (18.99)$$

Powyższy związek pomiędzy różnymi współczynnikami CG jest poszukiwaną relacją rekurencyjną, która pozwala jawnie je konstruować. Dla przejrzystości zapisu wypiszmy powyższe relacje oddzielnie

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M-1)} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{J, M-1} \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} C_{j_1 m_1+1, j_2 m_2}^{J, M} \\ & \quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} C_{j_1 m_1, j_2 m_2+1}^{J, M} \end{aligned} \quad (18.100a)$$

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M+1)} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{J, M+1} \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)} C_{j_1 m_1-1, j_2 m_2}^{J, M} \\ & \quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)} C_{j_1 m_1, j_2 m_2-1}^{J, M} \end{aligned} \quad (18.100b)$$

F. Wybór fazy współczynników CG

Generalnie rzecz biorąc, współczynniki CG (jako współczynniki pewnych kombinacji liniowych) mogłyby być zespolone, choć oczywiście musiałyby spełniać np. relacje ortogonalności. Analizując w poprzedniej części wektory bazy sprzężonej jako kombinacje liniowe wektorów bazy niesprężonej stwierdziliśmy, że wybór faz współczynników kombinacji jest w zasadzie dowolny. Jak się okazuje w praktycznych zastosowaniach, bardzo pożyteczne jest wybranie pewnej konwencji wyboru fazy i jej konsekwentne stosowanie. Wygodna i dość powszechnie przyjęta jest następująca konwencja:

$$C_{j_1 m_1=j_1, j_2 m_2=J-j_1}^{JJ} = \langle j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = J - j_1 | j_1 j_2, JJ \rangle \in \mathbb{R}_+ \quad (18.101)$$

Aby zrozumieć tą konwencję, zapiszmy rozkład (18.80), w którym $M = J$, a więc liczba M ma (dla danego J) maksymalną wartość

$$|j_1 j_2, JJ\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} C_{j_1 m_1, j_2 m_2=J-m_1}^{JJ} |j_1 m_1; j_2, m_2 = J - m_1\rangle. \quad (18.102)$$

Ponieważ tutaj $J = M = m_1 + m_2$ (zgodnie z warunkiem (18.84)), więc automatycznie $m_2 = J - m_1$ i jest ustalone, więc suma względem m_2 jest zbyteczna. Współczynnik, którego fazę narzuca konwencja (18.101) występuje w rozkładzie (18.102) jako ten, w którym liczba m_1 przyjmuje największą dozwoloną wartość, czyli $m_1 = j_1$. Wówczas liczba m_2 w (18.101) z konieczności wynosi $m_2 = J - j_1$. Nierówność trójkąta (18.82) wraz z relacją rekurencyjną (18.100b) zapewniają, że współczynnik wskazany w konwencji (18.101) nie może być równy zeru.

Przyjmując powyższą konwencję i stosując relacje rekurencyjne, nietrudno zorientować się, że w konsekwencji wszystkie współczynniki CG są rzeczywiste. Natomiast znaki kolejnych współczynników już mogą być różne. Nie ma prostego sposobu określenia znaków współczynników CG.

Aby zilustrować reguły (konwencję) wyboru faz rozważmy sytuację, gdy $J = j_1 + j_2 - 1$. Dla tego J największe możliwe M to oczywiście $M = J = j_1 + j_2 - 1$. Wobec tego kombinacja liniowa (18.102) przyjmuje w tym wypadku postać

$$\begin{aligned} & |j_1 j_2, J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} C_{j_1 m_1, j_2 m_2=J-m_1}^{J, M=J} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (18.103)$$

Rozważmy (idąc od góry) kolejne składniki sumy względem m_1 :

- Gdy $m_1 = j_1$, to $m_2 = M - m_1 = J - m_1 = j_1 + j_2 - 1 - j_1 = j_2 - 1$.
- Gdy $m_1 = j_1 - 1$, to $m_2 = M - m_1 = J - m_1 = j_1 + j_2 - 1 - j_1 + 1 = j_2$.
- Gdy $m_1 = j_1 - 2$, to $m_2 = M - m_1 = J - m_1 = j_1 + j_2 - 1 - j_1 + 2 = j_2 + 1$,
co jest niemożliwe, bo m_2 jest ograniczone: $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$.

A więc suma (18.103) zawiera efektywnie tylko dwa niezerowe składniki

$$\begin{aligned} |j_1 j_2, J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1\rangle &= \\ &= C_{j_1, m_1=j_1, j_2 m_2=j_2-1}^{J, M=J} |j_1, m_1 = j_1; j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle \\ &\quad + C_{j_1, m_1=j_1-1, j_2 m_2=j_2}^{J, M=J} |j_1, m_1 = j_1 - 1; j_2, m_2 = j_2\rangle \end{aligned} \quad (18.104)$$

Zestawiając to wyrażenie z relacją (18.69) widzimy, że możemy napisać

$$\beta = C_{j_1, m_1=j_1, j_2 m_2=j_2-1}^{J, M=J} \quad (18.105a)$$

$$\alpha = C_{j_1, m_1=j_1-1, j_2 m_2=j_2}^{J, M=J} \quad (18.105b)$$

gdzie oczywiście mamy $J = M = j_1 + j_2 - 1$. Konwencja wyboru faz (18.101) sprawia, że pierwszy z powyższych współczynników (tj. β) wybieramy rzeczywisty dodatni. Tak właśnie zrobiliśmy w (18.72), choć tam tego nie uzasadnialiśmy. Dlatego też, porównując (18.72) i (18.105), możemy wypisać dwa współczynniki CG dla $J = j_1 + j_2 - 1$:

$$C_{j_1, m_1=j_1, j_2 m_2=j_2-1}^{J, M=J} = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \quad (18.106a)$$

$$C_{j_1, m_1=j_1-1, j_2 m_2=j_2}^{J, M=J} = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \quad (18.106b)$$

G. Uwagi końcowe

Współczynniki CG pełnią bardzo ważną rolę w licznych zagadnieniach fizyki atomowej i molekularnej. Są one doskonale znane, ich konkretne wartości liczbowe (dla mnóstwa szczególnych przypadków), własności algebraiczne itp., są zebrane w różnorodnych tablicach i monografiach. Znane są jawne i bardzo ogólne wyrażenia dla współczynników CG, a także ich wzajemne relacje. Co więcej, możliwe jest uogólnienie polegające na tym, że można składać nie tylko dwa momenty pędu, ale także trzy i więcej.

Zagadnieniami tymi nie będziemy się tu zajmować, bowiem teoria momentu pędu mogłaby, sama z siebie, stanowić temat rocznego wykładu. Poprzestaniemy na przedstawionych informacjach i rozważymy pewne przykłady konkretnych obliczeń.
