

КОЭФФИЦИЕНТЫ ВЕКТОРНОГО СЛОЖЕНИЯ И МАТРИЦЫ ВРАЩЕНИЯ

§ 1. Момент импульса. Основные обозначения и принятые соглашения

В данном приложении приняты следующие условные обозначения, относящиеся к моменту импульса.

Постоянная Планка: $\hbar = 1$.

Составляющие момента импульса: J — оператор момента импульса, имеющий декартовы компоненты J_x, J_y, J_z

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y. \quad (1)$$

Коммутационные соотношения:

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y, \quad (2)$$

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2J_z. \quad (3)$$

Базисные векторы в стандартном $\{J^2 J_z\}$ -представлении $|JM\rangle$

$$J^2 |JM\rangle = J(J+1) |JM\rangle, \quad (4)$$

$$J_z |JM\rangle = M |JM\rangle, \quad (5)$$

$$J_{\pm} |JM\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} |JM \pm 1\rangle, \quad (6)$$

$$\langle \tau JM | \tau' J' M' \rangle = \delta_{\tau\tau'} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (7)$$

(J — целое или полуцелое число $\geqslant 0$, $M = -J, -J+1, \dots, +J$). Буквой τ обозначены квантовые числа, которые следует добавить к J и M для того, чтобы получить полный набор; далее, там где это не ведет к недоразумению, индекс τ будет опущен.

Раздел I. КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША — ГОРДАНА (К. — Г.) И «3j»-СИМВОЛЫ

§ 2. Определение и основные обозначения

Пусть j_1 и j_2 — моменты импульсов квантовых систем 1 и 2 соответственно, а J — момент импульса полной системы, составленный из систем 1 и 2,

$$J = j_1 + j_2. \quad (8)$$

¹⁾ Это Дополнение подготовлено в сотрудничестве с Дж. Горовицем. Для более полного ознакомления с этими вопросами см. в первую очередь работу А. Е. Эдмонс. Угловые моменты в квантовой механике (в сб.: «Деформация атомных ядер», М., ИЛ, 1958), где приведены ссылки на основные работы. Рекомендуется также U. Fano, G. Racah. Irreducible tensorial sets, N. Y., Academic Press, 1959.

Тензорное произведение $(2j_1 + 1)$ векторов системы 1

$$|j_1 m_1\rangle \quad (j_1 \text{ фиксировано}, m_1 = -j_1, \dots, +j_1)$$

с $(2j_2 + 1)$ векторами системы 2

$$|j_2 m_2\rangle \quad (j_2 \text{ фиксировано}, m_2 = -j_2, \dots, +j_2)$$

дает $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ собственных векторов операторов $j_1^2, j_2^2, J_{1z}, J_{2z}$

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle, \quad (9)$$

из которых мы можем получить посредством унитарного преобразования $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ собственных векторов операторов j_1^2, j_2^2, J^2, J_z :

$$|j_1 j_2 JM\rangle \quad (10)$$

$$(J = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2; M = -J, \dots, +J).$$

Определение. Коэффициенты Клебша — Гордана¹⁾ или коэффициенты векторного сложения

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$$

являются коэффициентами унитарного преобразования

$$|j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle. \quad (11)$$

Выбор фазового множителя²⁾. Мы закончим определение векторов в (9) и (10), фиксируя их относительные фазовые множители следующим образом:

- (i) векторы $|j_1 m_1\rangle, |j_2 m_2\rangle$ и $|j_1 j_2 JM\rangle$ удовлетворяют соотношениям (6);
- (ii) $\langle j_1 j_2 j_1(j_1 - J) | JJ \rangle$ — вещественная величина (> 0);

«3j»-символы Вигнера³⁾:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 + M}}{\sqrt{2J + 1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle. \quad (12)$$

¹⁾ Для коэффициентов Клебша — Гордана в литературе используются различные обозначения. Приведем основные:

$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle$ (E. Кондон, T. Шортли. Теория атомных спектров. М., ИЛ, 1949).

$C_{j_1 j_2}(JM; m_1 m_2)$ (Дж. Блатт, В. Вайсконф. Теоретическая ядерная физика. М., ИЛ, 1954).

$S_{m_1 m_2}^{j_1 j_2}$, (Е. П. Вигнер. Теория групп и ее применение в квантовой механике. М., ИЛ, 1961).

²⁾ Такой выбор используется большинством автором, в частности, Вигнером, Кондном и Шортли, Блаттом и Вайсконфом, loc. cit. и G. Racah. Phys. Rev. 62, 437 (1942).

³⁾ Рака (см. предыдущую ссылку) использует обозначение

$$V(abc, \alpha\beta\gamma) = (-1)^{a-b-c} \begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{c-\gamma}}{\sqrt{2c+1}} \langle ab\alpha\beta | c - \gamma \rangle.$$

§ 3. Основные свойства коэффициентов К. — Г.

Вещественность:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle^* = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle.$$

Правила отбора:

$$(i) \quad m_1 + m_2 = M;$$

$$(ii) \quad |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \text{ (неравенство треугольника).}$$

Если эти два соотношения не выполняются, то $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = 0$.

Симметрия: Символ $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$

(i) инвариантен при циклической перестановке столбцов;

(ii) умножается на $(-1)^{l_1+l_2+l_3}$ при перестановке двух столбцов;

(iii) умножается на $(-1)^{l_1+l_2+l_3}$ при одновременном изменении знака m_1, m_2, m_3 .

Следствия:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = (-1)^{l_1+l_2-J} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | JM \rangle = \quad (13a)$$

$$= (-1)^{l_1-J+m_2} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}} \langle j_2 M - m_2 | j_1 m_1 \rangle = \quad (13b)$$

$$= (-1)^{l_2-J-m_1} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_2+1}} \langle j_1 J - m_1 M | j_2 m_2 \rangle = \quad (13c)$$

$$= (-1)^{l_1+l_2-J} \langle j_1 j_2 - m_1 - m_2 | J - M \rangle. \quad (13d)$$

Соотношения ортогональности:

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \quad (14a)$$

$$(|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2; -J \leq M \leq J)$$

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^{+J} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | JM \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}, \quad (14b)$$

$$(-j_1 \leq m_1 \leq +j_1; -j_2 \leq m_2 \leq +j_2)$$

$$\sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} \left(\begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_1 & j_2 & j'_3 \\ m_1 & m_2 & m'_3 \end{matrix} \right) = \frac{1}{2j_3+1} \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3}, \quad (15a)$$

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^{+J} (2j_3+1) \left(\begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{matrix} \right) = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (15b)$$

Соотношение для сферических функций:

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) Y_{l_3}^{m_3}(\Omega) d\Omega =$$

$$= \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\begin{matrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{matrix} \right), \quad (16)$$

отсюда следует

$$Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) = \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{M=-L}^L \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \langle l_1 l_2 00 | L 0 \rangle \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle Y_L^M(\Omega) = \quad (17a)$$

$$= \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{M=-L}^L (-1)^M \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2L+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} Y_L^{-M}(\Omega). \quad (17b)$$

§ 4. Методы вычисления

Рекуррентные соотношения. Приведем соотношения между коэффициентами К. — Г., аргументы которых отличаются на величины:

$$(i) \Delta J = 0, \Delta M = +1$$

$$\sqrt{J(J+1)-M(M+1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = \\ = \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)} \langle j_1 j_2 m_1 + 1 m_2 | J M + 1 \rangle + \\ + \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 + 1 | J M + 1 \rangle. \quad (18)$$

$$(ii) \Delta J = 0, \Delta M = -1,$$

$$\sqrt{J(J+1)-M(M-1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = \\ = \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)} \langle j_1 j_2 m_1 - 1 m_2 | J M - 1 \rangle + \\ + \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 - 1 | J M - 1 \rangle. \quad (19)$$

$$(iii) \Delta J = \pm 1, \Delta M = 0,$$

$$A_0 \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = A_+ \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J + 1 M \rangle + A_- \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J - 1 M \rangle, \quad (20)$$

где

$$A_0 = m_1 - m_2 + M \frac{j_2(j_2+1) - j_1(j_1+1)}{J(J+1)} \quad (M = m_1 + m_2),$$

$$A_+ = f(J+1), \quad A_- = f(J),$$

$$f(x) = \sqrt{x^2 - M^2} \left[\frac{[(j_1+j_2+1)^2 - x^2] [x^2 - (j_1-j_2)^2]}{4x^2(2x-1)(2x+1)} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Ф о р м у л а Р а к а:

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ a & \beta & \gamma \end{pmatrix} = (-1)^{a-b-\gamma} \sqrt{\Delta(abc)} \times \\ \times \sqrt{(a+\alpha)!(a-\alpha)!(b+\beta)!(b-\beta)!(c+\gamma)!(c-\gamma)!} \times \\ \times \sum_t (-1)^t [t! (c-b+t+a)! (c-a+t-\beta)! (a+b-c-t)!] \times \\ \times (a-t-\alpha)!(b-t+\beta)!^{-1} \quad (21)$$

$$(a+\beta+\gamma=0, |a-b|\leq c \leq a+b),$$

где

$$\Delta(abc) = \frac{(a+b-c)!(b+c-a)!(c+a-b)!}{(a+b+c+1)!}. \quad (22)$$

Суммирование происходит по всем целым значениям t , для которых факториалы имеют смысл, т. е. для которых аргументы факториалов положительны или равны нулю ($0! = 1$). Число членов в этой сумме равно $v + 1$, где v — наименьшее из девяти чисел:

$$\begin{array}{lll} a \pm a, & b \pm b, & c \pm c, \\ a + b - c, & b + c - a, & c + a - b. \end{array}$$

§ 5. Специальные значения и таблицы

Специальные значения

(i) Если J и M принимают наибольшее значение, то

$$\langle j_1 j_2 j_1 j_2 | j_1 + j_2 \ j_1 + j_2 \rangle = 1.$$

(ii) Если одно из j равно нулю, то

$$\langle j_0 m_0 | jm \rangle = 1 \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} j & i & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$$

(iii) $m_1 = m_2 = m_3 = 0$:

если $l_1 + l_2 + l_3$ нечетно, то

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0, \quad (23a)$$

если $2p = l_1 + l_2 + l_3$ четно, то

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^p \sqrt{\Delta(l_1 l_2 l_3)} \frac{p!}{(p-l_1)! (p-l_2)! (p-l_3)!} \quad (23b)$$

(l_1, l_2, l_3 — целые числа ≥ 0 , удовлетворяющие неравенствам треугольника).

Специальные случаи формулы Рака. Следующие формулы, а также те, которые получаются при использовании соотношений симметрии, дают коэффициенты К.—Г. в специальных случаях:

(i) $m_1 = \pm j_1$, или $m_2 = \pm j_2$, или $M = \pm J$:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JJ \rangle = \langle j_2 j_1 - m_2 - m_1 | J - J \rangle =$$

$$= (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{(2J+1)! (j_2 + j_2 - J)!}{(j_1 + j_2 + J + 1)! (J + j_1 - j_2)! (J + j_2 - j_1)!}} \times \\ \times \sqrt{\frac{(j_1 + m_1)! (j_2 + m_2)!}{(j_1 - m_1)! (j_2 - m_2)!}} \quad (m_1 + m_2 = J). \quad (24)$$

(ii) одно из j есть сумма двух других:

если $J = j_1 + j_2$, то

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{(2j_1)! (2j_2)!}{(2J)!}} \sqrt{\frac{(J+M)! (J-M)!}{(j_1+m_1)! (j_1-m_1)! (j_2+m_2)! (j_2-m_2)!}}, \quad (25)$$

$$\langle j_2 M - m_2 | j_1 m_1 \rangle = (-1)^{j_2 - m_2} \sqrt{\frac{2j_1 + 1}{2J + 1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle. \quad (26)$$

Таблицы «3j»-символов. Таблицы I—IV дают выражения для символа

$$\left(\begin{array}{ccc} j & s & (j+e) \\ m & \mu & (-m-\mu) \end{array} \right)$$

как функции j и m для значений $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$; $0 \leq e \leq s$; $0 \leq \mu \leq s$.

Таблица I

Таблица Φ_{00}^0 и $\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}$

$s = 0$	$\Phi_{00}^0 = 1$
$s = \frac{1}{2}$	$\Phi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = 1$

Таблица $\Phi_{\mu e}^1$

$s = 1$	$e = 0$	$e = 1$
$\mu = 0$	$-2m$	$-\sqrt{2}(j-m+1)$
$\mu = 1$	$-\sqrt{2}(j-m)$	1

Таблица II

Таблица $\Phi_{\mu e}^{\frac{3}{2}}$

$s = \frac{3}{2}$	$e = \frac{1}{2}$	$e = \frac{3}{2}$
$\mu = \frac{1}{2}$	$j - 3m$	$-\sqrt{3}(j-m+1)$
$\mu = \frac{3}{2}$	$-\sqrt{3}(j-m)$	1

Таблица IV

Таблица $\Phi_{\mu e}^2$

$s = 2$	$e = 0$	$e = 1$	$e = 2$
$\mu = 0$	$2[3m^2 - j(j+1)]$	$2m\sqrt{6}(j-m+1)$	$\sqrt{6}(j-m+2)(j-m+1)$
$\mu = 1$	$(2m+1)\sqrt{6}(j-m)$	$2(j-2m)$	$-2\sqrt{j-m+1}$
$\mu = 2$	$\sqrt{6}(j-m)(j-m-1)$	$-2\sqrt{(j-m)}$	1

Используя эти выражения, а также соотношения симметрии, мы можем просто вычислить любые из коэффициентов К.—Г., для которых одно из j равно $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ или 2 .

В таблицах приведены значения функций $\Phi_{\mu e}^s(jm)$, которые определяются посредством соотношений

$$\binom{j}{m} \binom{s}{\mu} \binom{(j+e)}{(-m-\mu)} = (-1)^{j+m} \sqrt{\frac{(2j+e-s)!}{(2j+e+s+1)!} \frac{(j+m+\mu+e)!}{(j+m)!}} \Phi_{\mu e}^s. \quad (27)$$

Раздел II. КОЭФФИЦИЕНТЫ РАКА И «6j»-СИМВОЛЫ

§ 6. Определение и основные обозначения

Сложение трех моментов импульса. Пусть J — полный момент импульса системы, которая состоит из трех отдельных частей, обладающих моментами j, j', j'' соответственно:

$$J = j + j' + j''.$$

В $(2j+1)(2j'+1)(2j''+1)$ -мерном пространстве, натянутом на векторы $|mm'm''\rangle \equiv |jm\rangle |j'm'\rangle |j''m''\rangle$ (j, j', j'' — заданы; m, m', m'' — переменные), подпространство момента (JM) обычно имеет размерность, большую единицы ($2J$ и $2M$ — целые числа, четные или нечетные в зависимости от числа $2(j+j'+j'')$; $\min|j \pm j' \pm j''| \leq J \leq j+j'+j''$; $-J \leq M \leq +J$).

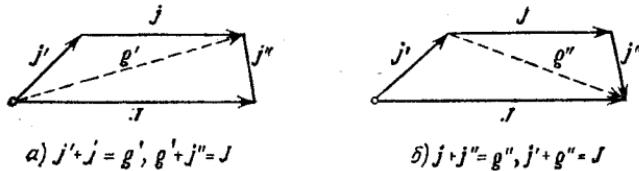


Рис. 28. $J = j + j' + j''$. Различные схемы сложения.

Следующие две схемы сложения дают конструкцию двух, вообще говоря, различных систем базисных векторов из этого подпространства¹⁾:

a) $j' + j = g'$, $g' + j'' = J$ (рис. 28, а) — векторы $|j'i\rangle |g'\rangle |j''\rangle |JM\rangle$

$$|(j'i)\rangle |g'\rangle |j''\rangle |JM\rangle = \sum_{\substack{mm'm'' \\ \mu'}} |mm'm''\rangle \langle j'jm'm | g'\mu' \rangle \langle g'j''\mu'm'' | JM \rangle.$$

б) $j + j'' = g''$, $j' + g'' = J$ (рис. 28, б) — векторы $|j', (jj'')\rangle |g''\rangle |JM\rangle$

$$|j', (jj'')\rangle |g''\rangle |JM\rangle = \sum_{\substack{mm'm'' \\ \mu''}} |mm'm''\rangle \langle j''jm'' | g''\mu'' \rangle \langle j'g''m'\mu'' | JM \rangle.$$

Можно перейти от одной системы к другой с помощью некоторого унитарного преобразования.

Определение «6j»-символов Вигнера $\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\}$.

¹⁾ Здесь важен порядок, в котором складываются различные векторы. При изменении порядка, например, векторов j и j'' при сложении по схеме (а) меняется знак результирующего вектора.

Эти символы связаны с коэффициентами упомянутого унитарного преобразования посредством соотношений

$$\langle j', (jj'') g''; JM | (j'j) g', j''; J'M' \rangle =$$

$$= \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \sqrt{(2g'+1)(2g''+1)} (-1)^{J+j'+j''+J} \left\{ \begin{matrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{matrix} \right\}, \quad (28)$$

$$| (j'j) g', j''; JM \rangle = \sum_{g''} | j', (jj'') g''; JM \rangle \times$$

$$\times \sqrt{(2g'+1)(2g''+1)} (-1)^{J+j'+j''+J} \left\{ \begin{matrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{matrix} \right\}, \quad (29)$$

W -коэффициенты Рака¹⁾). Рака использовал коэффициенты W , которые совпадают с «б/»-символами с точностью до знака:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\} = (-1)^{j_1+j_2+j_3+J_1+J_2} W (j_1 j_2 J_2 J_1; j_3 J_3). \quad (30)$$

Присоединенные коэффициенты. В выражениях для угловых распределений иногда встречаются коэффициенты $Z(LJL'J'; j\lambda)$ и $F_\lambda(LL'J_1J_2)$, для которых имеются подробные таблицы и которые определяются соотношениями:

$$Z(LJL'J'; j\lambda) = (-1)^{J+J'+\frac{1}{2}(L'-L+\lambda)} \times$$

$$\times \sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2J+1)(2J'+1)(2\lambda+1)} \left(\begin{matrix} L & L' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left\{ \begin{matrix} L & L' & \lambda \\ J' & J & j \end{matrix} \right\}. \quad (31a)$$

$$F_\lambda(LL'J_1J_2) = (-1)^{J_1+J_2-1} \times$$

$$\times \sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2J_2+1)(2\lambda+1)} \left(\begin{matrix} L & L' & \lambda \\ 1 & -1 & 0 \end{matrix} \right) \left\{ \begin{matrix} L & L' & \lambda \\ J_2 & J_2 & J_1 \end{matrix} \right\}. \quad (31b)$$

Коэффициенты $F_\lambda(LL'J_1J_2)$ используются главным образом в тех случаях, когда в результате реакции появляются частицы со спином 1 и не регистрируется поляризация.

Присоединенный тетраэдр для «б/»-символов. Чтобы избежать путаницы при обращении с W -коэффициентами и «б/»-символами, удобно связать с каждым символом $\left\{ \begin{matrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{matrix} \right\}$ некоторый тетраэдр, каждое ребро которого представляет один из шести моментов импульса, входящих в этот символ (рис. 29). В этом представлении каждая пара противолежащих ребер ассоциируется с двумя моментами данного столбца, а три момента первой строки соответствуют ребрам одной из граней тетраэдра.

Кроме того, каждая грань соответствует трем моментам импульса, один из которых получен с помощью векторного сложения двух других, как это следует из определения «б/»-символов.

¹⁾ Racah, loc. cit. Знаковый множитель исчезает из двух предыдущих соотношений при подстановке W вместо «б/»-символов. Однако «б/»-символы имеют более простые соотношения симметрии (см. § 7).

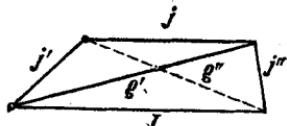


Рис. 29. Тетраэдр, ассоциированный с символом

$$\left\{ \begin{matrix} j' & j & g' \\ j'' & J & g'' \end{matrix} \right\}.$$

§ 7. Основные свойства « $6j$ »-символов

Вещественность. Все « $6j$ »-символы вещественны.
Правила отбора. Для того чтобы

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\} \neq 0,$$

три момента импульса, составляющие каждую грань тетраэдра, должны быть таковы, чтобы каждой из них был векторной суммой двух других. Иными словами, необходимо, чтобы элементы каждой тройки

$$(j_1 j_2 j_3), (j_1 J_2 J_3), (J_1 j_2 J_3), (J_1 J_2 j_3);$$

(i) удовлетворяли неравенствам треугольника;

(ii) имели целочисленную сумму

(N. B. Отметим, что каждое из шести j — целое, или три j одной и той же грани — целые, или же два j , соответствующие противоположным ребрам, — целые числа.)

Соотношение симметрии. « $6j$ »-символы инвариантны:

(i) относительно перестановки столбцов, т. е.

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ J_2 & J_1 & J_3 \end{matrix} \right\};$$

(ii) относительно перестановки двух элементов первой строки с двумя соответствующими элементами второй строки, т. е.

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ j_1 & j_2 & J_3 \end{matrix} \right\}.$$

Иначе говоря, для задания « $6j$ »-символа достаточно задать шесть моментов импульса и их относительное расположение на присоединенном тетраэдре.

Основные соотношения между « $6j$ »-символами и коэффициентами К.—Г. Следующие соотношения связывают символ $\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\}$ с коэффициентами К.—Г., которые составлены из троек $(j_1 j_2 j_3)$, $(j_1 J_2 J_3)$, $(J_1 j_2 J_3)$, $(J_1 J_2 j_3)$, соответствующих четырем граням присоединенного тетраэдра:

$$\sum_{M_1 M_2 M_3} (-1)^{J_1 + J_2 + J_3 + M_1 + M_2 + M_3} \times \times \left(\begin{matrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ M_1 & -M_2 & m_3 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} J_2 & J_3 & j_1 \\ M_2 & -M_3 & m_1 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} J_3 & J_1 & j_2 \\ M_3 & -M_1 & m_2 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m'_3 \end{matrix} \right) = \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3} \frac{1}{2j_3 + 1} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\}. \quad (32)$$

(N. B. Фактически суммирование сводится к суммированию по двум индексам, поскольку M и m связаны.)

$$\sum_{M_1 M_2 M_3} (-1)^{J_1 + J_2 + J_3 + M_1 + M_2 + M_3} \left(\begin{matrix} J_1 & J_2 & j_3 \\ M_1 & -M_2 & m_3 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} J_2 & J_3 & j_1 \\ M_2 & -M_3 & m_1 \end{matrix} \right) \times \times \left(\begin{matrix} J_3 & J_1 & j_2 \\ M_3 & -M_1 & m_2 \end{matrix} \right) = \left(\begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{matrix} \right) \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\}. \quad (33)$$

(N.B. Здесь индекс суммирования только один.)

$$\sum_{M_3} (-1)^{j_1+j_2-m_1-M_1} \begin{pmatrix} j_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & M_2 & -M_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_3 & j_2 & J_1 \\ M_3 & m_2 & -M_1 \end{pmatrix} = \\ = \sum_{j_3, m_3} (2j_3 + 1) \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\} \left(\begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} J_3 & J_2 & J_1 \\ m_3 & M_2 & -M_1 \end{matrix} \right). \quad (34)$$

(N.B. Суммы по M_3 и m_3 имеют всего лишь одно слагаемое.)

Соотношения Рака — Эллиота и соотношение ортогональности:

$$\sum_x (-1)^{2x} (2x + 1) \left\{ \begin{matrix} a & b & x \\ a & b & f \end{matrix} \right\} = 1, \quad (35a)$$

$$\sum_x (-1)^{a+b+x} (2x + 1) \left\{ \begin{matrix} a & b & x \\ b & a & f \end{matrix} \right\} = \delta_{fj} \sqrt{(2a+1)(2b+1)}, \quad (35b)$$

$$\sum_x (2x + 1) \left\{ \begin{matrix} a & b & x \\ c & d & f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} c & d & x \\ a & b & g \end{matrix} \right\} = \delta_{fg} \frac{1}{2f+1}, \quad (35c)$$

$$\sum_x (-1)^{f+g+x} (2x + 1) \left\{ \begin{matrix} a & b & x \\ c & d & f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} c & d & x \\ b & a & g \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} a & d & f \\ b & c & g \end{matrix} \right\}, \quad (35d)$$

$$\sum_x (-1)^{a+b+c+d+e+f+g+h+x+l} (2x + 1) \left\{ \begin{matrix} a & b & x \\ c & d & g \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} c & d & x \\ e & f & h \end{matrix} \right\} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} e & f & x \\ b & a & j \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} g & h & j \\ e & a & d \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} g & h & j \\ f & b & c \end{matrix} \right\}. \quad (35d)$$

§ 8. Формула Рака, таблицы

Ф о р м у л а Р а к а :

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\} = [\Delta(j_1 j_2 j_3) \Delta(J_1 J_2 J_3) \Delta(J_1 j_2 J_3) \Delta(J_1 J_2 j_3)]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \sum_t \frac{(-1)^t (t+1)!}{A(t, j_1, j_2, j_3, J_1, J_2, J_3)}, \quad (36)$$

где

$$A(t, j_1, \dots, J_3) = (t - j_1 - j_2 - j_3)! (t - j_1 - J_2 - J_3)! \times \\ \times (t - J_1 - j_2 - J_3)! (t - J_1 - J_2 - j_3)! (j_1 + j_2 + J_1 + J_2 - t)! \times \\ \times (j_2 + j_3 + J_2 + J_3 - t)! (j_3 + j_1 + J_3 + J_1 - t)!,$$

Определение $\Delta(abc)$ и соглашение о суммировании то же самое, что и в формуле (22). Число слагаемых в \sum_t равно $1 + \sigma$, где σ — наименьшее из двенадцати чисел:

$$\begin{aligned} j_1 + j_2 - j_3, & \quad j_1 + J_2 - J_3, \quad J_1 + j_2 - J_3, \quad J_1 + J_2 - j_3, \\ j_2 + j_3 - j_1, & \quad J_2 + J_3 - j_1, \quad j_2 + J_3 - J_1, \quad J_2 + j_3 - J_1, \\ j_3 + j_1 - j_2, & \quad J_3 + j_1 - J_2, \quad J_3 + J_1 - j_2, \quad j_3 + J_1 - J_2. \end{aligned}$$

Специальные случаи:

(i) одно из j равно нулю

$$\left\{ \begin{matrix} j & j' & 0 \\ J & J' & g \end{matrix} \right\} = (-1)^{j+J+g} \frac{\delta_{jj'} \delta_{JJ'}}{\sqrt{(2j+1)(2J+1)}} (|j-J| \leq g \leq j+J); \quad (37)$$

(ii) одно из j равно $\frac{1}{2}$

$$\left\{ \begin{matrix} j & j+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & J+\frac{1}{2} & g+\frac{1}{2} \end{matrix} \right\} = (-1)^{1+g+j+J} \left[\frac{(1+g+j-J)(1+g-j+J)}{(2j+1)(2j+2)(2J+1)(2J+2)} \right]^{\frac{1}{2}} (|j-J| \leq g \leq j+J); \quad (38)$$

$$\left\{ \begin{matrix} j & j+\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J+\frac{1}{2} & J & g \end{matrix} \right\} = (-1)^{1+g+j+J} \left[\frac{(1-g+j+J)(2+g+j+J)}{(2j+1)(2j+2)(2J+1)(2J+2)} \right]^{\frac{1}{2}} (|j-J| \leq g \leq j+J). \quad (39)$$

Раздел III. «9j»-СИМВОЛЫ

§ 9. Определение и основные свойства

Сложение четырех моментов импульса и определение «9j»-символа. Пусть полный момент импульса J относится к системе, составленной из четырех отдельных систем, моменты которых соответственно равны j_1, j_2, j_3, j_4 :

$$J = j_1 + j_2 + j_3 + j_4.$$

В $\prod_{i=1}^4 (2j_i + 1)$ -мерном пространстве, натянутом на векторы

$$|m_1 m_2 m_3 m_4\rangle = \prod_{i=1}^4 |j_i m_i\rangle \quad (j_i - \text{const}, m_i \text{ меняются}),$$

следующие две схемы сложения ведут к двум различным системам базисных векторов подпространства с моментом импульса (JM):

a) $j_1 + j_2 = J_{12}, \quad j_3 + j_4 = J_{34}, \quad J_{12} + J_{34} = J,$

векторы $| (j_1 j_2) J_{12}, (j_3 j_4) J_{34}; JM \rangle;$

b) $j_1 + j_3 = J_{13}, \quad j_2 + j_4 = J_{24}, \quad J_{13} + J_{24} = J,$

векторы $| (j_1 j_3) J_{13}, (j_2 j_4) J_{24}; JM \rangle.$

«9j»-символы Вигнера при этом определяются как коэффициенты унитарного преобразования от одного базиса к другому:

$$\langle (j_1 j_2) J_{12}, (j_3 j_4) J_{34}; JM | (j_1 j_3) J_{13}, (j_2 j_4) J_{24}; J' M' \rangle =$$

$$= \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \sqrt{(2J_{12} + 1)(2J_{34} + 1)(2J_{13} + 1)(2J_{24} + 1)} \times \\ \times \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\}. \quad (40a)$$

Можно также определить «9j»-символы следующим образом:

$$\langle [(j_1 j_2) J_{12}, j_3] J_{123} j_4; JM | [(j_4 j_2) J_{42}, j_3] J_{423} j_1; J' M' \rangle =$$

$$= (-1)^{j_{423} + j_1 - J_{123} - j_4} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \times \\ \times \sqrt{(2J_{12} + 1)(2J_{123} + 1)(2J_{42} + 1)(2J_{423} + 1)} \left\{ \begin{array}{ccc} j_2 & J_{12} & j_1 \\ J_{42} & j_3 & J_{423} \\ j_4 & J_{123} & J \end{array} \right\}. \quad (40b)$$

Используется также обозначение

$$X \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right) = \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\}.$$

Связь «9j»-символов с «3j»-символами:

$$\left(\begin{array}{ccc} J_{13} & J_{24} & J \\ M_{13} & M_{24} & M \end{array} \right) \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\} = \sum_{m_1 m_2 m_3 m_4} \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ m_1 & m_2 & M_{12} \end{array} \right) \times \\ \times \left(\begin{array}{ccc} j_3 & j_4 & J_{34} \\ m_3 & m_4 & M_{34} \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} j_1 & j_3 & J_{13} \\ m_1 & m_3 & M_{13} \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} j_2 & j_4 & J_{24} \\ m_2 & m_4 & M_{24} \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} J_{12} & J_{34} & J \\ M_{12} & M_{34} & M \end{array} \right). \quad (40b)$$

Соотношения симметрии. Символ

$$\left\{ \begin{array}{ccc} J_1 & J_2 & J_3 \\ J_4 & J_5 & J_6 \\ J_7 & J_8 & J_9 \end{array} \right\}$$

(i) при перестановке двух строк или двух столбцов умножается на $(-1)^R$, где $R = \sum_{i=1}^9 J_i$;

(ii) инвариантен при зеркальных отражениях относительно диагоналей.

Соотношение ортогональности:

$$\sum_{J_{13} J_{24}} (2J_{13} + 1)(2J_{24} + 1) \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J'_{12} \\ j_3 & j_4 & J'_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\} = \frac{\delta_{J_{12} J'_{12}} \delta_{J_{34} J'_{34}}}{(2J_{12} + 1)(2J_{34} + 1)}.$$

Выражение «9j»-символов через «6j»-символы:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\} = \sum_g (-1)^{2g} (2g + 1) \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ J_{34} & J & g \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_3 & j_4 & J_{34} \\ j_2 & g & J_{24} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} J_{13} & J_{24} & J \\ g & j_1 & j_3 \end{array} \right\}. \quad (41)$$

Случай, когда одно из j равно нулю:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & f \\ j_3 & j_4 & f' \\ g & g' & 0 \end{Bmatrix} = \delta_{ff'} \delta_{gg'} \frac{(-1)^{j_1+j_2+f+g}}{\sqrt{(2f+1)(2g+1)}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & f \\ j_4 & j_3 & g \end{Bmatrix}. \quad (42)$$

Раздел IV. МАТРИЦЫ ВРАЩЕНИЯ

§ 10. Вращения. Операторы вращения. $R^{(J)}$ -матрицы

$\mathcal{R}_u(\phi)$ — вращение на угол ϕ вокруг оси u ,

$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ — вращение на углы Эйлера (α, β, γ) , (43)

$$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{R}_z(\gamma) \mathcal{R}_u(\beta) \mathcal{R}_z(\alpha).$$

Операции, написанные в правой части равенства, выполняются в порядке справа налево (см. рис. 30).

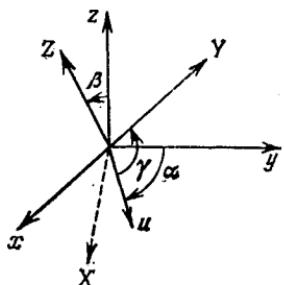


Рис. 30. Углы Эйлера $\alpha = (Oy, Ou)$, $\beta = (Oz, OZ)$, $\gamma = (Ou, OY)$.

Присоединенная матрица: матрица преобразования координат векторов (обозначена той же буквой \mathcal{R} , что и само вращение).

Если $V(V_1, V_2, V_3)$ — некоторый вектор, а $V'(V'_1, V'_2, V'_3)$ — его преобразование при вращении \mathcal{R} , то имеем:

$$V'_i = \mathcal{R}_{ij} V_j, \quad \mathcal{R}_{ij} — \text{элементы присоединенной матрицы.}$$

(Следствие. Если A_i есть преобразование единичного вектора a_i вдоль j -й оси ($j = 1, 2, 3$), то получим:

$$A_i = \mathcal{R}[a_i] = a_i \mathcal{R}_{ij}, \quad \mathcal{R}_{ij} = (a_i, A_j). \\ \mathcal{R}^* = \mathcal{R}, \quad \mathcal{R} = \mathcal{R}^{-1}, \quad \det \mathcal{R} = 1. \quad (44)$$

$$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) =$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \gamma \cos \beta \cos \alpha - \sin \gamma \sin \alpha & -\sin \gamma \cos \beta \cos \alpha - \cos \gamma \sin \alpha & \sin \beta \cos \alpha \\ \cos \gamma \cos \beta \sin \alpha + \sin \gamma \cos \alpha & -\sin \gamma \cos \beta \sin \alpha + \cos \gamma \cos \alpha & \sin \beta \sin \alpha \\ -\cos \gamma \sin \beta & \sin \gamma \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (45)$$

Оператор вращения. Унитарный оператор R , примененный к вектору $| \rangle$, задает его преобразование при вращении \mathcal{R}

$$\mathcal{R}[| \rangle] = R | \rangle, \quad R^\dagger R = R R^\dagger = 1. \quad (46)$$

Если Q — наблюдаемая квантовой системы, то

$$\mathcal{R}[Q] = RQR^{-1}. \quad (47)$$

Если $B = (B_x, B_y, B_z)$ есть векторный оператор, то ($B_i = Ba_i$)

$$\mathcal{R}[B_i] = RB_iR^{-1} = (B, A_i) = \tilde{\mathcal{R}}_{ij}B_j. \quad (48)$$

(N. B. Здесь фигурирует преобразование, обратное к \mathcal{R} , а не само \mathcal{R} .)

Применение (48) к преобразованию компонент момента импульса J при вращении $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ дает

$$RJ_{\pm}R^{-1} = e^{\mp i\gamma} \left[\frac{1 + \cos \beta}{2} e^{\mp i\alpha} J_{\pm} - \frac{1 - \cos \beta}{2} e^{\pm i\alpha} J_{\mp} - \sin \beta J_z \right], \quad (49a)$$

$$RJ_zR^{-1} = \frac{1}{2} \sin \beta (e^{-i\alpha} J_+ + e^{i\alpha} J_-) + \cos \beta J_z. \quad (49b)$$

Выражение через составляющие полного момента импульса J . Бесконечно малое вращение:

$$R_u(\varepsilon) = 1 - i\varepsilon(J_u) \quad (\varepsilon \ll 1). \quad (50)$$

Конечные вращения:

$$R_u(\varphi) = e^{-i\varphi(J_u)}, \quad (51)$$

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}. \quad (52)$$

Соответствие между вращениями и операторами вращения. Взаимнооднозначное соответствие, существующее между бесконечно малыми вращениями и операторами R , близкими к 1, может не иметь места в случае конечных вращений.

В общем случае любому конечному вращению \mathcal{R} соответствуют два оператора R' и R'' , удовлетворяющие уравнению

$$R'' = DR'.$$

где оператор D определяется так:

$$D = \begin{cases} +1, & \text{если } J \text{ — целое,} \\ -1, & \text{если } J \text{ — полуцелое.} \end{cases}$$

Для равенства $R' = R''$ необходимо, чтобы пространство векторов состояния было образовано векторами, отвечающими только целым значениям J .

$$R_u(2\pi) = D, \quad R_u(4\pi) = 1.$$

Пусть $(\alpha\beta\gamma)$ и $(\alpha_1\beta_1\gamma_1)$ — два набора углов Эйлера, определяющих одно и то же вращение (уравнение (XIII. 42)). Тогда

$$R(\alpha_1\beta_1\gamma_1) = D^{n_a+n_b+n_c} R(\alpha\beta\gamma). \quad (53)$$

Матрицы вращений $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$. Это матрицы порядка $(2J+1)$ с элементами

$$R_{MM'}^{(J)} = \langle JM | R(\alpha\beta\gamma) | JM' \rangle = \langle JM | e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z} | JM' \rangle. \quad (54)$$

Векторы $|JM\rangle$ (J фиксировано, $M = -J, \dots, +J$) есть собственные векторы операторов J^2 и J_z , которые связаны друг с другом соотношениями (6).

Матрица $r^{(J)}(\beta)$:

$$r^{(J)}(\beta) = R^{(J)}(0, \beta, 0),$$

$$r_{MM'}^{(J)}(\beta) = \langle JM | e^{-i\beta J_y} | JM' \rangle, \quad (55)$$

$$R_{MM'}^{(J)}(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha M_x} r_{MM'}^{(J)}(\beta) e^{-i\gamma M_z}. \quad (56)$$

§ 11. Основные свойства матриц $R^{(J)}$

Обратная матрица:

$$[R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)]^{-1} = R^{(J)}(-\gamma, -\beta, -\alpha). \quad (57)$$

Определитель:

$$\det R^{(J)} = 1. \quad (58)$$

Вращение на 2π :

$$R_u^{(J)}(2\pi) = (-1)^{2J}. \quad (59)$$

Каждому набору углов Эйлера соответствует единственная матрица $R^{(J)}$.

Каждому вращению \mathcal{R} соответствует единственная матрица $R^{(J)}$, если J — целое, и две матрицы, отличающиеся знаком, если J — полуцелое.

Вещественность: $r^{(J)}(\beta)$ — вещественная матрица.

Вращения на угол π вокруг координатных осей. Обозначения: X, Y, Z — операторы вращения на угол $\pm\pi$ вокруг осей Ox, Oy, Oz соответственно:

$$X^2 = Y^2 = Z^2 = XYZ = (-1)^{2J}. \quad (60)$$

$$X | JM \rangle = e^{-i\pi J} | J - M \rangle, \quad X_{MM'}^{(J)} = e^{-i\pi J} \delta_{M-M'}. \quad (61)$$

$$Y | JM \rangle = (-1)^{J-M} | J - M \rangle, \quad Y_{MM'}^{(J)} = (-1)^{J+M} \delta_{M-M'}. \quad (62)$$

$$Z | JM \rangle = e^{-i\pi M} | JM \rangle, \quad Z_{MM'}^{(J)} = e^{-i\pi M} \delta_{MM'}. \quad (63)$$

Преобразование оператора момента при вращении Y :

$$YJ_x Y^\dagger = -J_x, \quad YJ_y Y^\dagger = J_y, \quad YJ_z Y^\dagger = -J_z, \quad YJ_\pm Y^\dagger = -J_\mp.$$

Следовательно,

$$YR^{(J)}Y^\dagger = R^{(J)*}. \quad (64)$$

Соотношения симметрии, следующие из (62) и (64):

$$r_{MM'}^{(J)} = (-1)^{M-M'} r_{-M-M'}^{(J)}. \quad (65)$$

$$R_{MM'}^{(J)*} = (-1)^{M-M'} R_{-M-M'}^{(J)}. \quad (66)$$

Унитарность и соотношения ортогональности: $R^{(J)-1} = R^{(J)\dagger}$, отсюда получаем соотношения унитарности

$$\sum_M R_{MM'}^{(J)} R_{MM''}^{(J)*} = \delta_{M'M''}, \quad \sum_M R_{M'M}^{(J)} R_{M''M}^{(J)*} = \delta_{M'M''}. \quad (67)$$

Используя соотношения симметрии, получаем соотношения ортогональности

$$\begin{aligned} \sum_M (-1)^{J+M} R_{MM'}^{(J)} R_{-M-M''}^{(J)} &= (-1)^{J+M'} \delta_{M'M''}, \\ \sum_M (-1)^{J+M} R_{M'M}^{(J)} R_{-M''-M}^{(J)} &= (-1)^{J+M'} \delta_{M'M''}. \end{aligned} \quad (68)$$

Формулы композиции и редукции. В следующих формулах матрицы $R^{(I_1)}, R^{(I_2)}, R^{(J)}$ относятся к одним и тем же углам Эйлера.

Разложение тензорного произведения $R^{(I_1)} \otimes R^{(I_2)}$

$$R_{m_1 m_1}^{(I_1)} R_{m_2 m_2}^{(I_2)} = \sum_{J=|I_1-I_2|}^{|I_1+I_2|} \sum_{M, M'=-J}^{+J} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle R_{MM'}^{(J)} \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | JM' \rangle. \quad (69)$$

Формула композиции:

$$R_{MM'}^{(J)} = \sum_{m_1, m_1 = -j_1}^{+j_1} \sum_{m_2, m_2 = -j_2}^{+j_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle R_{m_1 m_1}^{(j_1)} R_{m_2 m_2}^{(j_2)} \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | JM' \rangle. \quad (70)$$

В частности, если $J = j_1 + j_2$, то

$$R_{JJ}^{(J)} = R_{j_1 j_1}^{(j_1)} R_{j_2 j_2}^{(j_2)}, \quad R_{j_1=j}^{(j_1)} = R_{j_1-j_1}^{(j_1)} R_{j_2-j_2}^{(j_2)}. \quad (71)$$

§ 12. Вычисление матричных элементов $R_{MM'}^{(J)}$

Основные методы вычисления. Если матрица $r^{(J)}(\beta)$ известна, то матрицу $R^{(J)}(\alpha\gamma)$ легко получить из соотношения (56). Матрица $r^{(J)}$ вещественная, унитарная, обладает свойством симметрии (65)

$$r_{MM'}^{(J)}(\beta) = r_{M'M}^{(J)}(-\beta) = (-1)^{M-M'} r_{-M-M'}^{(J)}(\beta).$$

Поэтому нужно только знать матричные элементы, соответствующие $M \geq 0$ и $M \geq M'$, чтобы получить все остальные. Для этого мы можем:

а) вычислить их непосредственно с помощью приводимой ниже формулы Вигнера;

б) получить их с помощью формулы (70) для композиции $r^{(J)} \circ r^{(I_2)}$ с меньшими значениями момента импульса; в частности, все матрицы $r^{(J)}$ могут быть получены одна из другой, начиная с $r^{(1/2)}$;

в) получить их друг из друга, используя рекуррентные соотношения, вытекающие из уравнений (49).

Формула Вигнера. Введем обозначения

$$\xi \equiv \cos \frac{1}{2} \beta, \quad \eta \equiv \sin \frac{1}{2} \beta.$$

Получаем

$$\begin{aligned} r_{MM'}^{(J)} = \sum_t (-1)^t \frac{\sqrt{(J+M)!(J-M)!(J+M')!(J-M')!}}{(J+M-t)!(J-M'-t)! t! (t-M+M')!} \times \\ \times \xi^{2J+M-M'-2t} \eta^{2t-M+M'}. \end{aligned} \quad (72)$$

В данном случае при суммировании используется то же соглашение, что и в формуле (21). Число членов в \sum_t равно $1 + \tau$, где τ — наименьшее из четы-

рех чисел $J \pm M$, $J \pm M'$. По отношению к переменным ξ и η выражение $r_{MM}^{(J)}$ есть однородный полином степени $2J$.

Частные случаи формулы Вигнера:

$$\begin{aligned} r_{MJ}^{(J)} &= (-1)^{J-M} r_{JM}^{(J)} = r_{-J-M}^{(J)} = (-1)^{J-M} r_{-M-J}^{(J)} = \\ &= \sqrt{\frac{(2J)!}{(J+M)!(J-M)!}} \xi^{J+M} \eta^{J-M}, \quad (73) \\ r_{JJ}^{(J)} &= r_{-J-J}^{(J)} = \xi^{2J}, \quad r_{J-J}^{(J)} = (-1)^{2J} r_{-J-J}^{(J)} = \eta^{2J}. \end{aligned}$$

Случай $J = 1/2$:

$$R\left(\frac{1}{2}\right)(\alpha\beta\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{+\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{+\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{+\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{+\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix} \quad (74)$$

(в этом выражении верхняя и нижняя строки соответствуют $M = \frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$, этим же значениям соответствуют левый и правый столбцы).

§ 13. Целые значения J ($J = l$) и преобразование сферических функций при вращениях

Случай $l = 1$

$$r^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{2}\sqrt{2} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{2}\sqrt{2} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{2}\sqrt{2} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{2}\sqrt{2} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}. \quad (75)$$

(В этом выражении расположенные сверху вниз строки соответствуют $M = +1, 0, -1$; расположенные слева направо столбцы соответствуют тем же значениям M .)

Преобразование сферических функций при вращении. Пусть $\omega = (\theta, \varphi)$ — сферические координаты единичного вектора v относительно координатной системы $Oxyz$.

$$(v_1 = \sin \theta \cos \varphi, v_2 = \sin \theta \sin \varphi, v_3 = \cos \theta).$$

$\Omega = (\Theta, \Phi)$ — сферические координаты того же вектора v относительно системы $OXYZ$.

$(\alpha\beta\gamma)$ — углы Эйлера вращения, переводящего систему $Oxyz$ в систему $OXYZ^1$.

¹⁾ Для устранения произвола в выборе углов Эйлера мы потребуем выполнения дополнительных соотношений

$$0 \leq \alpha \leq 2\pi, \quad 0 \leq \beta \leq \pi, \quad -\pi \leq \gamma \leq +\pi.$$

(При таком выборе система $OuzZ$ является правой.) Тогда:

- (i) сферические координаты оси OZ в системе $Oxyz$ есть (β, α) ;
- (ii) сферические координаты оси Oz в системе $OXYZ$ — $(\beta, \pi - \gamma)$.

Θ и Φ — однозначные функции от θ и φ , в которые α , β , γ входят в качестве параметров.

$\omega_1 = (\theta_1, \varphi_1)$ — сферические углы в системе $Oxyz$ вектора $v_1 = R^{-1}v$, который при вращении $R(\alpha\beta\gamma)$ преобразуется в вектор v . Справедливо равенство $\omega_1 = \Omega$.

Сферическая функция $Y_l^m(\omega)$ соответствует кет-вектору $|lm\rangle$ в представлении $\{\omega\}$:

$$Y_l^m(\omega) = \langle \omega | lm \rangle.$$

Вращение $R(\alpha\beta\gamma)$ преобразует этот вектор в вектор $R(\alpha\beta\gamma)|lm\rangle$, составляющие которого в направлении вектора v равны составляющим $|lm\rangle$ по направлению v_1 ,

$$Y_l^m(\Omega) = \langle \omega_1 | lm \rangle = \langle \omega | R | lm \rangle;$$

отсюда следует формула преобразования сферических функций при вращении

$$Y_l^m(\Omega) = \sum_{m'=-l}^{+l} Y_l^{m'}(\omega) R_{m'm}^{(l)}(\alpha\beta\gamma). \quad (76)$$

Скалярное произведение и теорема сложения. Пусть v и v' — два единичных вектора, ω и ω' — соответствующие им сферические координаты относительно системы $Oxyz$, Ω , Ω' — сферические координаты тех же векторов относительно системы $OXYZ$. Соотношение (76) и унитарность дают

$$\sum_m Y_l^m(\Omega) Y_l^{m*}(\Omega') = \sum_m Y_l^m(\omega) Y_l^{m*}(\omega'). \quad (77)$$

В частности, если v' направлен вдоль оси OZ , то получаем теорему сложения

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_l^0(\Omega) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \Theta) = \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\beta, \alpha). \quad (78)$$

Выражение $r_{mm'}^{(l)}$ через $\cos \beta$ и $\sin \beta$. Для l целых:

- (i) если $(-1)^{m+m'} = +1$, то $r_{mm'}^{(l)}$ — полином по $\cos \beta$ степени l ;
- (ii) если $(-1)^{m+m'} = -1$, то $r_{mm'}^{(l)} = \sin \beta \times$ (полином по $\cos \beta$ степени $(l-1)$).

В частности,

$$r_{ml}^{(l)}(\beta) = \sqrt{\frac{(2l)!}{(l+m)!(l-m)!}} \frac{1}{2^l} (1 + \cos \beta)^m \sin^{l-m} \beta. \quad (79)$$

Выражения для $R_{mm'}^{(l)}$ при m или $m' = 0$:

$$R_{m0}^{(l)}(\alpha\beta\gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^{m*}(\beta, \alpha), \quad (80a)$$

$$R_{0m}^{(l)}(\alpha\beta\gamma) = (-1)^m \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^{m*}(\beta, \gamma), \quad (80b)$$

$$R_{00}^{(l)}(\alpha\beta\gamma) = P_l(\cos \beta). \quad (80c)$$

Раздел V. НЕПРИВОДИМЫЕ ТЕНЗОРНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

§ 14. Определение и основные свойства

Определение. Тензорный оператор — совокупность операторов, линейно преобразующихся друг через друга при вращении.

Неприводимый тензорный оператор — набор из $(2k+1)$ операторов $T_q^{(k)}$ ($q = -k, \dots, +k$) представляет собой, по определению, стандартные компоненты неприводимого тензорного оператора $\mathbf{T}^{(k)}$ порядка k , если при вращении они преобразуются по формуле

$$R T_q^{(k)} R^{-1} = \sum_{q'=-k}^{+k} T_{q'}^{(k)} R_{q'q}. \quad (81)$$

Векторный оператор — неприводимый тензорный оператор порядка 1. Если V_x, V_y, V_z — его компоненты относительно осей $Oxyz$, то стандартными компонентами являются

$$V_+ = -\frac{1}{2} \sqrt{2} (V_x + iV_y), \quad V_0 = V_z, \quad V_- = \frac{1}{2} \sqrt{2} (V_x - iV_y).$$

Скалярный оператор — неприводимый тензорный оператор порядка 0. Коммутационные соотношения с J

$$[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}, \quad (82a)$$

$$[J_z, T_q^{(k)}] = q T_q^{(k)}. \quad (82b)$$

Эрмитово сопряжение¹⁾

$$\mathbf{S}^{(k)} = \mathbf{T}^{(k)\dagger}, \text{ если } S_q^{(k)} = (-1)^q T_{-q}^{(k)\dagger}. \quad (83)$$

Основное свойство (Вигнер — Эккарт)

$$\begin{aligned} \langle \tau J M | T_q^{(k)} | \tau' J' M' \rangle &= \frac{(-1)^{2k}}{\sqrt{2J+1}} \langle \tau J \| \mathbf{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle \langle J' k M' q | JM \rangle = \\ &= (-1)^{J-M} \langle \tau J \| \mathbf{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (84)$$

По определению $\langle \tau J \| \mathbf{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle$ — редуцированный матричный элемент²⁾. Сопряженное соотношение (k — целое)

$$\langle \tau J \| \mathbf{T}^{(k)} \| \tau' J' \rangle^* = (-1)^{J'-J} \langle \tau' J' \| \mathbf{T}^{(k)\dagger} \| \tau J \rangle. \quad (85)$$

¹⁾ Мы принимаем здесь определение Рака (loc. cit.). При таком определении сферические функции Y_l^m образуют эрмитов тензорный оператор порядка l . Отметим, что тензорное произведение (определенное ниже) коммутирующих неприводимых эрмитовых тензорных операторов в общем случае неэрмитово. Для того, чтобы оно стало эрмитовым, мы должны модифицировать определение эрмитова сопряжения и заменить $(-1)^q$ на $(-1)^{k+q}$. При новом определении сферические функции нечетного порядка антиэрмитовы.

²⁾ N. B. Наше определение эрмитова сопряжения применимо также к тензорному оператору полуцелого порядка, если множитель $(-1)^q$ записывать как $e^{i\pi q}$.

²⁾ Определение принято такое же, как у Рака (loc. cit.).

Специальные тензорные операторы.
Единичный оператор

$$\langle aJ \parallel a'J' \rangle = \delta_{aa'}\delta_{JJ'}\sqrt{2J+1}.$$

Оператор полного момента импульса

$$\langle aJ \parallel J \parallel a'J' \rangle = \delta_{aa'}\delta_{JJ'}\sqrt{J(J+1)(2J+1)}.$$

§ 15. Тензорное произведение неприводимых тензорных операторов¹⁾

Определение. Пусть $\mathbf{T}^{(k_1)}, \mathbf{U}^{(k_2)}$ — неприводимые тензорные операторы порядка k_1, k_2 соответственно. По определению $\mathbf{T}^{(k_1)} \otimes \mathbf{U}^{(k_2)}$ — набор $(2k_1 + 1)(2k_2 + 1)$ операторов $T_{q_1}^{(k_1)}U_{q_2}^{(k_2)}$ (не обязательно линейно независимых). Это (приводимый) тензорный оператор.

$V_Q^{(K)} = [\mathbf{T}^{(k_1)} \otimes \mathbf{U}^{(k_2)}]_K$, тензорное произведение порядка K , есть неприводимый тензорный оператор порядка K с компонентами

$$V_Q^{(K)} = \sum_{q_1 q_2} \langle k_1 k_2 q_1 q_2 | KQ \rangle T_{q_1}^{(k_1)} U_{q_2}^{(k_2)} \quad (86)$$

(обязательно должны выполняться неравенства $|k_1 - k_2| \leq K \leq k_1 + k_2$).

Если $k_1 = k_2 = k$, то определено скалярное произведение²⁾

$$S = (\mathbf{T}^{(k)} \mathbf{U}^{(k)}) = \sum_q (-1)^q T_q^{(k)} U_{-q}^{(k)}. \quad (87)$$

$$(N. B. S = (-1)^k \sqrt{2k+1} V_0^{(0)}.)$$

Выражение для редуцированных матричных элементов. Допустим, что мы имеем квантовую систему, состоящую из двух систем 1 и 2 с моментами импульса J_1 и J_2 соответственно ($J = J_1 + J_2$).

$|\tau_1 J_1 M_1\rangle$ — базисные векторы системы 1,

$|\tau_2 J_2 M_2\rangle$ — базисные векторы системы 2.

$\mathbf{T}^{(k_1)}, \mathbf{U}^{(k_2)}$ — неприводимые тензорные операторы, действующие только на переменные систем 1 и 2 соответственно.

$V^{(K)}$ — тензорное произведение порядка K в соответствии с определением (86).

В стандартном представлении $\{\tau_1 \tau_2 J_1^2 J_2^2 J_z^2\}$ редуцированные матричные элементы $V^{(K)}$ даются формулой композиции

$$\langle \tau_1 \tau_2 J_1 J_2 J \parallel V^{(K)} \parallel \tau'_1 \tau'_2 J'_1 J'_2 J' \rangle = \sqrt{(2J+1)(2K+1)(2J'+1)} \times$$

$$\times \left\{ \begin{array}{ccc} J'_1 & J'_2 & J' \\ k_1 & k_2 & K \\ J_1 & J_2 & J \end{array} \right\} \langle \tau_1 J_1 \parallel \mathbf{T}^{(k_1)} \parallel \tau'_1 J'_1 \rangle \langle \tau_2 J_2 \parallel \mathbf{U}^{(k_2)} \parallel \tau'_2 J'_2 \rangle. \quad (88)$$

¹⁾ Во всех следующих формулах мы ограничиваемся тензорными операторами целого порядка.

²⁾ При таком определении скалярное произведение двух векторных операторов (VW) дается в соответствии с обычным определением выражением $V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z$.

Частные случаи, когда «9J»-символ сводится к «6J»-символу:

$$U = 1, \quad K = k_1 = k,$$

$$\langle \tau_1 \tau_2 J_1 J_2 J \| T^{(k)} \| \tau'_1 \tau'_2 J'_1 J'_2 J' \rangle = \delta_{\tau_2 \tau'_2} \delta_{J_2 J'_2} \langle \tau_1 J_1 \| T^{(k)} \| \tau'_1 J'_1 \rangle \times \\ \times (-1)^{J'+J_1+J_2+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} J_1 & k & J'_1 \\ J' & J_2 & J \end{Bmatrix}, \quad (89)$$

$$T = 1, \quad K = k_2 = k,$$

$$\langle \tau_1 \tau_2 J_1 J_2 J' \| U^{(k)} \| \tau'_1 \tau'_2 J'_1 J'_2 J' \rangle = \delta_{\tau_1 \tau'_1} \delta_{J_1 J'_1} \langle \tau_2 J_2 \| U^{(k)} \| \tau'_2 J'_2 \rangle \times \\ \times (-1)^{J+J_1+J'_2+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} J_2 & k & J'_2 \\ J' & J_1 & J \end{Bmatrix}, \quad (90)$$

$$K = 0, \quad k_1 = k_2 = k,$$

$$\langle \tau_1 \tau_2 J_1 J_2 JM \| (T^{(k)} U^{(k)}) \| \tau'_1 \tau'_2 J'_1 J'_2 J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} (-1)^{J+J_2+J'_1} \begin{Bmatrix} J_1 & k & J'_1 \\ J'_2 & J & J_2 \end{Bmatrix} \times \\ \times \langle \tau_1 J_1 \| T^{(k)} \| \tau'_1 J'_1 \rangle \langle \tau_2 J_2 \| U^{(k)} \| \tau'_2 J'_2 \rangle. \quad (91)$$

Случай $T^{(k)} = J_1$:

$$\langle J_1 J_2 J + 1 \| J_1 \| J_1 J_2 J \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{[(2S+1)^2 - (J+1)^2][(J+1)^2 - 4d^2]}{J+1}},$$

$$\langle J_1 J_2 J \| J_1 \| J_1 J_2 J \rangle = \frac{1}{2} [2d(2S+1) + J(J+1)] \sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}} = \\ = \frac{1}{2} [J_1(J_1+1) + J(J+1) - J_2(J_2+1)] \sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}}.$$

$$\langle J_1 J_2 J - 1 \| J_1 \| J_1 J_2 J \rangle = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{[(2S+1)^2 - J^2][J^2 - 4d^2]}{J+1}},$$

$$S = \frac{1}{2}(J_1 + J_2), \quad d = \frac{1}{2}(J_1 - J_2),$$

$$|2d| \leq J \leq 2S.$$