

SKLAPLJANJE VRTILNIH KOLIČIN

1

(GRADNJA LASTNIH STANJ IN SKLOPLJENIH OPERATORJEV)

Pri večini realnih sistemov je treba upoštevati več vrtilnih količin: Vsak e^- ima tirno in spinsko vrtilno količino, ki sta sklopljeni preko interakcije spin-tir in v več elektronskih sistemih se vrtilne količine sklapljajo na različne načine, odvisno od situacije, ki jo opisujemo.

- SKLOPITEV DVEH VRTILNIH KOLIČIN

2 neodvisna dela

$$\hat{J}_z^{(2)} |j_2 m_2\rangle = j_2(j_2+1) |j_2 m_2\rangle$$

(1) (2)

$$\hat{J}_z^{(2)} |j_2 m_2\rangle = m_2 |j_2 m_2\rangle$$

$j_2 = 1, 2$

$\hat{J} = \hat{J}^{(1)} + \hat{J}^{(2)}$ Komponente vrtilnih količin neodvisnih podsistemov med seboj komutirajo

$$[\hat{J}_x^{(1)}, \hat{J}_y^{(2)}] = 0 \rightarrow [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z$$

\hat{J} ima enake lastnosti kot $\hat{J}^{(1)}$ in $\hat{J}^{(2)}$: je vrtilna količina

$$\hat{J}^2 |(j_1 j_2) JM\rangle = J(J+1) |(j_1 j_2) JM\rangle \leftarrow \text{lastna funkcija } \hat{J}^2 \text{ in } \hat{J}_z$$

$$\hat{J}_z |(j_1 j_2) JM\rangle = M |(j_1 j_2) JM\rangle \quad -J \leq M \leq J$$

Produkt enodelčnih valovnih funkcij $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ je lastna funkcija \hat{J}_z : $\hat{J}_z |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = (\hat{J}_z^{(1)} + \hat{J}_z^{(2)}) |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = (m_1 + m_2) |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$ ves čas

To konstruiramo z linearno kombinacijo produktnih funkcij, tako da je $M = m_1 + m_2$.

$$|(j_1 j_2) JM\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \langle \underline{j_1 m_1, j_2 m_2} | JM\rangle \leftarrow \text{uteži}$$

(2)

$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | JM\rangle \equiv \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | (j_1 j_2) JM\rangle$ Clebsch - Gordanov
 koeficient je $\neq 0$, ko je
 $m_1 + m_2 = M$

ker tvorijo produktne
 funkcije $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$
 ortonormalni set

Absolutna faza koeficientov CG je določena z dogovorom:
 pridanih j_1, j_2 in J ter maksimalni vrednosti m_1 in M (se pravi
 $m_1 = j_1, M = J$)
 je koeficient realen in nenegativen.

→ vsi CG so REALNI.

- INVERZNA TRANSFORMACIJA:

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

$$\langle JM | j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = \langle (j_1 j_2) JM | j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | JM\rangle^*$$

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

PRIMER: KAKŠNA SO LASTNA STANJA SKUPNE VRTILNE KOLIČINE ZA
 2 ELEKTRONA S TIRNO VRTILNO KOLIČINO 1?

$$l_1 = 1, l_2 = 1 \quad |1 m_1, 1 m_2\rangle \quad m_1, m_2 = -1, 0, 1$$

$$|11, 11\rangle \rightarrow M_L = m_1 + m_2 = 2 \quad \text{edino stanje } J=2$$

(3)

$|1(1) 22\rangle = |11, 11\rangle$ ostala stanja z $J=2$ dobimo z operatorjem $\hat{L}_- = \hat{l}_-(1) + \hat{l}_-(2)$

$$|1(1) 21\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|11, 10\rangle + |10, 11\rangle)$$

$$|1(1) 20\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|11, 1-1\rangle + 2|10, 10\rangle + |1-1, 11\rangle)$$

$$|1(1), 2-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|10, 1-1\rangle + |1-1, 10\rangle)$$

$$|1(1) 2-2\rangle = |1-1, 1-1\rangle$$

Obstaja še ena linearna kombinacija $a|11, 10\rangle + b|10, 11\rangle$, ki ima $M_L=1$, ta ustreza $J=1$. Ortogonalnost $|1(1) 21\rangle$ in $|1(1) 11\rangle$ privede do $a+b=0$.

Normalizirano stanje $|1(1) 11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|11, 10\rangle - |10, 11\rangle)$. Ostala $J=1$ stanja z aplikacijo \hat{L}_- . Podobno dobimo še stanje z $J=0$: $|1(1) 00\rangle$, za katero zahtevamo, da je ortogonalno na $|1(1) 20\rangle$ in $|1(1) 10\rangle$.

Očitno lahko konstrukcijski pristop posplošimo.

Wigner 1931: $\hat{J}_+ |j_1 j_2 J J\rangle = \hat{J}_+ \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | J J\rangle = 0$

privede do rekurzijskih relacij med CG ...
in izraza za CG koeficient:

$$\begin{aligned}
 \textcircled{4} \quad \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle &= \delta(m_1 + m_2, M) \sqrt{\frac{(2J+1)(j_1+j_2-J)!(j_1-m_1)!(j_2-m_2)!(J+M)!(J-M)!}{(j_1+j_2+J+1)!(J+j_1-j_2)!(J+j_2-j_1)!(j_1+m_1)!(j_2+m_2)!}} \\
 &\times \sum_r (-1)^{j_1-m_1+r} \frac{(j_1+m_1+r)!(j_2+J-m_1-r)!}{r!(J-M-r)!(j_1-m_1-r)!(j_2-J+m_1+r)!}
 \end{aligned}$$

- ŠE EN PRIMER: VRTILNA KOLIČINA ELEKTRONA, SESTAVLJENA IZ TIRNE IN SPINSKE.

$J \backslash m_s$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$l + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}}$	$\sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}}$
$l - \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}}$	$-\sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}}$

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad s = \frac{1}{2}$$

$$| (l \frac{1}{2}) l + \frac{1}{2} m_j \rangle = \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}} | l m_j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle + \sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}} | l m_j + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle$$

$$| (l \frac{1}{2}) l - \frac{1}{2} m_j \rangle = \sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}} | l m_j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle - \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}} | l m_j + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle$$

ŠE NEKAJ LASTNOSTI CG:

5

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

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

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

NI SIMETRIJE MED CG ZA MENJAVO VRSTNEGA REDA TREH VRTILNIH KOLIČIN.
ZATO OBICAJNO RAJE UPORABLJAMO WIGNERJEV 3-j SIMBOL:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \equiv \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m_3}}{\sqrt{2j_3 + 1}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 -m_3 \rangle \quad \neq 0 \quad \begin{matrix} m_1 + m_2 + m_3 = 0 \\ |j_1 - j_2| \leq j_3 \leq j_1 + j_2 \end{matrix}$$

LASTNOSTI 3-j SIMBOLOV:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}$$

SODA PERMUTACIJA
NE SPREMENI VREDNOSTI,

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

LIMA PA UVEDE FAZNI
FAKTOR

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

KER LASTNA STANJA TVORijo ORTONORMALNI SET:

6

$$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j_1 m_1', j_2 m_2' \rangle = \delta(m_1, m_1') \delta(m_2, m_2')$$

$$\langle (j_1 j_2) j_3 m_3 | (j_1 j_2) j_3 m_3' \rangle = \delta(j_3, j_3') \delta(m_3, m_3')$$

VELJAJO ŠE ZVEZE MED CG OZIGOMA 3-j SIMBOLI:

$$\textcircled{1} \sum_{j_3 m_3} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle \langle j_3 m_3 | j_1 m_1', j_2 m_2' \rangle = \delta(m_1, m_1') \delta(m_2, m_2')$$

$$\text{OZ.} \sum_{j_3 m_3} (2j_3 + 1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3 \end{pmatrix} = \delta(m_1, m_1') \delta(m_2, m_2')$$

$$\textcircled{2} \sum_{m_1, m_2} \langle j_3 m_3' | j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle = \delta(j_3, j_3') \delta(m_3, m_3')$$

$$\text{OZ.} \sum_{m_1, m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \frac{\delta(j_3, j_3') \delta(m_3, m_3')}{\sqrt{2j_3 + 1}}$$

SKLOPITEV SFERNIH TENZORSKIH OPERATORJEV (STO); TENZORSKI PRODUKT

STO \hat{X}^K S KOMPONENTAMI \hat{X}_Q^K

$$\hat{X}_Q^K = \left\{ \hat{T}^{k_1}(1) \hat{U}^{k_2}(2) \right\}_Q^K = \sum_{q_1, q_2} \hat{T}_{q_1}^{k_1}(1) \hat{U}_{q_2}^{k_2}(2) \langle q_1 q_1, q_2 q_2 | K Q \rangle$$

\hat{T}^{k_1} in \hat{U}^{k_2} delujeta na različni prostostni stopnji sistema, recimo (1) na spinski del, (2) na tirni del elektrona, ali v dvoelektronskem sistemu $\hat{T}^{k_1}(1)$ deluje na koordinato prvega, $\hat{U}^{k_2}(2)$ pa drugega elektrona.

7 Operator \hat{X}_Q^K se pri rotacijah transformira kot stanje vrtilne količine $|(\ell_1 \ell_2) K Q\rangle$ in je torej STO reda K . \hat{X}_Q^K je tenzorski produkt operatorjev \hat{T}^{ℓ_1} in \hat{U}^{ℓ_2} , ki sta tenzorska operatorja reda ℓ_1 in ℓ_2 in se transformirata kot stanja vrtilne količine $|\ell_1 q_1\rangle$ in $|\ell_2 q_2\rangle$.

Dva tenzorska operatorja istega reda lahko sestavimo v tenzorski produkt reda 0 (skalarni operator).

$$\hat{X}_0^0 = \left\{ \hat{T}_{(1)}^{\ell_1} \hat{U}_{(2)}^{\ell_2} \right\}_0^0 = \sum_Q T_Q^{\ell_1}(1) U_{-Q}^{\ell_2}(2) \langle \ell_1 q_1 \ell_2 -q_2 | 00 \rangle$$

$$= \sum_Q \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & 0 \\ \ell_1 - q_1 & \ell_2 - q_2 & 0 \end{pmatrix} T_{-Q}^{\ell_1}(1) U_{-Q}^{\ell_2}(2) = \frac{(-1)^{\ell_1}}{\sqrt{2\ell_1+1}} \sum_Q (-1)^Q T_Q^{\ell_1}(1) U_{-Q}^{\ell_2}(2)$$

$$\equiv \frac{(-1)^{\ell_1}}{\sqrt{2\ell_1+1}} \left(\hat{T}^{\ell_1} \cdot \hat{U}^{\ell_2} \right)$$

← tradicionalna

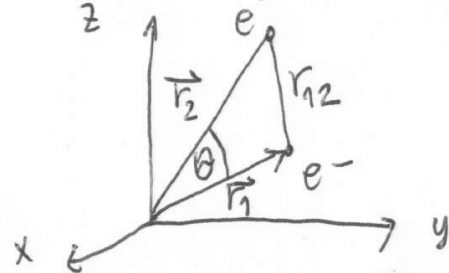
definicija SKALARNEGA
PRODUKTA 2 TENZORSEV

$$\hat{T}^{\ell_1}(1) \cdot \hat{U}^{\ell_2}(2) \equiv$$

$$\sum_Q (-1)^Q \hat{T}_Q^{\ell_1}(1) \hat{U}_{-Q}^{\ell_2}(2)$$

PRIMER !!

COULOMBSKA INTERAKCIJA MED 2 ELEKTRONOMA:



$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{\ell} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} P_{\ell}(\cos \theta)$$

$$r_{<} = \begin{cases} r_1, & r_1 \leq r_2 \\ r_2, & \text{sicer} \end{cases}$$

$$r_{>} = \begin{cases} r_2, & r_1 \leq r_2 \\ r_1, & \text{sicer} \end{cases}$$

ADICIJSKI IZREK ZA SFERNE HARMONIKE:

$$P_L(\omega\theta) = \frac{4\pi}{2L+1} \sum_q Y_L^q(\theta_1, \varphi_1) Y_L^{q*}(\theta_2, \varphi_2)$$

(8)

DEFINIRAJMO C-tenzor \hat{C}^L S KOMPONENTAMI $\hat{C}_q^L = \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} Y_L^q(\theta, \varphi)$:

$$P_L(\omega\theta) = \hat{C}^L(1) \cdot \hat{C}^L(2) \rightarrow \frac{1}{r_{12}} = \sum_L \frac{r_L^2}{r_{12}^{2L+1}} \hat{C}^L(1) \cdot \hat{C}^L(2)$$

COULOMBSKA INTERAKCIJA JE INVARIANTNA NA VRTENJE OBEH e^- MKRATI. ŽATO MORATA BITI $\hat{C}^L(1)$ IN $\hat{C}^L(2)$ SKLOPLJENA TAKO, DA FORMIRATA TENZORSKI PRODUKT REDA 0 \rightarrow SKALARNI OPERATOR

WIGNER - ECKARTOV TEOREM

OBRUNAVALI SMO ŽE TRANSFORMACIJSKE LASTNOSTI (SKLOPLJENIH) LASTNIH STAN) VRTILNE KOLIČINE IN STO: OBE SKUPINI SE TRANSFORMIRATA NA ENAK NAČIN, PAČ TAKO KOT VELEVAJO IREDUCIBILNE REPREZENTACIJE ROTACIJSKIH GRUP.

ŽDAJ NAS ZANIMA UČINEK SIMULTANEGA VRTENJA TENZORSKIH OPERATORJEV IN LASTNIH STAN) V MATRIČNIH ELEMENTIH. IZKAŽE SE, DA JE MOGOČE MATRIČNE ELEMENTE STO FAKTORIZIRATI NA PRODUKT DVEH DELOV, OD KATERIH JE SAMO EN DEL (TRIVIALNO) ODVIŠEN OD MAGNETNIH KVANTNIH ŠTEVIL!

$$P(\omega) \hat{T}_2^k |\chi_{jm}\rangle = P(\omega) \hat{T}_2^k P^{-1}(\omega) P(\omega) |\chi_{jm}\rangle$$

9

$$= \sum_{j'm'} \hat{T}_2^k D_{2'2}^k(\omega) |\chi_{j'm'}\rangle D_{m'm}^{j'}(\omega)$$

transformacija kot $\vec{D}^k \otimes \vec{D}^j$
direktni produkt

Funkcija $\hat{T}_2^k |\chi_{jm}\rangle$ se torej transformira kot produktna funkcija $|\chi_{j'k}\rangle |\chi_{2jm}\rangle$.

$$\phi(\beta JM) = \sum_{j'm} \hat{T}_2^k |\chi_{jm}\rangle \langle \chi_{j'm} | JM \rangle = \sum_{j''} c(\chi'' J) |\chi'' JM\rangle$$

INVERZNA TRANSFORMACIJA

$$\hat{T}_2^k |\chi_{jm}\rangle = \sum_{JM} \phi(\beta JM) \langle JM | kq jm \rangle = \sum_{j'' JM} c(\chi'' J) |\chi'' JM\rangle \langle JM | kq jm \rangle \sum_{j' m'} \langle \chi_{j' m'} |$$

$$\langle \chi_{j' m'} | \hat{T}_2^k |\chi_{jm}\rangle = c(\chi' j') \langle j' m' | kq jm \rangle = c(\chi' j') \begin{pmatrix} j' & k & j \\ -m' & q & m \end{pmatrix} \sqrt{2j'+1} (-1)^{-k+j'-m'}$$

$j \leftrightarrow j'$

$$\langle \chi_{j m} | \hat{T}_2^k |\chi_{j' m'} \rangle = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} [(-1)^{-k+j'-j} \sqrt{2j+1} c(\chi, j)]$$

$$\equiv (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \langle \chi_j || \hat{T}^k || \chi_{j'} \rangle$$

↑
REDUCIRANI MATRIČNI
ELEMENT

PRIMER: ZEEMANOV EFEKT, INTERAKCIJA MAGNETNEGA MOMENTA ATOMA S ŠIBKIM ZUNANJIM MAGNETNIM POLJEM. Z-OJ VZDOLŽ SMERI \vec{B} .

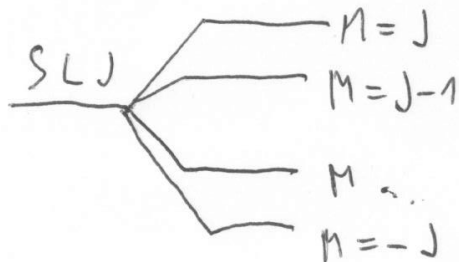
10

$$\hat{H}_m = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = \mu_B B (\hat{L}_z + g_s \hat{S}_z)$$

↑
orbitalni del

↑
giromagnetno razmerje

MAGNETNI MOMENT JE
POSLEDICA VRTILNE
KOLIČINE ELEKTRONA



$$\Delta E_M = \langle (LS)JM | \hat{H}_m | (LS)JM \rangle$$

$$\hat{H}_m = \mu_B B g_j \hat{J}_z$$

↑ Landé-jev g faktor

$$W-E: \frac{\langle (LS)JM | \hat{J}_z | (LS)JM \rangle}{\langle (LS)J || \hat{J} || (LS)J \rangle}$$

$$= \frac{\langle (LS)JM | \hat{L}_z | (LS)JM \rangle}{\langle (LS)J || \hat{L} || (LS)J \rangle}$$

ZA POLJUBNO
KOMPONENTO q

$$\rightarrow \langle (LS)JM | \hat{L}_z | (LS)JM \rangle = \left(\frac{\langle (LS)J || \hat{L} || (LS)J \rangle}{\langle (LS)J || \hat{J} || (LS)J \rangle} \right) \langle (LS)JM | \hat{J}_z | (LS)JM \rangle \equiv \alpha_L$$

PODOBNO ZA SPIN

$$\langle (LS)JM | \hat{S}_z | (LS)JM \rangle = \left(\frac{\langle (LS)J || \hat{S} || (LS)J \rangle}{\langle (LS)J || \hat{J} || (LS)J \rangle} \right) \langle (LS)JM | \hat{J}_z | (LS)JM \rangle \equiv \alpha_S$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{L} &= \alpha_L \vec{J} \\ \vec{S} &= \alpha_S \vec{J} \end{aligned} \right\}$$

$$g_j = \alpha_L + g_s \alpha_S \text{ (neodvisen od } M), \hat{J}_z = \hat{S}_z + \hat{L}_z \rightarrow \alpha_S + \alpha_L = 1$$

MAGNETNA INTERAKCIJA RAZCEPI NIVO SLJ NA PODNIVOJE, KI SO ENAKOMERNO RAZMAKNJENI. NJIMOV RAZMIK NARAŠČA SORAZMERNO Z VEKOSTJO \vec{B} IN JE ODVIŠEN OD SLJ PREKO LANDE-JEVEGA g FAKTORIA

(11)

IZRAČUNAJMO g_j :

$$\hat{L}^2 = (\hat{J} - \hat{S})^2 = \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - 2\hat{J} \cdot \hat{S} = \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - 2\alpha_s \hat{J}^2$$

$$\langle (LS)JM | \hat{L}^2 | (LS)JM \rangle = L(L+1) = J(J+1) + S(S+1) - 2\alpha_s J(J+1)$$

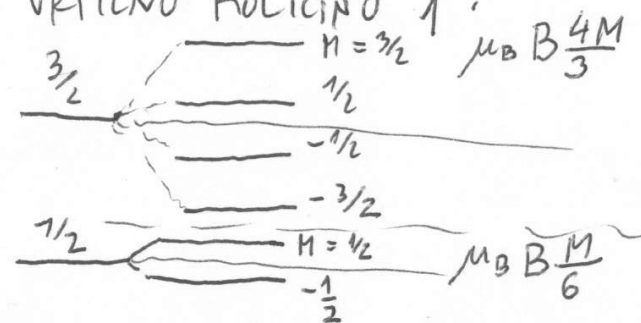
$$\rightarrow \alpha_s = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$\alpha_L = 1 - \alpha_s = \frac{J(J+1) - S(S+1) + L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$g_j (g_s=2) = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

PRIMER: ELEKTRON V STANJU Z ORBITALNO VRTILNO KOLIČINO 1; (S SPINOM $1/2$)

$$g_{1/2} = \frac{1}{6}, \quad g_{3/2} = \frac{4}{3} \rightarrow$$



IZRAZIMO MATRIČNI ELEMENT COULOMBSKE INTERAKCIJE MED DVEMA ELEKTRONOMA,
 POKAŽALI SMO ŽE:

12

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_k \frac{r_1^k}{r_2^{k+1}} \hat{C}^k(1) \cdot \hat{C}^k(2) = \sum_k \frac{(-1)^k}{\sqrt{2k+1}} \frac{r_2^k}{r_1^{k+1}} \{ \hat{C}^k(1) \hat{C}^k(2) \}_0^0$$

SPADA V MNOŽICO OPERATORJEV OBLIKE

$$g_{12} = \delta(r_1, r_2) \{ \hat{t}^{k_1}(1) \hat{u}^{k_2}(2) \}_Q^K, \quad \hat{t}^{k_1} \text{ in } \hat{u}^{k_2} \text{ neodvisna od spina}$$

IZRAZIMO MATRIČNI ELEMENT

$$\langle ab | \delta(r_1, r_2) \{ \hat{t}^{k_1}(1) \hat{u}^{k_2}(2) \}_Q^K | cd \rangle$$

MED NESKLOPJENIMI ENO ELEKTRONSKIMI STANJI (ORBITALAMI) $|a\rangle = |m_a l_a m_s^a m_e^a\rangle$

$$|m l m_s m_e\rangle = \frac{1}{r} P_{m_e}(r) Y_{m_e}^l(\theta, \varphi) \chi_{m_s} \leftarrow \begin{array}{l} \text{SPINSKA FUNKCIJA} \\ \text{S PROJEKCIJO } m_s \end{array}$$

\uparrow radialna funkcija \uparrow SF. HARMONIK

$$\langle ab | \delta(r_1, r_2) \{ \hat{t}^{k_1}(1) \hat{u}^{k_2}(2) \}_Q^K | cd \rangle = \iint P_a(r_1) P_b(r_2) \delta(r_1, r_2) P_c(r_1) P_d(r_2) dr_1 dr_2$$

$$\cdot \sum_{q_1 q_2} \langle a | \hat{t}_{q_1}^{k_1} | c \rangle \langle b | \hat{u}_{q_2}^{k_2} | d \rangle \langle q_1 q_1 q_2 q_2 | K Q \rangle \times \delta(m_s^a, m_s^c) \delta(m_s^b, m_s^d)$$

\uparrow INTEGRAL ČET KOTNE KOORDINATE 1 \uparrow INTEGRAL ČET KOTNE KOORD. 2

$$(-1)^{k_1 - k_2 + Q} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & K \\ q_1 & q_2 & -Q \end{pmatrix} \sqrt{2K+1}$$

$$\text{W.E.: } \langle a | \hat{t}_{z_1}^{k_1} | c \rangle = (-1)^{l_a - m_a^a} \begin{pmatrix} l_a & k_1 & l_c \\ -m_a^a & q_1 & m_c^c \end{pmatrix} \langle a || \hat{t}^{k_1} || c \rangle$$

(13)

$$\langle b | \hat{u}_{z_2}^{k_2} | d \rangle = (-1)^{l_b - m_b^b} \begin{pmatrix} l_b & k_2 & l_d \\ -m_b^b & q_2 & m_d^d \end{pmatrix} \langle b || \hat{u}^{k_2} || d \rangle$$

$$\rightarrow \langle ab | \delta(r_1, r_2) \{ \hat{t}_{z_1}^{k_1} \hat{u}_{z_2}^{k_2} \}_Q^k | cd \rangle = \iint P_a(r_1) P_b(r_2) \delta(r_1, r_2) P_c(r_1) P_d(r_2) dr_1 dr_2$$

$$\times (-1)^{l_a + l_b + k_1 - k_2 + Q - m_a^a - m_b^b} \sqrt{2k+1} \langle a || \hat{t}^{k_1} || c \rangle \langle b || \hat{u}^{k_2} || d \rangle \delta(m_s^a, m_s^c) \delta(m_s^b, m_s^d)$$

$$\sum_{q_1, q_2} \begin{pmatrix} l_a & k_1 & l_c \\ -m_a^a & q_1 & m_c^c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & k_2 & l_d \\ -m_b^b & q_2 & m_d^d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & q_2 & -Q \end{pmatrix}$$

COULOMBSKI PRIMER: $K=0=Q$ $k_1=k_2=k$ + $\Sigma p_0 k$

$$\langle ab | \frac{1}{r_{12}} | cd \rangle = \sum_{k=0} \left(\iint P_a(r_1) P_b(r_2) \frac{r_1^k}{r_2^{k+1}} P_c(r_1) P_d(r_2) dr_1 dr_2 \right) (-1)^{l_a + l_b - m_a^a - m_b^b}$$

$$\langle a || \hat{C}^k || c \rangle \langle b || \hat{C}^k || d \rangle \delta(m_s^a, m_s^c) \delta(m_s^b, m_s^d)$$

$$\sum_q \begin{pmatrix} l_a & k & l_c \\ -m_a^a & q & m_c^c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & k & l_d \\ -m_b^b - q & m_c^d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & k & 0 \\ q & -q & 0 \end{pmatrix} \leftarrow \frac{(-1)^{k-q}}{\sqrt{2k+1}}$$

Slaterjev integral $R^k(ab, cd)$

REDUCIRANI MATRIČNI ELEMENT TENSORJA "C":

14

$$\langle l m | C_2^q | l' m' \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int Y_m^{l*}(\Omega) Y_2^q(\Omega) Y_{m'}^{l'}(\Omega) d\Omega \stackrel{W.E.}{=} (-1)^{l-m} \begin{pmatrix} l & 2 & l' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \langle l || \hat{C}^2 || l' \rangle$$

$$Y_2^q(\Omega) Y_{m'}^{l'}(\Omega) = \sum_{lm} a_{lm} Y_m^l(\Omega), \quad a_{lm} = \int Y_m^{l*}(\Omega) Y_2^q(\Omega) Y_{m'}^{l'}(\Omega) d\Omega$$

$$Y_2^q(\Omega) Y_{m'}^{l'}(\Omega) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sum_{lm} (-1)^{l-m} \begin{pmatrix} l & 2 & l' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \langle l || \hat{C}^2 || l' \rangle Y_m^l(\Omega)$$

$$\sum_{q m'} \begin{pmatrix} l'' & 2 & l \\ -m'' & q & m' \end{pmatrix} Y_2^q(\Omega) Y_{m'}^{l'}(\Omega) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sum_{lm} (-1)^{l-m} \langle l || \hat{C}^2 || l' \rangle Y_m^l(\Omega) \sum_{q m'} \begin{pmatrix} l'' & 2 & l \\ -m'' & q & m' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 2 & l' \\ -m & q & m' \end{pmatrix}$$

UPORABIM

$$\sum_{m_1, m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{(2j_3+1)} \delta(j_3, j_3) \delta(m_3, m_3)$$

$$\rightarrow = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} (-1)^{l-m''} \langle l'' || \hat{C}^2 || l' \rangle \frac{1}{2l''+1} Y_{m''}^{l''}(\Omega)$$

Enačba velja za vse kote, torej tudi za $\theta = 0$: $Y_m^l(\theta, \varphi) \rightarrow \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l^m(1) e^{im\varphi}$

$$\begin{pmatrix} l'' & 2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}}{4\pi} = (-1)^{l''} \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{2l+1}{2l''+1}} \langle l'' || \hat{C}^2 || l' \rangle = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta(m, 0)$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle l || \hat{C}^2 || l' \rangle = (-1)^l \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} l & 2 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}$$

NADALUJEM Ž MATRIČNIM ELEMENTOM:

15

$$\langle ab | \frac{1}{r_{12}} | cd \rangle = \sum_{\lambda} \left[R^{\lambda}(ab, cd) \sqrt{\frac{(2l_a+1)(2l_b+1)(2l_c+1)(2l_d+1)}{2\lambda+1}} (-1)^{\lambda} \begin{pmatrix} l_a & l_c \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & l_d \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\ \left. (-1)^{m_l^a + m_l^b} S(m_s^a, m_s^c) S(m_s^b, m_s^d) \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \begin{pmatrix} l_a & l_c \\ -m_l^a & \mu & m_l^c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & l_d \\ -m_l^b & -\mu & m_l^d \end{pmatrix} \right]$$

SKLAPLANJE 3 VRTILNIH KOLIČIN

V atomski fiziki pogosto delamo s sistemi, ki imajo več kot dve vrtilni količini, recimo konfiguracija dveh elektronov ima 2 tirni in 2 spinski vrtilni količini. Najprej raziskujemo sklopitev 3 vrtilnih količin j_1, j_2 in j_3 v rezultanto J : To lahko storimo na dva različna načina, tako da imamo dva kompletna seta baznih funkcij:

$$|(j_1 j_2) J_{12}, j_3, JM\rangle \text{ ter } |j_1, (j_2 j_3) J_{23}, JM\rangle,$$

ki ju povezuje unitarna transformacija

$$|j_1, (j_2 j_3) J_{23}, JM\rangle = \sum_{J_{12}} |(j_1 j_2) J_{12}, j_3, JM\rangle \langle (j_1 j_2) J_{12}, j_3, JM | j_1, (j_2 j_3) J_{23}, JM \rangle$$

Koeficienti so neodvisni od M :

$$\langle (j_1 j_2) J_{12}, J | j_1, (j_2 j_3) J_{23}, J \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + J} \sqrt{\frac{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}{(2J+1)}} \begin{pmatrix} j_1 & J_{12} & j_2 \\ j_3 & J_{23} & J \end{pmatrix}$$

Wignerjev 6-j simbol

6-j simbol lahko izrazimo s 3-j simboli:

16

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{matrix} \right\} = \sum_{\text{vsi } m_j} (-1)^{j_1 - m_1 + j_2 - m_2 + j_3 - m_3 + j_4 - m_4 + j_5 - m_5 + j_6 - m_6} \times \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ m_1 & -m_5 & m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_6 & j_4 \\ m_2 & -m_6 & m_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & j_5 \\ m_3 & -m_4 & m_5 \end{pmatrix}$$

6-j simbol je različna od nič le če vzdolž vsake vrstice velja trikotniško pravilo:

$$\{0-0-0\}, \{0-0^0\}, \{0^0-0\}, \{0^0-0-0\}$$

- je invarianten na permutaciji stolpcov

- je invarianten na zamenjavo "gornjih" in "spodnjih" argumentov v dveh stolpcih:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ j_1 & j_2 & j_6 \end{matrix} \right\}$$

- dve vodni pravili:

$$\sum_f (2f+1) \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ d & e & f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} a & b & c' \\ d & e & f \end{matrix} \right\} = \frac{\delta(c, c')}{(2c+1)}$$

več v "Angular Momentum"

$$\sum_g (-1)^{e+f+g} (2g+1) \left\{ \begin{matrix} a & d & g \\ b & c & f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} a & d & g \\ c & b & e \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} a & b & e \\ d & c & f \end{matrix} \right\}$$

Brink & Satchler

- poenostavitelj

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & 0 \end{matrix} \right\} = \frac{(-1)^{j_1 + j_2 + j_3}}{\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)}} \delta(j_1, l_2) \delta(j_2, l_1)$$

Sklopitev 4 vtičnih količin: (g_j) -simbol

(17)

Koeficienti ustrezne unitarne transformacije imajo pomembno vlogo, ker z njimi transformiramo sklopitev dveh elektronov iz LS v jj shemo. V sklopu LS najprej sklopimo tiri vtični količini obeh elektronov v skupno vtično količino L in podobno elektronske spinov v skupni spin S , v sklopu jj pa dobimo skupno vtično količino tako, da najprej sklopimo spin elektrona z njegovo tisto vtično količino za vsak elektron posebej in potem sestavimo vse j_i .

$$\vec{l}_1, \vec{s}_1 \quad \vec{l}_2, \vec{s}_2$$

$$[x] \equiv (2x+1)$$

$$\left\{ \begin{matrix} s_1 & s_2 & S \\ l_1 & l_2 & L \\ j_1 & j_2 & J \end{matrix} \right\}$$

Wignerjev g_j simbol

$$\langle (s_1 s_2) S, (l_1 l_2) L, J | (s_1 l_1) j_1, (s_2 l_2) j_2, J \rangle = \sqrt{[j_1, j_2, S, L]}$$

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} = \sum_{\text{vsim } m_{ji}} \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ m_{11} & m_{12} & m_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ m_{11} & m_{21} & m_{31} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ m_{12} & m_{22} & m_{32} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ m_{13} & m_{23} & m_{33} \end{pmatrix}$$

Posebno lepa vrednost:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & j_3 \\ k & k & 0 \end{Bmatrix} = \delta(j_3, j_3) \delta(k, k) \frac{(-1)^{j_2+j_3+l_1+k}}{\sqrt{[L, j_3, k]}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_2 & l_1 & k \end{Bmatrix}$$

Vzdolž stolpcov in vrstic mora veljati Δ -pravilo. Soda permutacija stolpcov ali vrstic vrednosti g_j simbole ne spremeni, liha pa ga obteži z $(-1)^{\sum j_i}$