# Теоретическая субмолекулярная физика

## 6. Тензорные операторы

- Определение  неприводимых тензорных операторов
- Теорема Вигнера-Экарта
- Разложение по неприводимым операторам
- Тензорное произведение операторов

**Грызлова Е.В.**

**2018 г.**

# D-функция

Ортонормированности

$$\iiint D^{*j}_{m'\mu'}(\alpha,\beta,\gamma)D^{j}_{m\mu}(\alpha,\beta,\gamma)d\alpha\,\sin\beta\,d\beta\,d\gamma=\frac{8\pi^2}{2j+1}\delta_{\mu\mu'}\delta_{mm'};$$ 5.2

Теорема сложения

$$D^{j'}_{m'\mu'}(\alpha,\beta,\gamma)D^{j}_{m\mu}(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_{JM\mathrm{M}}(jmj'm'|JM)(j\mu j'\mu'|J\mathrm{M})D^{J}_{M\mathrm{M}}(\alpha,\beta,\gamma)$$ 5.3

$$\boxed{\begin{aligned}&\iiint D^{*j_1}_{m_1\mu_1}(\alpha,\beta,\gamma)D^{j_2}_{m_2\mu_2}(\alpha,\beta,\gamma)D^{j_3}_{m_3\mu_3}(\alpha,\beta,\gamma)d\alpha\,\sin\beta\,d\beta\,d\gamma=\\&\frac{8\pi^2}{2j+1}(j_2m_2\,j_3m_3\,|\,j_1m_1)(j_2\mu_2\,j_3\mu_3\,|\,j_1\mu_1)\end{aligned}}$$

# Тензорные операторы

$$\hat{R}(\omega) = \exp\left(-i\alpha\hat{J}_z\right)\exp\left(-i\beta\hat{J}_y\right)\exp\left(-i\gamma\hat{J}_z\right);$$

$$\tilde{\hat{T}}_p^{(k)} = \hat{R}(\omega)\hat{T}_p^{(k)}\hat{R}^{-1}(\omega) = \sum_q D_{qp}^k(\alpha,\beta,\gamma)\hat{T}_q^{(k)}$$

Скаляр k=0

Вектор k=1 $\quad T_{\pm 1}^{(1)} = \mp\frac{a_x \pm i a_y}{\sqrt{2}};\ T_0^{(1)} = a_z$

k=2 $\quad T_{ik} = x_i x_k - \frac{1}{3}r^2\delta_{ik}; \qquad \hat{T}_q^{(k)} = \sqrt{\frac{16\pi}{5}}r^2 Y_q^k(\theta,\varphi)$

$$T_0^{(2)} = 3T_{zz};$$

$$T_{\mp 1}^{(2)} = \mp\sqrt{6}(T_{xz} \pm T_{yz});$$

$$T_{\mp 2}^{(2)} = \sqrt{6}(T_{xx} + 1/2T_{zz} \pm iT_{xy});$$

# Теорема Вигнера-Эккарта

$$\hat{R}(\omega) = \exp\left(-i\alpha\hat{J}_z\right)\exp\left(-i\beta\hat{J}_y\right)\exp\left(-i\gamma\hat{J}_z\right);$$

$$\tilde{\hat{T}}_p^{(k)} = \hat{R}(\omega)\hat{T}_p^{(k)}\hat{R}^{-1}(\omega) = \sum_q D_{qp}^k(\alpha,\beta,\gamma)\hat{T}_q^{(k)}$$

Приведеный матричный элемент

$$\boxed{\left\langle j_2 m_2 \left| V_q^{(k)} \right| j_1 m_1 \right\rangle = \frac{(j_1 m_1 k q \mid j_2 m_2)}{\sqrt{2j_2+1}} \left\langle j_2 m_2 \right\| V^{(k)} \left\| j_1 m_1 \right\rangle}$$

# Следствия из теоремы Вигнера-Эккарта

Приведеный матричный элемент

$$\left\langle j_2 m_2 \left| V_q^{(k)} \right| j_1 m_1 \right\rangle = \frac{(j_1 m_1 k q \mid j_2 m_2)}{\sqrt{2 j_2 + 1}} \left\langle j_2 m_2 \left| \left| V^{(k)} \right| \right| j_1 m_1 \right\rangle$$

$$\sum_{q m_1} \left| \left\langle j_2 m_2 \left| V_q^{(k)} \right| j_1 m_1 \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{2 j_2 + 1} \left| \left\langle j_2 m_2 \left| \left| V^{(k)} \right| \right| j_1 m_1 \right\rangle \right|^2$$

$$\sum_{m_1 m_2} \left| \left\langle j_2 m_2 \left| V_q^{(k)} \right| j_1 m_1 \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{2k + 1} \left| \left\langle j_2 m_2 \left| \left| V^{(k)} \right| \right| j_1 m_1 \right\rangle \right|^2$$

Принцип детального равновесия a+A→b+B

$$\frac{\sigma_{ab}}{\sigma_{ba}} = \frac{(2 j_b + 1)(2 j_B + 1)}{(2 j_a + 1)(2 j_A + 1)} \frac{p_b^2}{p_a^2}$$

Правила отбора

Метод эквивалентных операторов

# Разложение по неприводимым операторам

**Разложение плоской волны по сферическим**

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\sum_{l=0}(2l+1)i^l J_{l+1/2}(kr)P_l(\cos\theta)$$

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{l=0,m=-l} i^l j_{l+1/2}(\vec{k}\vec{r})Y^*_{lm}(\vec{n}_k)Y_{lm}(\vec{n}_r)$$

**Разложение кулоновского оператора**

$$\frac{e_1 e_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = 4\pi e_1 e_2 \times$$

$$\times \begin{cases} \dfrac{1}{r_1}\sum\limits_{lm}(2l+1)^{-1}\left(\dfrac{r_2}{r_1}\right)^l Y^*_{lm}(\mathbf{n}_1)\,Y_{lm}(\mathbf{n}_2) & \text{при } r_1 > r_2; \\ \dfrac{1}{r_2}\sum\limits_{lm}(2l+1)^{-1}\left(\dfrac{r_1}{r_2}\right)^l Y^*_{lm}(\mathbf{n}_1)\,Y_{lm}(\mathbf{n}_2) & \text{при } r_1 < r_2. \end{cases}$$

# Значения некоторых (приведеных) матричных жлементов

определить $\left\langle Y_{l'm'} \middle\| Y_{kq} \middle\| Y_{lm} \right\rangle$

$$D^{l}_{0\mu}(\alpha,\beta,\gamma) = \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2l+1}} Y_{l-\mu}(\beta,\gamma)$$

$\langle Q_{zz} \rangle$, $\left\langle J \middle\| \hat{J} \middle\| J \right\rangle$

$$\begin{aligned}\langle ab\alpha\beta|c\gamma\rangle = {} & \delta(\alpha+\beta,\gamma)\Delta(a\,b\,c)\times \\ & \times[(2c+1)(a+\alpha)!\,(a-\alpha)!\,(b+\beta)!\,(b-\beta)!\,(c+\gamma)!\,(c-\gamma)!]^{\frac{1}{2}}\times \\ & \times\sum_{\nu}(-1)^{\nu}[(a-\alpha-\nu)!\,(c-b+\alpha+\nu)!\,(b+\beta-\nu)!\times \\ & \qquad \times(c-a-\beta+\nu)!\,\nu!\,(a+b-c-\nu)!]^{-1},\end{aligned}$$

where

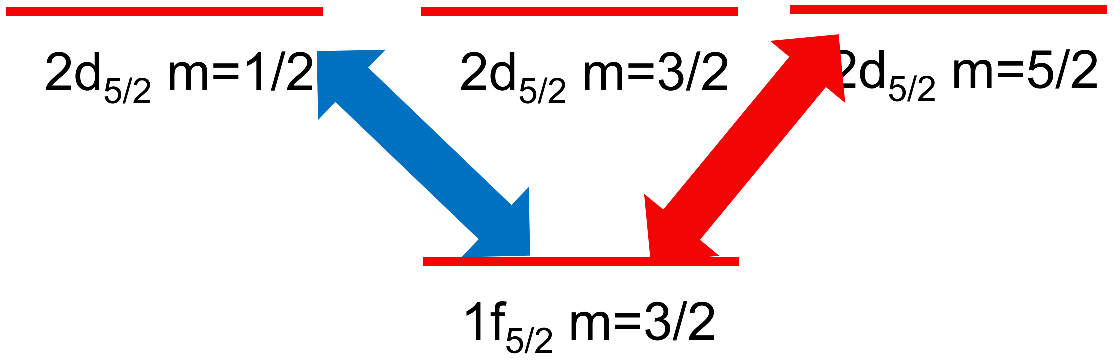
$$\Delta(abc) = \left[\frac{(a+b-c)!\,(a+c-b)!\,(b+c-a)!}{(a+b+c+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}, \qquad (2.34)$$

$$\boxed{C^{cc}_{aa\,b\,c-a} = \left[\frac{(2a)\,!\,(2c+1)\,!}{(a+b+c+1)\,!\,(a-b+c)\,!}\right]^{1/2},}$$

$$(JJk0\,|\,JJ) = \sqrt{\frac{2J\ldots(2J-k+1)}{(2J+2)\ldots(2J+k+1)}}$$

# Задачи

р. 6.1 Сравнить вероятности E1 перехода под действием правого, левого, неполяризованного и линейного (последнее в двух системах координат), $1f_{5/2}$ в $2d_{5/2}$, считая что начальное состояние полностью поляризовано ($f_{5/2}$ $m=3/2$). Сравнить ее с вероятностью обратного перехода из $m=5/2$ под действием правого и $m=1/2$ под действием левого.




Сдать до 23 октября включительно

# Тензорное произведение операторов

$$[\hat{U}^{(k_1)} \otimes \hat{V}^{(k_2)}]^k_q = \sum_{q_1 q_2} (k_1 q_1 k_2 q_2 \,|\, kq) \hat{U}^{(k_1)}_{q_1} V^{(k_2)}_{q_2}$$

Если первый оператор действует на квантовые числа первого вектора, второй - второго

$$\left\langle \gamma j_1 j_2; j \right\| [\hat{U}^{(k_1)} \otimes \hat{V}^{(k_2)}]^k_q \left\| \gamma' j_1' j_2'; j' \right\rangle = \sum_{\gamma''} \hat{j}\hat{j}'\hat{k} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j_1' & j_2' & j' \\ k_1 & k_2 & k \end{Bmatrix} \cdot$$

$$\left\langle \gamma j_1 \right\| \hat{U}^{(k_1)} \left\| \gamma'' j_1' \right\rangle \left\langle \gamma'' j_2 \right\| \hat{V}^{(k_2)} \left\| \gamma' j_2' \right\rangle$$