

QM 12th week - 2 (THU)

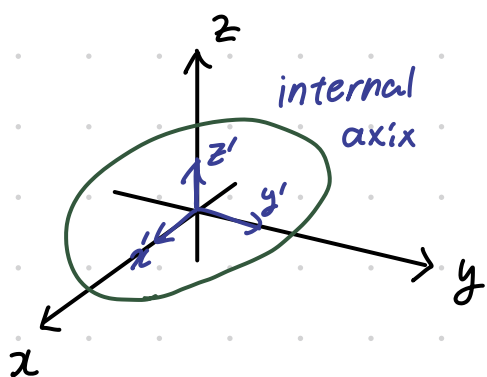
Euler Rotation.

지금까지는 회전을 나타낼 때 회전축 $\hat{n}$ 과 회전각 ϕ 을 지정했다.

총 3개의 real parameter가 필요했던 것이다. ($\hat{n}:(\alpha, \beta), \phi$)

Euler Rotation: 어떤 회전이든 3개의 고정축에 대한 각 회전 과정의 연속된 결과로 나타낼 수 있다.

How it works?



① $\hat{z}$ 에 대해 α 돌림. $R_z(\alpha)$

② $\hat{y}'$ 에 대해 β 돌림 $R_{y'}(\beta)$

③ $\hat{z}'$ 에 대해 γ 돌림. $R_{z'}(\gamma)$

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha)$$

우리는 $R_{y'}(\beta)$ 를 space-axis 에 대한 표현으로 바꾸고 싶다.

$R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) = R_z(\alpha) R_y(\beta)$ 라는 걸 경험적으로 알 수 있으므로,

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha)$$

$R_{z'}(\gamma)$ 도 같은 논리로, $R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) = R_{y'}(\beta) R_z(\gamma)$ 인걸 볼 수 있다.

$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) R_{y'}^{-1}(\beta)$$

$R(\alpha, \beta, \gamma)$ 공식에 $R_{z'}(\gamma)$ 부터 치환해 넣어보자.

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \underbrace{(R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) R_{y'}^{-1}(\beta))}_{1} R_{y'}(\beta) R_z(\alpha)$$

$$= (R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha)) \underbrace{R_z(\gamma) R_z(\alpha)}_{\text{commute}}$$

$$= R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$$

$$\therefore R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$$

$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z'(\gamma) R_y'(\beta) R_z(\alpha)$ 와 비교해 보자. α 와 γ 의 위치가 바뀌게 특징적이다.

2차원 공간에서 이러한 회전을 행렬식으로 표현해 보자.

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = D_z(\alpha) D_y(\beta) D_z(\gamma)$$

$$= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\gamma}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

우리는 위 행렬을 " $j=\frac{1}{2}$ irreducible representation of the rotation operator $D(\alpha, \beta, \gamma)$ " 라고 부른다.

$$D_{m'm}^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j=\frac{1}{2}, m' | e^{-iJ_z\alpha/\hbar} e^{-iJ_y\beta/\hbar} e^{-iJ_z\gamma/\hbar} | j=\frac{1}{2}, m \rangle$$

Eigenvalues and eigenvectors of angular momentum operator in higher dimension

Introduce total angular momentum : $J^2 = \sum_i J_i^2$.

J^2 은 모든 방향의 J 와 commute 한다! $[J^2, J_i] = 0$ for $\forall i$

Simultaneous eigenket. $J^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle$, $J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle$

Introduce Ladder operators. $J_{\pm} = J_x \pm i J_y$, $J_{\pm}^{\dagger} = J_{\mp}$

$$\left\{ \begin{array}{ll} [J_+, J_-] = 2\hbar J_z & \text{proof) } [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = [J_x, -iJ_y] + [iJ_y, J_x] = -i(i\hbar J_z) + i(-i\hbar J_z) \\ [J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm} & \text{proof) } [J_z, J_x \pm iJ_y] = i\hbar J_y \pm i(-i\hbar J_x) = \pm\hbar J_x + i\hbar J_y = \pm\hbar(J_x \pm iJ_y) = \pm\hbar J_{\pm} \\ [J^2, J_{\pm}] = 0 & \text{proof) } [J^2, J_i] = 0 \quad \forall i \text{ 를 이용.} \end{array} \right.$$

$$J_z (J_{\pm} |a, b\rangle) = ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm} J_z) |a, b\rangle = (b \pm \hbar) (J_{\pm} |a, b\rangle)$$

$$J^2 (J_{\pm} |a, b\rangle) = J_{\pm} (J^2 |a, b\rangle) = a (J_{\pm} |a, b\rangle)$$

따라서 계수 $C_{\pm}$ 에 대해, $J_{\pm} |a, b\rangle = C_{\pm} |a, b \pm \hbar\rangle$ 이다.

C_{+} 의 정확한 형태를 나중에 normalization을 통해 찾을 것이다.

$\langle b$ 에는 boundary가 있으며, a 로 결정된다

$$a \geq b^2$$

$$\text{proof) } J^2 - J_z^2 = J_x^2 + J_y^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) = \frac{1}{2} (J_-^{\dagger} J_- + J_+^{\dagger} J_+)$$

$$\langle a, b | J^2 - J_z^2 | a, b \rangle = \frac{1}{2} \{ \langle a, b | J_-^{\dagger} J_- | a, b \rangle + \langle a, b | J_+^{\dagger} J_+ | a, b \rangle \}$$

$$a - b^2 \geq 0$$

$$J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0 \Rightarrow J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$$

$$J_- |a, b_{\min}\rangle = 0 \Rightarrow J_+ J_- |a, b_{\min}\rangle = 0$$

$$J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

$$J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_{\max}\rangle = (a - b_{\max}^2 - \hbar b_{\max}) |a, b_{\max}\rangle = 0$$

$$\therefore a - b_{\max}^2 - \hbar b_{\max} = 0, \quad a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar)$$

같은 전개로,

$$J_+ J_- = (J_x + i J_y)(J_x - i J_y) = J^2 - J_z^2 - i[J_x, J_y] = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$

$$\therefore a - b_{\min}^2 + \hbar b_{\min} = 0, \quad a = b_{\min}(b_{\min} - \hbar)$$

$$b_{\min} = -b_{\max} \text{임을 알 수 있다. } a = (-b_{\max})\{(-b_{\max}) - \hbar\} = b_{\max}(b_{\max} + \hbar)$$

$$b \text{가 } n+1 \text{ 가지의 값을 가질 수 있다면, } b_{\max} = b_{\min} + n\hbar$$

$$\Rightarrow b_{\max} = \frac{n}{2}\hbar$$

$\langle \text{Quantum number } j \rangle$

$$j = \frac{b_{\max}}{\hbar} = \frac{n}{2}$$

n 이 홀수면 j 는 half integer, 짝수면 j 는 integer. 총 $2j+1$ 개의 state가 존재.

$$a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar) = j(j+1)\hbar^2$$

$\langle \text{Quantum number } m \rangle$

$$b = m\hbar$$

m : expectation value of z -component angular momentum

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$$

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$$

$\langle \text{Matrix element} \rangle$

$$J^2 : \langle j', m' | J^2 | j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$J_z : \langle j', m' | J_z | j, m \rangle = m\hbar \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$J_+ : \langle j', m' | J_z | j, m \rangle = C_{jm}^+ \langle j', m' | j, m+1 \rangle = C_{jm}^+ \delta_{jj'} \delta_{m', m+1}$$

$$\langle j', m' | J_- J_+ | j, m \rangle = \langle j', m' | J_+ J_- | j, m \rangle = \langle j', m'+1 | j, m+1 \rangle = |C_{jm}^+|^2 \delta_{jj'} \delta_{m, m'}$$

$$= \langle j', m' | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z | j, m \rangle = \{j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2\} \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$C_{jm}^+ = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

이렇게 raising operator의 계수가 결정되었다.

비슷한 방식으로,

$$\langle j', m' | J_+ J_- | j, m \rangle = |C_{jm}^-|^2 \delta_{jj'} \delta_{mm'} = \langle j', m' | J^2 - J_z^2 + \hbar J_z | j, m \rangle = \{j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2\} \delta \delta$$

$$C_{jm}^- = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

전부 정리하면,

$$\begin{cases} J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle \\ J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \\ \langle j', m' | J_{\pm} | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \delta_{jj'} \delta_{m', m \pm 1} \end{cases}$$

$D(R)$ 의 matrix representation

→ 이것은 total angular momentum 을 바꾸지 않는다.

Total angular momentum 과 commute 해야 한다는 의미.

Translation 을 해도 momentum 이 바뀌지 않는 관계와 유사.

$|j, m\rangle$ 과 $D(R) |j, m\rangle$ 은 J^2 에 대해 똑같은 eigenvalue $j(j+1)\hbar^2$ 을 가진다.

$(2j+1)$ - dimension irreducible representation of $D(R)$

$$\underline{D_{(R)}^{(j)}{}_{mm'}} = \langle j, m' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \hat{n} \phi\right) | j, m \rangle$$

$(2j+1) \times (2j+1)$
matrix.

Bra 와 ket 의 j 값이 같음에 주목하라.

이제 우리는 모든 j 에 대한 회전을 하나의 행렬로 나타낼 수 있다.

$$\begin{pmatrix} \boxed{D^{1/2}(R)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{D^1(R)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{D^{3/2}(R)} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \boxed{D^j(R)} \end{pmatrix}$$

Diagram showing a block diagonal matrix with blocks $D^{1/2}(R)$, $D^1(R)$, $D^{3/2}(R)$, ..., $D^j(R)$. The dimensions of the blocks are indicated by orange brackets: 2 for $D^{1/2}(R)$, 3 for $D^1(R)$, 4 for $D^{3/2}(R)$, and $2j+1$ for $D^j(R)$.

행렬 요소를 이용해 rotated state를 expand 할 수 있다.

$$\begin{aligned} D(R) |j, m\rangle &= \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m' | D(R) |j, m\rangle \\ &= \sum_{m'} |j, m'\rangle D_{mm'}^{(j)}(R) \end{aligned}$$

Euler rotation을 적용하자.

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j, m' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_x \alpha\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_z \gamma\right) |j, m\rangle \\ &= e^{-im'\alpha} e^{-im\gamma} \langle j, m' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right) |j, m\rangle \end{aligned}$$

새로운 matrix $d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ 를 정의하자.

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) \equiv \langle j, m' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right) |j, m\rangle$$

$j = \frac{1}{2}$ 일 경우 우리가 익히 알던 2×2 matrix이다.

$$d^{1/2} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

$j=1$ 이어서 m 값이 3가지인 경우는 어떤가?

J_y 를 ladder operator 를 이용해 나타내자.

$$J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i}$$

$$J_{+m',m}^{(j=1)} = \sqrt{(1-m)(1+m+1)} \hbar \delta_{m',m+1}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} m'=1 \\ m'=0 \\ m'=-1 \end{array}$$

$$J_{-m',m}^{(j=1)} = \sqrt{(1+m)(1-m+1)} \hbar \delta_{m',m-1}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}$$

$$J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

이제 $\exp(-i J_y \beta / \hbar)$ 의 테일러 전개를 계산할 때다.

$$\left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar} \right)^3 = \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar} \quad \text{임을 확인해 보자.}$$

$$\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ 0 & 4 & 0 \\ -2 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i2\sqrt{2} & 0 \\ i2\sqrt{2} & 0 & -i2\sqrt{2} \\ 0 & i2\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{2} & 0 \\ i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

편의를 위해 $\omega = \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}$ 라고 쓰고, 테일러 전개. $\omega^3 = \omega$ 이용.

$$\begin{aligned} \exp\left(-i \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar} \beta\right) &= \exp(-i \omega \beta) = 1 - i \omega \beta + \frac{1}{2} (-i)^2 (\omega \beta)^2 \\ &\quad + \frac{1}{3!} (-i)^3 (\omega \beta)^3 + \frac{1}{4!} (-i)^4 (\omega \beta)^4 + \dots \\ &= 1 - i \omega \beta - \frac{1}{2} (\omega \beta)^2 + i \frac{1}{3!} \omega \beta^3 + \frac{1}{4!} \omega^2 \beta^4 \\ &\quad - i \frac{1}{5!} \omega \beta^5 - \frac{1}{6!} \omega^2 \beta^6 + \dots \\ &= 1 - \omega^2 (1 - \cos \beta) - i \omega \sin \beta \end{aligned}$$

$$\cos \beta = 1 - \frac{1}{2!} \beta^2 + \frac{1}{4!} \beta^4 - \frac{1}{6!} \beta^6 + \dots$$

$$\sin \beta = \beta - \frac{1}{3!} \beta^3 + \frac{1}{5!} \beta^5 + \dots$$

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