

3.8.4. Clebsch - Gordan Coefficients and Rotation matrices

2개 입자 (총은 오비탈과 spin) 로 이루어진 시스템에서, 첫번째 입자에 대한 회전 연산자 $D^{(j_1)}(R)$ 과 두 번째 입자에 대한 회전 연산자 $D^{(j_2)}(R)$ 가 있다.

그리고 이것의 tensor product $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ 는 $\mathcal{T} = \mathcal{T}_1 \otimes \mathcal{T}_2$ 에 의해 generate 된다. j 가 서로 다른 상태끼리는 $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ 연산을 해도 섞이지 않는다. 2-electrons system 에서 singlet과 triplet을 구분한 것 처럼 말이다.

따라서 $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ matrix 는 각각의 j 값 $(|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2)$ 에 대한 회전을 나타내는 block 으로 쪼개진다.

$$\begin{pmatrix} \boxed{D^{(j_1+j_2)}} & & \\ & \boxed{D^{(j_1+j_2-1)}} & \\ & & \ddots \\ & & & \boxed{D^{(|j_1-j_2|)}} \end{pmatrix}$$

Group theory notation 으로는,

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = D^{(j_1+j_2)} \oplus D^{(j_1+j_2-1)} \oplus \dots \oplus D^{(|j_1-j_2|)}$$

Clebsch - Gordan series $D_{m_1 m_1'}^{(j_1)} D_{m_2 m_2'}^{(j_2)}$ 를 $D_{m m'}^{(j)}$ 의 합으로 나타내는 법.

$$D_{m_1 m_1'}^{(j_1)} D_{m_2 m_2'}^{(j_2)} = \sum_j \sum_m \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_1; j m' \rangle D_{m m'}^{(j)} \quad \left(\begin{smallmatrix} j_1 & j_2 \\ j \end{smallmatrix} \right) \star$$

LHS 는 이와 같다

$$\langle j_1 j_2; m_1' m_2' | D_{(R)} | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = \langle j_1 m_1' | D^{(j_1)} | j_1 m_1 \rangle \langle j_2 m_2' | D^{(j_2)} | j_2 m_2 \rangle = D_{m_1 m_1'}^{(j_1)} D_{m_2 m_2'}^{(j_2)}$$

연산에 사용한 $|\dot{j}_1 \dot{j}_2; m_1 m_2\rangle$ 을 CG 를 사용해 $|\dot{j}_1 \dot{j}_2; j m\rangle$ basis 로 풀어 적을 수 있다.

$$\begin{aligned} \langle \dot{j}_1 \dot{j}_2; m'_1 m'_2 | D_{(R)} | \dot{j}_1 \dot{j}_2; m_1 m_2 \rangle &= \sum_{\dot{j}} \sum_{\dot{m}} \sum_{\dot{j}'} \sum_{\dot{m}'} \langle \dot{j}_1 \dot{j}_2; \dot{j}' m' | \dot{j}_1 \dot{j}_2; m'_1 m'_2 \rangle \langle \dot{j}_1 \dot{j}_2; m_1 m_1 | \dot{j}_1 \dot{j}_2; j m \rangle \\ &\quad \times \langle \dot{j}_1 \dot{j}_2; j' m' | D_{(R)} | \dot{j}_1 \dot{j}_2; j m \rangle \\ &= \sum_{\dot{j}} \sum_{\dot{m}} \sum_{\dot{j}'} \sum_{\dot{m}'} \langle \dot{j}_1 \dot{j}_2; \dot{j}' m' | \dot{j}_1 \dot{j}_2; m'_1 m'_2 \rangle \langle \dot{j}_1 \dot{j}_2; m_1 m_1 | \dot{j}_1 \dot{j}_2; j m \rangle D_{m' m}^{(j)} \delta_{j' j} \end{aligned}$$

예전 강의에서 보았던 spherical harmonics 와 rotation operator 의 연결

$$D_{m0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^{m*}(\theta, \phi) \Big|_{\theta=\beta, \phi=\alpha} \quad (\star \bullet) \text{ 을 이용한다.}$$

$(\star \star)$ 예) $l_1 \rightarrow l_1, l_2 \rightarrow l_2, m'_1 \rightarrow 0, m'_2 \rightarrow 0, j \rightarrow l', m' \rightarrow 0, m \rightarrow m$ 대입

$$D_{m,0}^{(l_1)} D_{m,0}^{(l_2)} = \sum_{l'} \sum_{m'} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l' m \rangle \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l' 0 \rangle D_{m'0}^{(l')}$$

$(\star \bullet)$ 을 대입 $\hookrightarrow$ complex conjugate

$$Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) = \frac{\sqrt{2l_1+1} \sqrt{2l_2+1}}{4\pi} \sum_{l'} \sum_{m'} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l' m \rangle \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l' 0 \rangle \sqrt{\frac{4\pi}{2l'+1}} Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)$$

양변에 $Y_l^{m'*}(\theta, \phi)$ 을 곱한 뒤 입체각 적분 $\int d\Omega Y_l^{m'*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) = \delta_{mm'} \delta_{ll'}$

이 되어 summation 에 크로네커 델타를 만족하는 항만 튀어나온다.

$$\int d\Omega Y_l^{m'*} Y_{l_1}^{m_1} Y_{l_2}^{m_2} = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l m \rangle \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l 0 \rangle Y_l^m(\theta, \phi)$$

이게 무슨 의미지?

Wigner - Eckart theorem 의 special case 라고 한다.

3.11 Tensor operator

① Cartesian tensor

우리가 알던 벡터' 1-rank tensor, rotation property : $V_i \longrightarrow V'_i = \mathcal{D}_{(R)}^\dagger V_i \mathcal{D}_{(R)} = \sum_j R_{ij} V_j$

infinitesimal rotation $\mathcal{D}_{(R)} = 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon \mathcal{J} \cdot \hat{n}$

$$V_i + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_i, \mathcal{J} \cdot \hat{n}] = \sum_j R_{ij}(\epsilon) V_j$$

commute relation of vectors $[V_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k$

<Example: reduction of a Cartesian tensor into irreducible spherical tensors>

Cartesian tensor of 2 rank is a dyadic formed out of two vectors U and V

$$T = U \otimes V \quad T_{ij} = U_i V_j$$

reducible, 회전 에 대해 특성이 제각각인 성분으로 쪼갤 수 있다.

$$U_i V_j = \frac{U \cdot V}{3} \delta_{ij} + \frac{U_i V_j - U_j V_i}{2} + \left(\frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{U \cdot V}{3} \delta_{ij} \right)$$

$\frac{U \cdot V}{3} \delta_{ij}$: 이걸 스칼라, rotation invariant 1 independent component

$\frac{U_i V_j - U_j V_i}{2} = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} (U \times V)_k$: 이걸 벡터의 rotation property 를 가짐.
3 independent component

$\left(\frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{U \cdot V}{3} \delta_{ij} \right)$: 이걸 2-rank tensor, 그런데 symmetric 에 trace less. $6 - 1 = 5$ independent component

$U_i V_j$ 의 independent component 는 당연히 9개

좌변과 우변의 independent component 수를 비교,

$$9 = 1 + 3 + 5.$$

1 은 $l=0$ 을, 3 은 $l=1$, 5 는 $l=2$ 에 의한 것 이라는 직관적 연결.

Definition of spherical tensor

$(\theta, \phi) = \hat{n}$ 을 벡터 V 로 대체 $\rightarrow$ 무슨 의미이고 논리인지 모르겠다.

spherical tensor of rank k .

$$T_{m=q}^{(k)} = Y_{\lambda=k}^{m=q} (V)$$

replace $\cos \theta = \frac{z}{r} = (\hat{n})_z = V_z$

$$\frac{x}{r} = \sin \theta \cos \phi, \quad \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \phi$$

$$(\sin \theta) e^{\pm i \phi} = \sin \theta (\cos \phi \pm i \sin \phi) = \frac{x \pm i y}{r} = V_x \pm i V_y$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \rightarrow T_0^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} V_z$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x \pm i y}{\sqrt{2} r} \rightarrow T_{\pm 1}^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left(\mp \frac{V_x \pm i V_y}{\sqrt{2}} \right)$$

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x \pm i y)^2}{r^2} \rightarrow T_{\pm 2}^{(2)} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (V_x \pm i V_y)^2$$

review how Y_l^m transform under rotations

$$D(R^{-1}) |l m\rangle = \sum_{m'} |l m'\rangle D_{m'm}(R^{-1})$$

$$D(R) |\hat{n}\rangle = |\hat{n}'\rangle \quad \text{o/p.}$$

$$\langle \hat{n} | D(R^{-1}) |l m\rangle = \sum_{m'} \langle \hat{n} |l m'\rangle D_{m'm}(R^{-1})$$

$$Y_l^m(\hat{n}') = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\hat{n}) D_{m'm}(R^{-1})$$

If there is an operator that acts like $Y_l^m(V) \rightarrow$ 무슨 의미지?

$$D_{(R)}^\dagger Y_l^m(V) D_{(R)}$$

무슨 논리일까? $Y_l^m(\hat{n}') = Y_l^m(V') = D_{(R)}^\dagger Y_l^m(V) D_{(R)}$ 라는 뜻인가?

$D_{(R)}$ 로 샌드위치하는 Y_l^m 안의 V 에 작용한다고?

정의) k -rank spherical tensor 는 $(2k+1)$ components 로 이루어져 있으며,

각 component 는 이렇듯/ 생겼다.

$$D_{(R)}^\dagger T_q^{(k)} D_{(R)} = \sum_{q'=-k}^k D_{qq'}^{(k)*}(R) T_{q'}^{(k)}$$

위와 동치 (conjugat transpose) T 는 실수라고 가정한 건가?

$$D_{(R)} T_q^{(k)} D_{(R)}^\dagger = \sum_{q'=-k}^k D_{q'q}^{(k)}(R) T_{q'}^{(k)}$$

T 가 index 가 2개 밖에 없는데 대체 어느 부분이 tensor 라는 거지?

infinitesimal rotation $D_{(R)} = 1 - \frac{i\varepsilon \mathcal{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}$ 식을 집어 넣으면,

$$\left(1 - \frac{i\varepsilon \mathcal{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) T_q^{(k)} \left(1 + \frac{i\varepsilon \mathcal{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) = \sum_{q'=-k}^k \langle k q' | \left(1 - \frac{i\varepsilon \mathcal{J} \cdot \hat{n}}{\hbar}\right) | k q \rangle T_{q'}^{(k)}$$

$$T_q^{(k)} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} [\mathcal{J} \cdot \hat{n}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k \left\{ \delta_{qq'} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle k q' | \mathcal{J} \cdot \hat{n} | k q \rangle \right\} T_{q'}^{(k)}$$

결과적으로,

$$[\mathcal{J} \cdot \hat{n}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k \langle k q' | \mathcal{J} \cdot \hat{n} | k q \rangle \quad (1) a$$

식 a 에 $\hat{n} = \hat{z}$ 를 대입하면,

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k \langle k q' | J_z | k q \rangle = \sum_{q'=-k}^k \hbar q \delta_{qq'} = \hbar q$$

$$\therefore [J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q$$

식 a 에 $\hat{n} = \hat{s}_z \pm i\hat{y}$ 를 대입하면,

$$[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k \langle k q' | J_{\pm} | k q \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \delta_{q' q \pm 1}$$

$$\therefore [J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}$$

Rotation generator 와의 commutation 결과가 마치 eigen state 에 바로 generator

를 취했을 때 나오는 형식과 비슷하다. 나는 아직 $T_q^{(k)}$ 의 정체를 모르겠고 쓸모도 모르겠다.

위의 모든 성질은 $[V_i, J] = i \epsilon_{ijk} \hbar V_k$ 로归结된다. (벡터 표현)

→ 교수님 말씀인데, 왜 갑자기 이 맥락에서 V 가 튀어 나오는지 모르겠다.

아무튼 이 commutation relation 을 지키는 걸 spherical tensor 라고 한다.

3.11.3 Product of tensors

$$\text{remember: } U_{\pm} = \mp \frac{U_x \pm iU_y}{\sqrt{2}}, \quad U_0 = U_z$$

$$T_0^{(0)} = \frac{-U \cdot V}{3} = \frac{1}{3} (U_{+1} V_{-1} + U_{-1} V_{+1} - U_0 V_0)$$

$$T_q^{(1)} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (U \times V)_q$$

$$T_{\pm 2}^{(2)} = U_{\pm 1} V_{\pm 1}$$

$$T_{\pm 1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (U_{\pm 1} V_0 + U_0 V_{\pm 1})$$

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}} (U_{+1} V_{-1} + 2U_0 V_0 + U_{-1} V_{+1})$$

전부다 스칼라 값인 거 같은데 왜 텐서라고 하는 건지 모르겠다.

Example) Y_ℓ^m 과 $T_\ell^{(k)}$ 를 비교해 보자.

Y_0^2 과 $T_2^{(2)}$ 를 비교.

$$Y_0^2 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{3z^2 - r^2}{r^2}$$

$$\text{이때, } 3z^2 - r^2 = 2z^2 - (x^2 + y^2) = 2z^2 + 2 \left[-\frac{x+iy}{\sqrt{2}} \cdot \frac{x-iy}{\sqrt{2}} \right]$$

$U = V = 1/r$ 인 특수한 경우라면,

$$3z^2 - r^2 = 2U_0V_0 + U_{+1}V_{-1} + U_{-1}V_{+1}$$

이게 $T_0^{(2)}$ 랑 같다고?

Theorem 5. $X_{g_1}^{(k_1)}, Z_{g_2}^{(k_2)}$: irreducible spherical tensor

then, $T_g^{(k)} = \sum_{g_1} \sum_{g_2} \langle k_1 k_2 ; g_1 g_2 | k k ; g \rangle X_{g_1}^{(k_1)} Z_{g_2}^{(k_2)}$

is a spherical irreducible tensor of rank k .

proof

tensor under rotation

$$\begin{aligned}
 D^{\dagger}(R) T_g^{(k)} D(R) &= \sum_{g_1} \sum_{g_2} \langle k_1 k_2 ; g_1 g_2 | k k ; g \rangle D^{\dagger}(R) X_{g_1}^{(k_1)} D(R) D^{\dagger}(R) Z_{g_2}^{(k_2)} D(R) \\
 &= \sum_{g_1} \sum_{g_2} \sum_{g'_1} \sum_{g'_2} \langle k_1 k_2 ; g_1 g_2 | k k ; g \rangle X_{g'_1}^{(k_1)} D_{g'_1 g_1}^{(k_1)}(R^{-1}) Z_{g'_2}^{(k_2)} D_{g'_2 g_2}^{(k_2)}(R^{-1}) \\
 &= \sum_{g_1} \sum_{g_2} \sum_{g'_1} \sum_{g'_2} \sum_{k''} \sum_{g''} \sum_{g'} \langle k_1 k_2 ; g_1 g_2 | k k ; g \rangle \langle k_1 k_2 ; g'_1 g'_2 | k_1 k_2 ; k'' g' \rangle \\
 &\quad \langle k_1 k_2 ; g_1 g_2 | k_1 k_2 ; k'' g'' \rangle D_{g' g''}^{(k'')}(R^{-1}) X_{g'_1}^{(k_1)} Z_{g'_2}^{(k_2)} \\
 &= \sum_{g'_1} \sum_{g'_2} \sum_{k''} \sum_{g''} \sum_{g'} \delta_{k k''} \delta_{g g''} \langle k_1 k_2 ; g'_1 g'_2 | k_1 k_2 ; k'' g' \rangle D_{g' g''}^{(k')}(R^{-1}) X_{g'_1}^{(k_1)} Z_{g'_2}^{(k_2)} \\
 &= \sum_{g'} \left(\sum_{g'_1} \sum_{g'_2} \langle k_1 k_2 ; g'_1 g'_2 | k k ; g' \rangle X_{g'_1}^{(k_1)} Z_{g'_2}^{(k_2)} \right) D_{g' g}^{(k)}(R^{-1}) \\
 &= \sum_{g'} T_{g'}^{(k)} D_{g' g}^{(k)}(R^{-1}) = \sum_{g'} D_{g g'}^{(k)*} T_{g'}^{(k)}
 \end{aligned}$$

example) scalar product

$$k=0 \quad \bar{g}=0$$

$$T_0^{(0)} = \sum_{\bar{g}_1 \bar{g}_2} \frac{\langle k_1 k_2 ; \bar{g}_1 \bar{g}_2 | 00 \rangle}{\substack{\bar{g}_1 + \bar{g}_2 = 0 \\ \bar{g}_1 = -\bar{g}_2 = \bar{g}}} X_{\bar{g}_1}^{(k_1)} Z_{\bar{g}_2}^{(k_2)}$$

왜 $k_1 = k_2 = k = 0$
이어야 하는가?

$$\langle k k ; \bar{g} - \bar{g} | 00 \rangle = \frac{(-1)^{k-\bar{g}}}{\sqrt{2k+1}}$$

norm: $\frac{(-1)^k}{\sqrt{2k+1}}$

$$T_0^{(0)} = \vec{X} \cdot \vec{Z} = X^{(1)} \otimes Z^{(1)} = \sum_{\bar{g}=\pm 1, 0} (-1)^{\bar{g}} X_{\bar{g}}^{(1)} \cdot Z_{-\bar{g}}^{(-1)}$$

이게 $\hat{\epsilon}$ tensor operator