קוונטים 2 – תרגול 5
אופרטורים טנזוריים

מתרגל: זמיר הלר-אלגזי

תוכן העניינים

1 אופרטורים טנזוריים קרטזיים 2

2 טנזורים כדוריים 2

2.1 מעבר מבסיס קרטזי לכדורי 3

3 משפט ויגנר-אקרט 5

4 נספח – הרמוניות ספריות $Y_m^{(\ell)}$ 11

1 אופרטורים טנזוריים קרטזיים

זכרו שתחת סיבוב R, אופרטור O עובר טרנספורמציה באמצעות המטריצה $\mathcal{D}(R)$ כך:

$$O \longrightarrow O' = \mathcal{D}(R)\, O \mathcal{D}^{\dagger}(R), \qquad \mathcal{D}(R) = \exp\left[-\frac{i\theta}{\hbar}\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\right] \tag{1.1}$$

נקרא לאופרטור O **סקלר** אם הוא לא משתנה תחת סיבובים (סימטרי לסיבובים), ולכן מתקיים

$$O' = O \iff [J_i, O] = 0 \tag{1.2}$$

כאשר $\mathbf{J}$ אופרטור התנ"ז, יוצר הסיבובים.

נקרא לשלשת אופרטורים $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$ **וקטור** אם הרכיבים (הקרטזיים) שלו מקיימים

$$\mathbf{V}' = R^{-1}\mathbf{V} \longleftrightarrow V_i' = R_{ij}^{-1}V_j \iff [J_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k \tag{1.3}$$

התנאי על יחסי החילוף נובע מפיתוח בטור טיילור של $\mathcal{D}$; עבור סיבוב בציר z בפיתוח אינפיניטסימלי ב-θ

$$\begin{cases} V_1' = \mathcal{D}V_1\mathcal{D}^{\dagger} \simeq \left(1 - \frac{i\theta}{\hbar}J_3\right)V_1\left(1 + \frac{i\theta}{\hbar}J_3\right) \simeq V_1 - \frac{i\theta}{\hbar}[J_3, V_1] \\ V_1' = V_1\cos\theta + V_2\sin\theta \simeq V_1 + V_2\theta \end{cases} \Longrightarrow [J_3, V_1] = i\hbar V_2 \tag{1.4}$$

וכך הלאה עבור סיבובים סביב הצירים האחרים. אופרטור המיקום $\mathbf{r} = (x, y, z)$ הוא וקטור,

$$[r_i, L_j] = [r_i, \epsilon_{jkl}r_kp_l] = \epsilon_{jkl}r_k[r_i, p_l] = i\hbar\epsilon_{jkl}r_k\delta_{il} = i\hbar\epsilon_{ijk}r_k \tag{1.5}$$

וגם אופרטור התנע $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ הוא וקטור,

$$[p_i, L_j] = [p_i, \epsilon_{jkl}r_kp_l] = \epsilon_{jkl}[p_i, r_k]p_l = -i\hbar\epsilon_{jkl}\delta_{ik}p_l = i\hbar\epsilon_{ijl}p_l \tag{1.6}$$

וכמובן אופרטור התנ"ז $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ וקטור[1] כי $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$.

נקרא לאופרטור **טנזור** אם הרכיבים (הקרטזיים) שלו עוברים טרנספורמציה כמו,

$$T'_{ijk\ldots} = \mathcal{D}(R)\, T_{ijk\ldots}\mathcal{D}^{\dagger}(R) = \sum_{i'j'k'\ldots} R_{ii'}^{-1}R_{jj'}^{-1}R_{kk'}^{-1}\cdots T_{i'j'k'\ldots} \tag{1.7}$$

דוגמא לאופרטור טנזור קרטזי מדרגה 2 היא מכפלה חיצונית בין שני וקטורים $T = \mathbf{U}\otimes\mathbf{V}$ (או ברכיבים $T_{ij} = U_iV_j$).

2 טנזורים כדוריים

טנזור כדורי מדרגה k מסומן $T^{(k)}$, ורכיביו הכדוריים הם $T_q^{(k)}$ כאשר $q = -k, -k+1, \ldots k-1, k$. הרכיבים $T_q^{(k)}$ עוברים טרנספורמציות סיבוב בדרך הבאה:

$$T_q^{(k)\prime} = \mathcal{D}T_q^{(k)}\mathcal{D}^{\dagger} = \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)}\mathcal{D}_{q'q}^{(k)} \tag{2.1}$$

[1] לא מדויק – וקטור הוא גם אי-זוגי תחת שיקוף, ואילו *פסאודו-וקטור* הוא זוגי תחת שיקוף. תנ"ז הוא פסאודו-וקטור.

כאשר $\mathcal{D}^{(k)}_{q'q}$ הם הבלוקים מסדר k של $\mathcal{D}$. זאת אומרת, בעוד שבבסיס הקרטזי טנזור T עובר טרנספורמציה עם R^{-1} (מטריצת הסיבוב במרחב האוקלידי), בבסיס הכדורי טנזור T עבור טרנספורמציה לפי בלוקים כמו $|\ell m\rangle$.

באנלוגיה לפעולתם של $\{J_z, J_\pm\}$ על $|\ell m\rangle$, הרכיבים הכדוריים של $T^{(k)}_q$ מקיימים

$$\begin{aligned} \left[J_z, T^{(k)}_q\right] &= \hbar q T^{(k)}_q \\ \left[J_\pm, T^{(k)}_q\right] &= \hbar\sqrt{k\left(k+1\right)-q\left(q\pm1\right)}T^{(k)}_{q\pm1} \end{aligned} \tag{2.2}$$

2.1 מעבר מבסיס קרטזי לכדורי

אופרטור וקטורי $\mathbf{V}$ עם רכיבים קרטזיים (V_x, V_y, V_z) הוא טנזור כדורי $V^{(1)}_q$ מדרגה 1, שרכיביו הכדוריים נתונים על-ידי

$$V^{(1)}_\pm = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\left(V_x \pm iV_y\right), \qquad V^{(1)}_0 = V_z \tag{2.3}$$

או בכתיב מטריצות,

$$\begin{pmatrix} V^{(1)}_1 \\ V^{(1)}_0 \\ V^{(1)}_{-1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}}_{U_{qi}} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \longleftrightarrow V^{(1)}_q = \sum_i U_{qi}V_i \tag{2.4}$$

הטנזור הקרטזי מדרגה 2 $T = \mathbf{U}\otimes\mathbf{V}$ הוא **טנזור פריק**, כלומר אפשר לפרק אותו לסכום של טנזורים כדוריים מדרגות שונות:

$$T_{ij} = U_iV_j = \underbrace{\left(\frac{1}{3}\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\delta_{ij}\right)}_{\mathrm{I}} + \underbrace{\left(\frac{U_iV_j - U_jV_i}{2}\right)}_{\mathrm{II}} + \underbrace{\left(\frac{U_iV_j + U_jV_i}{2} - \frac{1}{3}\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}\delta_{ij}\right)}_{\mathrm{III}} \tag{2.5}$$

- איבר I הוא מכפלה סקלרית – טנזור כדורי מדרגה 0 (סקלר, רכיב אחד).
- איבר II הוא מכפלה וקטורית – טנזור כדורי מדרגה 1 (וקטור, 3 רכיבים).
- איבר III הוא טנזור סימטרי חסר עקבה – טנזור כדורי מדרגה 2 (מטריצה סימטרית חסרת עקבה, 5 רכיבים).

ניתן לבנות טנזורים כדוריים מדרגות גבוהות יותר באמצעות מכפלה חיצונית. כך לדוגמא הרכיבים הכדוריים של הטנזור $T = \mathbf{U}\otimes\mathbf{V}$ נתונים ע"י

$$T^{(k)}_q = \sum_{q_1,q_2}\left\langle k_1k_2;q_1q_2|kq\right\rangle U^{(k_1)}_{q_1}V^{(k_2)}_{q_2} \tag{2.6}$$

באנלוגיה לחיבור תנ"ז

$$|JM\rangle = \sum_{m_1,m_2}\left\langle j_1j_2;m_1m_2|JM\right\rangle |j_1m_1\rangle\otimes|j_2m_2\rangle \tag{2.7}$$

תרגיל 1

בטאו את רכיביו הכדוריים של אופרטור המקום $\mathbf{r}$ באמצעות ההרמוניות-ספריות $Y_m^{(\ell)}$.

נכתוב את הרכיבים הקרטזיים של $\mathbf{r}=(x,y,z)$ בקואורדינטות כדוריות,

$$r_1 = r\sin\theta\cos\phi, \qquad r_2 = r\sin\theta\sin\phi, \qquad r_3 = \cos\theta \tag{2.8}$$

נעזר בהרמוניות-ספריות[2] $Y_m^{(\ell)}$ מדרגה $\ell=1$, כי $\mathbf{r}$ טנזור כדורי מדרגה 1 גם הוא:

$$\begin{cases} Y_1^{(1)} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{i\phi} \\ Y_0^{(1)} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta \\ Y_{-1}^{(1)} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{-i\phi} \end{cases} \implies \begin{cases} \sin\theta\cos\phi = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_{-1}^{(1)} - Y_1^{(1)}\right) \\ \sin\theta\sin\phi = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_{-1}^{(1)} + Y_1^{(1)}\right) \\ \cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_0^{(1)} \end{cases} \tag{2.9}$$

לכן

$$\begin{cases} x = r\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_{-1}^{(1)} - Y_1^{(1)}\right) \\ y = ir\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_{-1}^{(1)} + Y_1^{(1)}\right) \\ z = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_0^{(1)} \end{cases} \iff \begin{cases} Y_{\pm1}^{(1)} = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\frac{x\pm iy}{r} \\ Y_0^{(1)} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{z}{r} \end{cases} \tag{2.10}$$

אלה הרכיבים הקרטזיים של $\mathbf{r}$, מהם נמצא את הרכיבים הכדוריים

$$\boxed{r_q^{(1)} = \begin{cases} r_1^{(1)} = -\frac{x+iy}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_1^{(1)} \\ r_0^{(1)} = z = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_0^{(1)} \\ r_{-1}^{(1)} = \frac{x-iy}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{-1}^{(1)} \end{cases} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_q^{(1)}} \tag{2.11}$$

הרכיבים של הטנזור הכדורי $r_q^{(1)}$ פרופורציוניים ל-$Y_q^{(1)}$ עם אותו קבוע פרופורציה, $\sqrt{\frac{4\pi}{3}}r$.

[2] שימו לב שיש הרבה נוטציות להרמוניות-ספריות כמו Y_ℓ^m, $Y_{\ell m}$, $Y_m^{(\ell)}$. כשנתייחס לטנזורים כדוריים, נכתוב $Y_m^{(\ell)}$ כאשר האינדקס העליון בסוגריים יסמן את דרגת הטנזור.

3 משפט ויגנר-אקרט

משפט ויגנר-אקרט: אלמנטי מטריצה של $T_q^{(k)}$ בין מ"ע של תנ"ז $|j,m\rangle$ ו-$|j',m'\rangle$ פרופורציונים לקבוע כלשהו כפול מקדם קלבש-גורדן המתאים:

$$\boxed{\langle\alpha';j',m'|T_q^{(k)}|\alpha;j,m\rangle = \langle j,k;m,q|j',m'\rangle\left\langle\alpha'j'\middle\|T^{(k)}\middle\|\alpha j\right\rangle} \tag{3.1}$$

המספר $\left\langle\alpha'j'\middle\|T^{(k)}\middle\|\alpha j\right\rangle$ נקרא **אלמנט המטריצה המצומצם**, והוא בלתי-תלוי בהיטלים m,q ו-m'. α ו-α' הם מספרים קוונטים אחרים של המערכת, למשל רמת האנרגיה n באטום מימן.

תוצאה ישירה של משפט ויגנר-אקרט היא **כללי ברירה** — מובטח שאלמנט המטריצה יתאפס אם לא יקיים את כללי הברירה של חיבור תנ"ז,

$$m' = m+q, \qquad |k-q| \le j' \le k+q \tag{3.2}$$

טכנית זה נובע מהתאפסות של מקדמי קלבש-גורדן במשוואה (3.1), אך קונצפטואלית אנחנו מבינים את זה מהפרשנות של $T_q^{(k)}|jm\rangle$ כחיבור תנ"ז $\sim |kq\rangle\otimes|jm\rangle$, שמתפרק לתת-מרחב $|j'm'\rangle$ שחייב לקיים את כללי הברירה הללו.

משפט ויגנר-אקרט אומר לנו שכל אלמנט מטריצה מתחלק לשתי תרומות: תרומה *גיאומטרית* של מקדמי קלבש-גורדן $\langle j,k;m,q|j',m'\rangle$, ותרומה *דינמית* באלמנט המטריצה המצומצם $\left\langle\alpha'j'\middle\|T^{(k)}\middle\|\alpha j\right\rangle$. העובדה ש-$\left\langle\alpha'j'\middle\|T^{(k)}\middle\|\alpha j\right\rangle$ לא תלוי בהיטלים של התנ"ז בציר z נובעת מהשרירותיות בבחירת מערכת הצירים שלנו, כי אנחנו תמיד יכולים לסובב אותה לאיזה כיוון שנרצה. ההשפעה של מערכת הצירים על אלמנט המטריצה מוכלת כולה במקדמי קלבש-גורדן, ואין בהם דינמיקה.

המשמעות הפרקטית של משפט ויגנר-אקרט היא שאם נחשב רק אלמנט מטריצה *אחד* (לרוב נוח לבחור $\langle\alpha';j',0|T_0^{(k)}|\alpha;j,0\rangle$) ונחלק במקדם קלבש-גורדן המתאים נוכל למצוא את אלמנט המטריצה המצומצם $\left\langle\alpha'j'\middle\|T^{(k)}\middle\|\alpha j\right\rangle$. כדי למצוא את שאר אלמנטי המטריצות רק צריך להכפיל במקדם קלבש-גורדן בלי חישוב אינטגרלים מיותרים.

תרגיל 2

א. הראו כי לא ייתכן קוודרופול חשמלי

$$Q_{ij} = e\left(3r_ir_j - \delta_{ij}r^2\right) \tag{3.3}$$

עבור גרעין בעל ספין $I = \frac{1}{2}$ *(נהוג לסמן את הספין של הגרעין ב-I ולא ב-s).*

ב. נתון ערך התצפית של *מומנט הקוודרופול*,

$$q = \langle Q_{33}\rangle = e\,\langle \alpha; j, m' = j|\left(3z^2 - r^2\right)|\alpha; j, m = j\rangle \tag{3.4}$$

הביעו את אלמנטי המטריצה

$$A_{\alpha j m'} = e\,\langle \alpha; j, m'|\left(x^2 - y^2\right)|\alpha; j, m = j\rangle \tag{3.5}$$

באמצעות q ומקדמי קלבש-גורדן המתאימים.

א. הקוודרופול החשמלי Q_{ij} הוא טנזור כדורי מדרגה $k = 2$, ראו איבר III במשוואה (2.5). נכתוב את אלמנט המטריצה המבוקש,

$$\left\langle I' = \tfrac{1}{2}, I'_z \middle| Q_q^{(2)} \middle| I = \tfrac{1}{2}, I_z \right\rangle = ? \tag{3.6}$$

כללי הברירה ממשפט ויגנר-אקרט (או חיבור תנ"ז בבסיס הסכום) אומרים לנו כי

$$I'_z = q + I_z, \qquad |I - 2| \le I' \le I + 2 \tag{3.7}$$

כלומר $I' = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$, אבל $I' = \frac{1}{2}$ ולכן אלמנט המטריצה תמיד יתאפס (אורתוגונליות).

$$\boxed{\left\langle I' = \tfrac{1}{2}, I'_z \middle| Q_q^{(2)} \middle| I = \tfrac{1}{2}, I_z \right\rangle = 0} \tag{3.8}$$

ב. ראשית נשים לב כי

$$Y_0^{(2)} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2 - 1\right) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{3z^2 - r^2}{r^2} \tag{3.9}$$

לכן מומנט הקוודרופול הוא למעשה רכיב אחד של הטנזור הכדורי $Q_q^{(2)} = e\sqrt{\frac{16\pi}{5}}r^2 Y_q^{(2)}$. לפי משפט ויגנר-אקרט נפרק את אלמנט המטריצה q לפקטור הגיאומטרי (מקדם קלבש-גורדן) והפקטור הדינמי (אלמנט המטריצה המצומצם):

$$\begin{aligned} q &= \langle \alpha; j, j|Q_0^{(2)}|\alpha; j, j\rangle = \langle j, 2; j, 0|j, j\rangle\,\langle \alpha j\|Q^{(2)}\|\alpha j\rangle \\ &\implies \langle \alpha j\|Q^{(2)}\|\alpha j\rangle = \frac{q}{\langle j, 2; j, 0|j, j\rangle} \end{aligned} \tag{3.10}$$

משפט ויגנר-אקרט מבטיח לנו שכל אלמנט מטריצה של $Q^{(2)}$ פרופורציוני לאלמנט המצומצם, רק צריך למצוא את אלמנטי קלבש גורדן. האופרטור באלמנט המטריצה המבוקש $A_{\alpha j m'}$ הוא למעשה

$$e\left(x^2 - y^2\right) = er^2\sin^2\theta\frac{e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}}{2} = e\sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2\left(Y_2^{(2)} + Y_{-2}^{(2)}\right) = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(Q_2^{(2)} + Q_{-2}^{(2)}\right) \tag{3.11}$$

מתרגל: זמיר הלר-אלגזי

אזי

$$\begin{aligned} A_{\alpha j m'} &= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \alpha; j, m' | \left(Q_2^{(2)} + Q_{-2}^{(2)} \right) | \alpha; j, j \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \underbrace{\langle \alpha; j, m' | Q_2^{(2)} | \alpha; j, j \rangle}_{=0} + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \alpha; j, m' | Q_{-2}^{(2)} | \alpha; j, j \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \langle j, 2; j, -2 | j, m' \rangle \left\langle \alpha j \middle\| Q^{(2)} \middle\| \alpha j \right\rangle \\ &= \frac{q}{\sqrt{6}} \frac{\langle j, 2; j, -2 | j, m' \rangle}{\langle j, 2; j, 0 | j, j \rangle} \end{aligned} \tag{3.12}$$

סיימנו. שימו לב שלא היינו צריכים לבצע אינטגרל "נוסף" מלבד $q = \langle Q_{33} \rangle$, וכל שאר אלמנטי המטריצה הם רק הטלות של אלמנט המטריצה המצומצם בכיוונים שונים, עם מקדמי קלבש-גורדן שאפשר למצוא בטבלא בהינתן j, m'.

תרגיל 3

נתון האופרטור

$$V = axy \tag{3.13}$$

כאשר a הוא קבוע. האם האופרטור V הוא רכיב של אופרטור כדורי? מהם כללי הברירה עבור אלמנטי המטריצה של V בבסיס מצבי תנע זוויתי?

אם V רכיב של אופרטור כדורי הוא חייב לקיים את יחסי החילוף במשוואה (2.2), ובפרט בהפעלת J_z:

$$[J_z, V] = a\left([J_z, x]\, y + x\,[J_z, y]\right) = a\left(i\hbar y^2 - i\hbar x^2\right) \neq \hbar q V \tag{3.14}$$

אין אף q עבורו יחס החילוף המבוקש מתקיים, אז V לא רכיב של אופרטור כדורי. למרות זאת, כן אפשר לכתוב אותו כחיבור של שתי הרמוניות-ספריות, כי $xy \propto \sin^2\theta \sin\phi\cos\phi$ ו-$Y^{(2)}_{\pm 2} \propto \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$, אז

$$xy = \frac{r^2}{4i}\sin^2\theta\left(e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}\right) \propto Y^{(2)}_2 - Y^{(2)}_{-2} \tag{3.15}$$

מכיוון שביקשו רק את כללי הברירה ואלה לא תלויים בקבועי פרופורציה, אנחנו לא זקוקים להם. אלמנט המטריצה של V בבסיס מצבי התנ"ז הם

$$\langle \ell' m' | V | \ell m\rangle = a\,\langle \ell' m' | xy | \ell m\rangle \propto \langle \ell' m' | Y^{(2)}_2 | \ell m\rangle - \langle \ell' m' | Y^{(2)}_{-2} | \ell m\rangle \tag{3.16}$$

כללי הברירה על ההיטל בציר z הם

$$m' = m \pm 2 \implies \Delta m = \pm 2 \tag{3.17}$$

וכללי הברירה על התנ"ז הכולל ℓ' הם

$$\ell' \in \{\ell - 2, \ell - 1, \ell, \ell + 1, \ell + 2\} \implies \Delta\ell = 0, \pm 1, \pm 2 \tag{3.18}$$

לסיכום כללי הברירה הם

$$\boxed{\Delta m = \pm 2, \qquad \Delta\ell = 0, \pm 1, \pm 2} \tag{3.19}$$

אלה רק כללי הברירה שנובעים ממשפט ויגנר-אקרט, וייתכן שמשיקולי זוגיות נקבל עוד כללי ברירה.

תרגיל 4

חשבו את אלמנטי המטריצה של הרכיבים הקרטזיים של האופרטור $\mathbf{r}$ בתת-המרחב המנוון של הרמה המעוררת הראשונה של אטום המימן.
נתונות הפונקציות הרדיאליות של אטום מימן,

$$R_{20}(r) = 2\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0}, \qquad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0} \tag{3.20}$$

נאיבית, נראה שעלינו לחשב את מטריצה סימטרית 4×4 לכל רכיב r_i (כי r_i הרמיטי, אחרת המטריצה לא בהכרח סימטרית), כלומר 30 אינטגרלים. אנחנו נחשב רק אינטגרל אחד.

הרמה המעוררת הראשונה היא $n=2$, ואלמנטי המטריצה המבוקשים הם $\langle 2\ell' m'|r_i|2\ell m\rangle$. אנחנו יודעים ש-r_i אנטי-סימטריים תחת שיקוף Π, ואילו $\Pi\left|\ell m\right\rangle = (-1)^{\ell}\left|\ell m\right\rangle$. אז מכללי הברירה של Π אנחנו יודעים שאלמנט המטריצה יתאפס אם שני המצבים עם אותה זוגיות, לכן ℓ ו-ℓ' לא יכולים להיות זוגיים או אי-זוגיים בו-זמנית. מכיוון ש-$n>\ell$, אנחנו מסיקים שרק אם $\ell=0$ ו-$\ell'=1$ (או להפך) אלמנטי המטריצה לא יתאפסו. כלומר:

$$\langle 2\ell' m'|r_i|2\ell m\rangle = \begin{array}{c} \\ \langle 0,0| \\ \langle 1,1| \\ \langle 1,0| \\ \langle 1,-1| \end{array}\begin{array}{cccc} |0,0\rangle & |1,1\rangle & |1,0\rangle & |1,-1\rangle \\ \end{array} \begin{pmatrix} 0 & - & - & - \\ - & 0 & 0 & 0 \\ - & 0 & 0 & 0 \\ - & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.21}$$

כבר אנחנו רואים שמספר אלמנטי המטריצות ירד ל-9 אינטגרלים רק משיקולי שיקוף.

נעבור לכללי הברירה שנובעים ממשפט ויגנר-אקרט. קודם כל, כדי להפעיל אותו צריך לעבור לבסיס הכדורי של $\mathbf{r}$, ובשביל כך נעזר במעבר הבסיס במשוואה (2.4),

$$V_q^{(1)} = \sum_i U_{qi}V_i \iff V_i = \sum_q U_{iq}^{*}V_q^{(1)} \tag{3.22}$$

המטריצה ההופכית של U_{qi} היא $(U_{qi})^{\dagger} = U_{iq}^{*}$. אלמנטי המטריצה שנותרו הם רק אלה עם $\ell'=1$ ו-$\ell=0$. נשתמש במשפט ויגנר-אקרט ונמצא כי

$$\begin{aligned}\langle 21m|r_i|200\rangle &= \sum_q U_{iq}^{*}\underbrace{\langle 21m|r_q^{(1)}|200\rangle}_{m=q+0} = U_{im}^{*}\langle 2;1m|r_m^{(1)}|2;00\rangle \\ &= U_{im}^{*}\underbrace{\langle 0,1;0,m|1m\rangle}_{1}\langle 21\|r^{(1)}\|20\rangle = U_{im}^{*}\langle 21\|r^{(1)}\|20\rangle\end{aligned} \tag{3.23}$$

מקדם קלבש-גורדן הרלוונטי הוא 1 כי זה חיבור תנ"ז $|00\rangle\otimes|1m\rangle$ שבוודאי יכול להיות אך ורק $|1m\rangle$. נותר לנו רק למצוא את אלמנט המטריצה המצומצם, ואנחנו חופשיים לבחור את אלמנט מטריצה איתו נחשב אותו.

הכי פשוט יהיה $m = q = 0$:

$$\begin{aligned}\langle 2;10|r_0^{(1)}|2;00\rangle &= \int \left[R_{21}Y_0^{(1)}\right]^* \left[\sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_0^{(1)}\right] \left[R_{20}Y_0^{(0)}\right] r^2\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\Omega \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int R_{21}(r)\,R_{20}(r)\,r^3\,\mathrm{d}r \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \underbrace{\int Y_0^{(1)*} Y_0^{(1)}\,\mathrm{d}\Omega}_{1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \int \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cdot 2 \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} r^3\,\mathrm{d}r\end{aligned} \tag{3.24}$$

נעבור למשתנה $\rho = r/a_0$ ונזכר ש-$\int_0^\infty x^n e^{-x}\,\mathrm{d}x = n!$.

$$\langle 2;10|r_0^{(1)}|2;00\rangle = \frac{a_0}{12} \int \left(\rho^4 - \frac{1}{2}\rho^5\right) e^{-\rho}\,\mathrm{d}\rho = \frac{a_0}{12}\left(24 - \frac{120}{2}\right) = -3a_0 \tag{3.25}$$

נזכר ש-$\langle 21 \| r^{(1)} \| 20\rangle = \langle 2;10|r_0^{(1)}|2;00\rangle$, ולכן מצאנו שכל אלמנטי המטריצה הלא-טריוויאלים נתונים ע"י

$$\boxed{\langle 21m|r_i|200\rangle = -3U_{im}^* a_0} \tag{3.26}$$

במפורש קיבלנו

$$\boxed{\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \frac{3}{\sqrt{2}}a_0 & 0 & -\frac{3}{\sqrt{2}}a_0 \\ \frac{3}{\sqrt{2}}a_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{3}{\sqrt{2}}a_0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\langle 2\ell' m'|x|2\ell m\rangle}, \quad \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\frac{3i}{\sqrt{2}}a_0 & 0 & -\frac{3i}{\sqrt{2}}a_0 \\ \frac{3i}{\sqrt{2}}a_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3i}{\sqrt{2}}a_0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\langle 2\ell' m'|y|2\ell m\rangle}, \quad \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & -3a_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3a_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\langle 2\ell' m'|z|2\ell m\rangle}} \tag{3.27}$$

4 נספח – הרמוניות ספריות $Y_m^{(\ell)}$

$\boldsymbol{\ell = 0}$:

$$Y_0^{(0)}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{4.1}$$

$\boldsymbol{\ell = 1}$:

$$\begin{aligned}
Y_1^{(1)}(\theta,\phi) &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}e^{i\phi}\sin\theta &&= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{x+iy}{r} \\
Y_0^{(1)}(\theta,\phi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cos\theta &&= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{z}{r} \\
Y_{-1}^{(1)}(\theta,\phi) &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}e^{-i\phi}\sin\theta &&= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{x-iy}{r}
\end{aligned} \tag{4.2}$$

$\boldsymbol{\ell = 2}$:

$$\begin{aligned}
Y_2^{(2)}(\theta,\phi) &= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{2i\phi}\sin^2\theta &&= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{(x+iy)^2}{r^2} \\
Y_1^{(2)}(\theta,\phi) &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{i\phi}\sin\theta\cos\theta &&= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{(x+iy)\,z}{r^2} \\
Y_0^{(2)}(\theta,\phi) &= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\left(3\cos^2 - 1\right) &&= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\frac{3z^2-r^2}{r^2} \\
Y_{-1}^{(2)}(\theta,\phi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{-i\phi}\sin\theta\cos\theta &&= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{(x-iy)\,z}{r^2} \\
Y_{-2}^{(2)}(\theta,\phi) &= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{-2i\phi}\sin^2\theta &&= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{(x-iy)^2}{r^2}
\end{aligned} \tag{4.3}$$