AZ ANOMÁLIS IMPULZUSMOMENTUM KOMMUTÁCIÓS RELÁCIÓ BIZONYÍTÁSA MOLEKULACENTRÁLT KOORDINÁTA RENDSZEREKBEN

Szidarovszky Tamás

LMSD group meeting 2013.12.12.

Motiváció

… molekulacentrált koordinátarendszerekben az impulzus momentum kommutációs relációk anomálisak…

Áttekintés

- Forgáscsoportról
  - 3D forgatások
  - Forgatások és generátorok ábrázolása $\mathbb{R}^3$-ben
  - Forgatások és generátorok ábrázolása Hilbert-térben
- Vektoroperátorok
  - Vektorok transzformációs tulajdonságai
  - Vektoroperátorok
  - Egy azonosság vektoroperátorokra
  - q.e.d.

Forgatások

- Forgatások parametrizálása $F \in \mathbb{F}$

$$1)\ F(\alpha,\beta,\gamma) = F_x(\alpha) F_y(\beta) F_z(\gamma)$$

$$2)\ F(\chi,\theta,\phi) = F_Z(\chi) F_N(\theta) F_z(\phi)$$

$$3)\ F(\mathbf{n},\varphi)$$

Forgatások

- Forgatások csoportot alkotnak
  - Zártság: $$F_1, F_2 \in \mathbb{F} \;\Rightarrow\; F_2 F_1 = F_3 \in \mathbb{F}$$
  - Egységelem: $$E := F\left(0,0,0\right) \in \mathbb{F}$$
  - Asszociativitás: $$F_1, F_2, F_3 \in \mathbb{F} \Rightarrow \left(F_3 F_2\right) F_1 = F_3 \left(F_2 F_1\right)$$
  - Inverz: $$F\left(\mathbf{n}, \varphi\right) \in \mathbb{F} \;\Rightarrow F^{-1}\left(\mathbf{n}, \varphi\right) := F\left(\mathbf{n}, -\varphi\right) \in \mathbb{F}$$

Forgáscsoport ábrázolásai

- Ábrázolás általában: minden csoportelemhez hozzárendelünk egy (valamilyen lineáris téren értelmezett) operátort úgy, hogy az operátorok tudják a csoport szorzótábláját

$$F \in \mathbb{F} \to D(F) : \mathbf{V} \to \mathbf{V}$$

$$F_1 F_2 = F_3 \Rightarrow D(F_1) D(F_2) = D(F_3)$$

Forgáscsoport ábrázolása $\left(\mathbb{R}^3\right)$

- 3X3 mátrixokat használunk (ún. önábrázolás):

$$F \in \mathbb{F} \to D\left(F\right) \equiv \mathbf{F} \in \mathrm{SO}\left(3\right) \subset \mathbb{R}^{3\times 3},\ \ \mathbf{F}^{\mathrm{T}}\mathbf{F} = \mathbf{I},\ \ \det\mathbf{F} = 1$$

$$\mathbf{F}\left(\alpha,\beta,\gamma\right) = \mathbf{F}_x\left(\alpha\right)\mathbf{F}_y\left(\beta\right)\mathbf{F}_z\left(\gamma\right) =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\alpha\right) & -\sin\left(\alpha\right) \\ 0 & \sin\left(\alpha\right) & \cos\left(\alpha\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\beta\right) & 0 & \sin\left(\beta\right) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\left(\beta\right) & 0 & \cos\left(\beta\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\gamma\right) & -\sin\left(\gamma\right) & 0 \\ \sin\left(\gamma\right) & \cos\left(\gamma\right) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Forgáscsoport generátorai $\left(\mathbb{R}^3\right)$

- Tétel: minden 1 paraméteres folytonos csoport exponencializálható

$$\mathbf{F}_x(\alpha) = e^{\alpha \mathbf{B}_x} = \mathbf{I} + \alpha \mathbf{B}_x + \frac{1}{2}\alpha^2 \mathbf{B}_x^2 + \ldots$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\mathbf{F}_x(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha}\right|_{\alpha=0} = \mathbf{B}_x \left. e^{\alpha \mathbf{B}_x}\right|_{\alpha=0} = \mathbf{B}_x$$

$\mathbf{B}_x$ az x-tengely körüli forgatás generátora

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ 0 & \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix}\right|_{\alpha=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Forgáscsoport generátorai $\left(\mathbb{R}^3\right)$

- Hasonlóan a többi generátor:

$$\mathbf{B}_x \equiv \mathbf{B}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_y \equiv \mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_z \equiv \mathbf{B}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Érdekes analógia impulzusmomentummal:

$$\left(\mathbf{B}_i\right)_{jk} = -\varepsilon_{ijk} \qquad \left[\mathbf{B}_i, \mathbf{B}_j\right] = \mathbf{B}_i\mathbf{B}_j - \mathbf{B}_j\mathbf{B}_i = \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk}\mathbf{B}_k$$

Forgáscsoport generátorai $\left(\mathbb{R}^3\right)$

- Tehát egy forgatási mátrix alakja:

$$\mathbf{F}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathbf{F}_x(\alpha)\mathbf{F}_y(\beta)\mathbf{F}_z(\gamma)=e^{\alpha\mathbf{B}_1}e^{\beta\mathbf{B}_2}e^{\gamma\mathbf{B}_3}$$

$$e^{\alpha\mathbf{B}_1}e^{\beta\mathbf{B}_2}e^{\gamma\mathbf{B}_3}\neq e^{\alpha\mathbf{B}_1+\beta\mathbf{B}_2+\gamma\mathbf{B}_3}$$

- Tétel: a generátorok lineáris teret alkotnak, azaz

$$\sum_{k=1}^{3}v_k\mathbf{B}_k=\begin{pmatrix}0 & -v_3 & v_2\\ v_3 & 0 & -v_1\\ -v_2 & v_1 & 0\end{pmatrix}$$ is egy generátor, így $$e^{\sum_{k=1}^{3}v_k\mathbf{B}_k}\equiv e^{\mathbf{v}\underline{\mathbf{B}}}\in SO(3)$$

és belátható, hogy $$e^{\mathbf{v}\underline{\mathbf{B}}}=e^{\varphi\mathbf{n}\underline{\mathbf{B}}}=\mathbf{F}(\mathbf{n},\varphi)\in\mathbb{R}^{3\times3},\ \ \mathbf{n}=\frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|},\ \ \varphi=|\mathbf{v}|$$

Forgáscsoport ábrázolása $\left(H.\!-\!tér\right)$

- Hilbert-téren értelmezett operátorokkal ábrázolás:

$$F \in \mathbb{F} \to D\left(F\right) \equiv \hat{F} : H \to H$$

- Tudjuk, hogy koordinátákat transzformáló műveletekre :

$$\hat{R}\Psi\left(\mathbf{x}\right) = \Psi\left(\hat{R}^{-1}\mathbf{x}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\hat{F}\Psi\left(\mathbf{x}\right) = \Psi\left(\mathbf{F}^{-1}\mathbf{x}\right)} \qquad \left(\hat{F} : H \to H,\ \mathbf{F}^{-1} \in \mathbb{R}^{3\times 3}\right)$$

Ez definiálja Hilbert-térben az ábrázolását
a forgáscsoportnak

Forgáscsoport generátorai $\left(H.-tér\right)$

- Infinitezimális forgatásra: $\left(\mathbf{x}' = \mathbf{x} + dt\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{x} = \mathbf{x} + d\varphi\mathbf{n}\times\mathbf{x}\right)$

$$\hat{F}_{\text{inf}}\Psi\left(\mathbf{x}\right) = \Psi\left(\mathbf{F}_{\text{inf}}^{-1}\mathbf{x}\right) = \Psi\left(\mathbf{x} - d\varphi\left(\mathbf{n}\underline{\mathbf{B}}\right)\mathbf{x}\right) = \Psi\left(\mathbf{x} - d\varphi\mathbf{n}\times\mathbf{x}\right) =$$

$$\cong \Psi\left(\mathbf{x}\right) - d\varphi\hat{\nabla}\Psi\left(\mathbf{x}\right)\left(\mathbf{n}\times\mathbf{x}\right) = \Psi\left(\mathbf{x}\right) - d\varphi\mathbf{n}\left(\mathbf{x}\times\hat{\nabla}\right)\Psi\left(\mathbf{x}\right) =$$

$$= \Psi\left(\mathbf{x}\right) - d\varphi\mathbf{n}\frac{i}{\hbar}\left(\hat{\mathbf{x}}\times\hat{\mathbf{p}}\right)\Psi\left(\mathbf{x}\right) = \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}\right)\Psi\left(\mathbf{x}\right)$$

- Véges forgatásra:

$$\hat{F}\left(\mathbf{n},\varphi\right) = \lim_{N\to\infty}\left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}\frac{\varphi}{N}\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}\right)^{N} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}}$$

Vektorok transzformációs tul.

- Mi az a hármasvektor?
  - Irányított szakasz…. nem az igazi
  - Számhármas… nem az igazi
  - A forgáscsoport önábrázolása szerint transzformálódó mennyiség… ez lesz az ☺
- Hármasvektor az, aminek komponensei koord. rsz. forgatásra úgy transzformálódnak, hogy:

$$\left(\mathbf{v}'\right)_k = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{kl}\mathbf{v}_l$$

Relativitás elméletben Lorentz-vektor:

$$\left(v'\right)_\mu = \sum_{\eta=0}^{3} \Lambda_\mu{}^\eta v_\eta$$

Vektorok transzformációs tul.

- Érdekesség: maguk az egységvektorok és a komponensek inverz módon transzformálódnak

$$(\mathbf{v}')_k = \langle k | \left(|v\rangle' \right) = \langle k | \hat{F} | v \rangle = \langle k | \sum_{l=1}^{3} \hat{F} v_l | l \rangle = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{kl} \mathbf{v}_l$$

$$|k\rangle' = \hat{F} | k \rangle = \sum_{l=1}^{3} | l \rangle \langle l | \hat{F} | k \rangle = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{lk} | l \rangle = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{kl}^{-1} | l \rangle$$

Mi az a vektoroperátor?

- Kvantummechanikában a fizikai mennyiségek Hilbert-téren értelmezett operátorok. Ebben az esetben mitől lesz egy fizikai mennyiség (operátor) vektor?
- Először nézzünk Hilbert-téren transzformációt:

$$\hat{R}\psi = \psi', \;\; \hat{R}\Phi = \Phi'$$

  - Szeretnénk: $\hat{A}\psi = \Phi \leftrightarrow \hat{A}'\psi' = \Phi'$

(passzív transzformáció!)

$$\Rightarrow \hat{A}'\hat{R}\psi = \hat{R}\Phi \Rightarrow \hat{R}^{-1}\hat{A}'\hat{R}\psi = \Phi \Rightarrow \boxed{\hat{A}' = \hat{R}\hat{A}\hat{R}^{-1}}$$

Mi az a vektoroperátor?

- Legyen adott három operátor ami vektorgyanús:

$$\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3$$

- Ha „vektorkomponensek”, akkor elvégezve egy forgatást a Hilbert-téren, kétféleképpen is felírhatjuk a transzformácójukat:

(aktív transzformáció!)

Mint Hilbert-térbeli operátoroknak: $\hat{A}'_k = \hat{F}^{-1}\hat{A}_k\hat{F}$

Mint hármasvektoroknak: $\hat{A}'_k = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{kl}\hat{A}_l$

Mi az a vektoroperátor?

- Egyéb indoklás: elforgatott rendszer várható értéke = várható érték elforgatva

$$\left\langle \Psi' \middle| \hat{A}_k \Psi' \right\rangle = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{kl} \left\langle \Psi \middle| \hat{A}_l \Psi \right\rangle$$

$$\left\langle \Psi \middle| \hat{F}^+ \hat{A}_k \hat{F} \Psi \right\rangle = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{kl} \left\langle \Psi \middle| \hat{A}_l \Psi \right\rangle, \quad \forall \Psi$$

$$\hat{F}^{-1} \hat{A}_k \hat{F} = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{kl} \hat{A}_l$$

$$\hat{F} \hat{A}_k \hat{F}^{-1} = \sum_{l=1}^{3} \mathbf{F}_{kl}^{-1} \hat{A}_l$$

Mi az a vektoroperátor?

- Tehát vektoroperátor amire:

$$\boxed{\hat{F}\hat{A}_k\hat{F}^{-1} = \sum_{l=1}^{3}\mathbf{F}_{kl}^{-1}\hat{A}_l}$$

- Infinitezimális forgatásokra:

$$\hat{F}(\mathbf{n}, d\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}} = \hat{I} - \frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}} + o\left((d\varphi)^2\right)$$

$$\hat{F}^{-1}(\mathbf{n}, d\varphi) = e^{+\frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}} = \hat{I} + \frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}} + o\left((d\varphi)^2\right)$$

$$\mathbf{F}^{-1}(\mathbf{n}, d\varphi) = \mathbf{F}(\mathbf{n}, -d\varphi) = e^{-d\varphi\mathbf{n}\underline{\mathbf{B}}} = \mathbf{I} - d\varphi\mathbf{n}\underline{\mathbf{B}} + o\left((d\varphi)^2\right)$$

Mi az a vektoroperátor?

$$\hat{F}_{\inf}\hat{A}_k\hat{F}_{\inf}^{-1}=\sum_{l=1}^{3}\left(\mathbf{F}_{\inf}^{-1}\right)_{kl}\hat{A}_l$$

$$\left(\hat{I}-\frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}\right)\hat{A}_k\left(\hat{I}+\frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{J}}\right)=\sum_{l=1}^{3}\left(\mathbf{I}-d\varphi\mathbf{n}\underline{\mathbf{B}}\right)_{kl}\hat{A}_l$$

$$\hat{A}_k-\frac{i}{\hbar}d\varphi\sum_{m=1}^{3}n_m\hat{J}_m\hat{A}_k+\frac{i}{\hbar}d\varphi\sum_{m=1}^{3}\hat{A}_k n_m\hat{J}_m+o\left(\left(d\varphi\right)^2\right)=\sum_{l=1}^{3}\left(\delta_{kl}\hat{A}_l-d\varphi\sum_{m=1}^{3}n_m\left(B_m\right)_{kl}\hat{A}_l\right)$$

$$-\frac{i}{\hbar}d\varphi\sum_{m=1}^{3}n_m\hat{J}_m\hat{A}_k+\frac{i}{\hbar}d\varphi\sum_{m=1}^{3}\hat{A}_k n_m\hat{J}_m=d\varphi\sum_{m=1}^{3}n_m\sum_{l=1}^{3}\left(-B_m\right)_{kl}\hat{A}_l$$

$$\sum_{m=1}^{3}n_m\left(\hat{J}_m\hat{A}_k-\hat{A}_k\hat{J}_m\right)=\sum_{m=1}^{3}n_m i\hbar\sum_{l=1}^{3}\left(-B_m\right)_{kl}\hat{A}_l,\quad\forall\mathbf{n}\text{-re}$$

$$\left[\hat{J}_m,\hat{A}_k\right]=i\hbar\sum_{l=1}^{3}\left(\varepsilon_{mkl}\right)\hat{A}_l$$

$$\boxed{\left[\hat{J}_k,\hat{A}_l\right]=i\hbar\sum_{m=1}^{3}\left(\varepsilon_{klm}\right)\hat{A}_m}$$

Azonosság vektoroperátorokra

$$\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{a}}\right)\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{b}}\right)-\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{b}}\right)\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{a}}\right)=-i\hbar\hat{\mathbf{J}}\left(\hat{\mathbf{a}}\times\hat{\mathbf{b}}\right)$$

- Fontos, hogy az $\hat{\mathbf{a}}$ és $\hat{\mathbf{b}}$ vektorok olyan vektorok, amik a molekulához centráltak (a molekula forgatásával ők is változnak, a molekulát alkotó atomok koordinátáinak függvényei), ekkor igaz, hogy a molekula impuzusmomentuma által generált forgatás transzformálja őket. (lásd előző dia)
- Továbbá fontos észrevenni, hogy ez egy skalár egyenlet, ami minden koordinátarendszerben igaz!

Azonosság vektorop.

$$\boxed{\left[\hat{a}_k,\hat{J}_l\right]=i\hbar\sum_{m=1}^{3}(\varepsilon_{klm})\hat{a}_m}$$

$$\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{a}}\right)\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{b}}\right)-\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{b}}\right)\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{a}}\right)=\sum_{l=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}J_k a_k J_l b_l-\sum_{l=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}J_k b_k J_l a_l=$$

$$=\sum_{l=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}J_k\left(J_l a_k+\sum_{m=1}^{3}i\hbar\varepsilon_{klm}a_m\right)b_l-\sum_{l=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}J_k\left(J_l b_k+\sum_{m=1}^{3}i\hbar\varepsilon_{klm}b_m\right)a_l=$$

$$=\sum_{k,l=1}^{3}J_kJ_la_kb_l-\sum_{k,l=1}^{3}\underbrace{J_kJ_lb_ka_l}_{J_lJ_ka_kb_l}+\sum_{k,l,m=1}^{3}i\hbar J_k\varepsilon_{klm}a_mb_l-\sum_{k,l,m=1}^{3}i\hbar J_k\underbrace{\varepsilon_{klm}b_ma_l}_{-\varepsilon_{klm}a_mb_l}=$$

$$=\sum_{k,l=1}^{3}\underbrace{\left[J_k,J_l\right]}_{\sum_{m=1}^{3}i\hbar\varepsilon_{klm}J_m}a_kb_l+\sum_{k,l,m=1}^{3}2i\hbar\underbrace{J_k\varepsilon_{klm}a_mb_l}_{-\varepsilon_{klm}J_ma_kb_l}=\sum_{k,l,m=1}^{3}-i\hbar\varepsilon_{klm}J_ma_kb_l=$$

$$=-\sum_{k,l,m=1}^{3}i\hbar J_m\varepsilon_{mkl}a_kb_l=-\sum_{m=1}^{3}i\hbar J_m\left(\mathbf{a}\times\mathbf{b}\right)_m=-i\hbar\mathbf{J}\left(\mathbf{a}\times\mathbf{b}\right)$$

q.e.d.

- Írjuk fel az azonosság konkrét alakját molekulacentrált rendszerben, amikor $\hat{\mathbf{a}}$ és $\hat{\mathbf{b}}$ éppen a molekulacentrált koordinátatengelyek:

$$\underbrace{\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{a}}\right)\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{b}}\right)-\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{b}}\right)\left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{a}}\right)=-i\hbar\hat{\mathbf{J}}\left(\hat{\mathbf{a}}\times\hat{\mathbf{b}}\right)}$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{\mathbf{a}}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\end{pmatrix},\ \hat{\mathbf{b}}=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\end{pmatrix}\Rightarrow \hat{J}_1\hat{J}_2-\hat{J}_2\hat{J}_1=-i\hbar\hat{J}_3$$

$$\hat{\mathbf{a}}=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\end{pmatrix},\ \hat{\mathbf{b}}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\end{pmatrix}\Rightarrow \hat{J}_2\hat{J}_3-\hat{J}_3\hat{J}_2=-i\hbar\hat{J}_1$$

$$\hat{\mathbf{a}}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\end{pmatrix},\ \hat{\mathbf{b}}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\end{pmatrix}\Rightarrow \hat{J}_3\hat{J}_1-\hat{J}_1\hat{J}_3=-i\hbar\hat{J}_2$$