V. CLEBSCH-GORDAN KOEFFICIENSEK ÉS A 3-J SZIMBÓLUMOK

A klasszikus mechanikában egy kétkomponensű rendszer teljes **j** impulzusmomentum vektora a $\mathbf{j}_1$ és $\mathbf{j}_2$ komponensek vektorösszege. A kvantummechanikában természetesen a megismert kommutációs szabályokat kell az eredő impulzusmomentum vektornak kielégítenie. A kvantummechanikában is fennáll, hogy

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \tag{1}$$

Bizonyítás:

$$\left[j_x, j_y\right] = \left[j_{1x} + j_{2x}, j_{1y} + j_{2y}\right] = \left[j_{1x}, j_{1y}\right] + \left[j_{1x}, j_{2y}\right] + \left[j_{2x}, j_{1y}\right] + \left[j_{2x}, j_{2y}\right] =$$

$$ij_{1z} + ij_{2z} = ij_z$$

és hasonlóan a többi komponensre, azaz j is impulzusmomentum vektor.

Az összetett (eredő) rendszert kétféle módon is vizsgálhatjuk annak megfelelően, hogy egymással kommutáló impulzusmomentum operátorok két sorozatával is dolgozhatunk:

	Csatolatlan (*uncoupled*) reprezentáció
Operátorok	$\mathbf{j}_1^2, j_{1z}, \mathbf{j}_2^2, j_{2z}$
Sajátállapot	$\lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \equiv \lvert j_1 m_1\rangle \lvert j_2 m_2\rangle$
Sajátrendszerek	$\mathbf{j}_1^2 \lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = j_1(j_1+1) \lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$
	$j_{1z} \lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = m_1 \lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$
	$\mathbf{j}_2^2 \lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = j_2(j_2+1) \lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$
	$j_{2z} \lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = m_2 \lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$

	Csatolt (*coupled*) reprezentáció
Operátorok	$\mathbf{j}_1^2, \mathbf{j}_2^2, \mathbf{j}^2 = (\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2)^2, j_z = j_{1z} + j_{2z}$
Sajátállapot	$\lvert j_1 j_2 jm\rangle \equiv \lvert (j_1 j_2) jm\rangle \equiv \lvert jm\rangle$
Sajátrendszerek	$\mathbf{j}_1^2 \lvert jm\rangle = j_1(j_1+1) \lvert jm\rangle$
	$\mathbf{j}_2^2 \lvert jm\rangle = j_2(j_2+1) \lvert jm\rangle$
	$\mathbf{j}^2 \lvert jm\rangle = j(j+1) \lvert jm\rangle$
	$j_z \lvert jm\rangle = m \lvert jm\rangle$

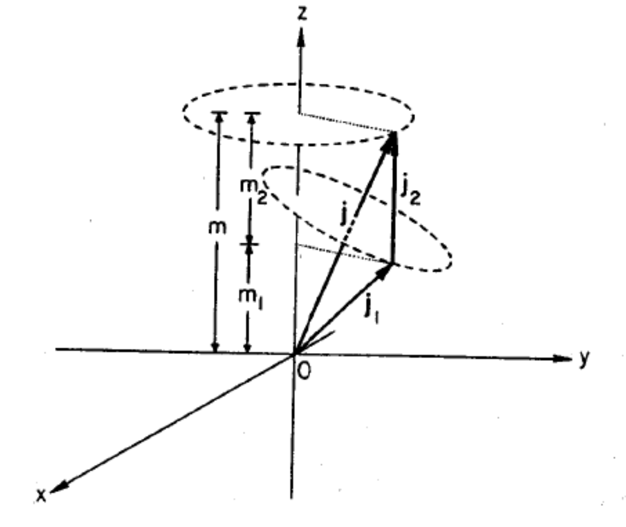

FIGURE 2.1 Vector model representation of the coupled state $|jm\rangle$.

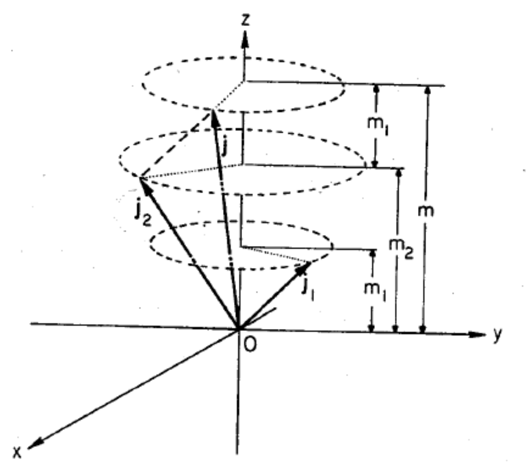

FIGURE 2.2 Vector model representation of the uncoupled state $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$.

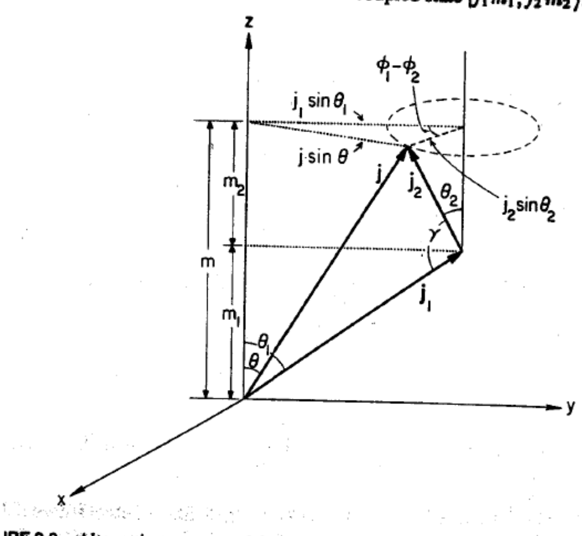

FIGURE 2.3 Alternative vector model representation of the uncoupled state $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$.

A két (csatolatlan és csatolt) reprezentáció természetesen azonos értékű leírását adja a kétkomponensű kvantummechanikai rendszernek. Az ekvivalens reprezentációkat az alábbi unitér transzformáció köti össze:

$$\left| jm \right\rangle \equiv \left| j_1 j_2 jm \right\rangle = \sum_{m_1,m_2} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) \left| j_1 m_1, j_2 m_2 \right\rangle \tag{2}$$

vagy

$$\left| j_1 m_1, j_2 m_2 \right\rangle = \sum_{j,m} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) \left| jm \right\rangle \tag{3}$$

Az unitér transzformáció elemei jelen esetben konvenció szerint valósak és őket Clebsch–Gordan koefficienseknek nevezzük.

Formálisan a következőt is írhatjuk:

$$C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) \equiv \left\langle j_1 m_1, j_2 m_2 \middle| jm \right\rangle \equiv \left\langle jm \middle| j_1 m_1, j_2 m_2 \right\rangle \tag{4}$$

Az irodalomban azonban nem csak ez az elnevezés elterjedt, hívják ezeket a koefficienseket vektorcsatolási (*vector coupling*), vektorösszegzési (*vector addition*), illetve Wigner koefficienseknek is.

A $\left| jm \right\rangle$ és $\left| j_1 m_1, j_2 m_2 \right\rangle$ sajátfüggvény rendszerek ortonormalitása a következő ortogonalitási relációkat eredményezi:

$$\sum_{m_1,m_2} \left\langle jm \middle| j_1 m_1, j_2 m_2 \right\rangle \left\langle j_1 m_1, j_2 m_2 \middle| j'm' \right\rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \tag{5}$$

és

$$\sum_{j,m} \left\langle j_1 m_1, j_2 m_2 \middle| jm \right\rangle \left\langle jm \middle| j_1 m_1', j_2 m_2' \right\rangle = \delta_{m_1,m_1'} \delta_{m_2,m_2'} \,. \tag{6}$$

TABLE 2.1 Matrix of Clebsch–Gordan Coefficients[a]

	$\langle 3,1\vert$	$\langle 3,0\vert$	$\langle 2,1\vert$	$\cdots$	$\langle -2,-1\vert$	$\langle -3,0\vert$	$\langle -3,-1\vert$
$\vert 4\ 4\rangle$	$\langle 3,1\vert 4\ 4\rangle$	0	0				
$\vert 4\ 3\rangle$	0	$\langle 3,0\vert 4\ 3\rangle$	$\langle 2,1\vert 4\ 3\rangle$				
$\vert 3\ 3\rangle$	0	$\langle 3,0\vert 3\ 3\rangle$	$\langle 2,1\vert 3\ 3\rangle$				
$\vdots$	0	0	0	$\ddots$	0	0	0
$\vert 3\ -3\rangle$				0	$\langle -2,-1\vert 3\ -3\rangle$	$\langle -3,0\vert 3\ -3\rangle$	0
$\vert 4\ -3\rangle$				0	$\langle -2,-1\vert 4\ -3\rangle$	$\langle -3,0\vert 4\ -3\rangle$	0
$\vert 4\ -4\rangle$				0	0	0	$\langle -3,-1\vert 4\ -4\rangle$

[a]The $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm\rangle$ symbol is abbreviated here as $\langle m_1, m_2 | jm\rangle$. The case $j_1 = 3, j_2 = 1$ is illustrated. In general, **C** is a $(2j_1+1)(2j_2+1) \times (2j_1+1)(2j_2+1)$ unitary (orthogonal) matrix of (real) elements. Equations (2.8) and (2.9) express the relation $\mathbf{C}\mathbf{C}^T = \mathbf{I}$ where $\mathbf{C}^T = \mathbf{C}^{-1}$. Most of the elements vanish because the triangle condition $m = m_1 + m_2$ is not satisfied. By grouping elements with the same m value, **C** is put into block diagonal form, as above.

A következő fontos összefüggések láthatók be, melyek meghatározzák, hogy a Clebsh–Gordan koefficiensek közül melyik lesz nem zérus:

$$\boxed{m = m_1 + m_2}, \tag{7}$$

az un. háromszögfeltétel (nyilván, mert a spinvetületek összeadódnak),

---

Bizonyítás:

$$j_z \left| jm \right\rangle = \sum_{m_1, m_2} C\left(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m\right)\left[j_{1z} + j_{2z}\right]\left| j_1 m_1, j_2 m_2 \right\rangle =$$

$$\sum_{m_1, m_2} \left(m_1 + m_2\right) C\left(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m\right)\left| j_1 m_1, j_2 m_2 \right\rangle = .$$

$$\sum_{m_1', m_2'} m\, C\left(j_1 j_2 j; m_1' m_2' m\right)\left| j_1 m_1', j_2 m_2' \right\rangle$$

Minthogy a $\left| j_1 m_1, j_2 m_2 \right\rangle$ függvények lineárisan függetlenek, így az utóbbi két kifejezés összes koefficiensének azonosnak kell lennie, azaz

$$\left(m - m_1 - m_2\right) C\left(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m\right) = 0,$$

amiből azonnal adódik, hogy C zérus, hacsak nem $m = m_1 + m_2$.

---

valamint

$$\boxed{\left|j_1 + j_2\right| \geq j \geq \left|j_1 - j_2\right|}. \tag{8}$$

Bizonyítás:

Tudjuk, hogy adott j-re $-j \leq m \leq j$ és $m_{\max} = j$. Minthogy $m = m_1 + m_2$, bármely j-re m maximális értéke $m_{\max} = j_1 + j_2$. Ez megegyezik j maximális értékével:

$$j_{\max} = j_1 + j_2,$$

különben lenne olyan m érték, mely $m_{\max}$-nál nagyobb.

Lépdeljünk m értékein a maximumtól indulva lefelé:

- $m = m_{\max} = j_1 + j_2$. Csatolt reprezentáció esetén csak egy állapot van: $\left| j_{\max} = j_1 + j_2, m_{\max} = j_1 + j_2 \right\rangle$, és ez csupán egyetlen nem-csatolt állapotnak felel meg: $\left| j_1 j_1, j_2 j_2 \right\rangle$.
- $m = m_{\max} - 1 = j_1 + j_2 - 1$. Csatolt reprezentáció esetén két állapot van: $\left| j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \right\rangle$ és $\left| j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \right\rangle$, és ez a következő két nem-csatolt állapotnak felel meg: $\left| j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 \right\rangle$ és $\left| j_1 j_1, j_2 j_2 - 1 \right\rangle$.

Azaz ha m értékét eggyel csökkentjük, úgy a fellépő csatolt állapotok egyike a j eggyel csökkentett értékéhez tartozik, és ennek az állapotnak is maximális az m értéke.

Az alsó határt, $j_{\min}$-t, akkor érjük el, amikor a fellépő csatolt állapotok száma (melyekből bármely j esetére $2j + 1$ van) megegyezik a csatolatlan állapotok teljes számával (melyekből $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ van), azaz

$$\sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1).$$

Az egyenlet átírásánál fel fogjuk használni, hogy

$$\sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} 1 = j_{\max} - (j_{\min} - 1) = j_{\max} - j_{\min} + 1,$$

mely összefüggés fennáll mind egész, mind félegész j értékekre. Továbbá,

$$2\sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} j = (j_{\max} - j_{\min} + 1)(j_{\max} + j_{\min}).$$

hiszen

$$\sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} j = \sum_{1}^{j_{\max}} j - \sum_{1}^{j_{\min}-1} j = \frac{1}{2} j_{\max}(j_{\max} + 1) - \frac{1}{2}(j_{\min} - 1) j_{\min} =$$
$$= \frac{1}{2}\left[j_{\max}(j_{\max} + 1) - j_{\min}(j_{\min} - 1) \right]$$

Az is látható, hogy az eggyel előbbi felírás szerint az átlag $[(j_{\max} + j_{\min})/2]$ szorzódik a tagszámmal ($j_{\max} - j_{\min} + 1$).

Érdekesség, hogy félegészekre is fennáll ez az összefüggés (bár a szummázást nem egész indexekre nem szokás értelmezni):

$$\sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} j = \sum_{1/2}^{j_{\max}} j - \sum_{1/2}^{j_{\min}-1} j = \frac{1}{2}\left[j_{\max}\left(j_{\max}+1\right)+\frac{1}{4}\right]-\frac{1}{2}\left[\left(j_{\min}-1\right)j_{\min}+\frac{1}{4}\right]=$$

$$=\frac{1}{2}\left[j_{\max}\left(j_{\max}+1\right)-j_{\min}\left(j_{\min}-1\right)\right]$$

Tehát

$$j_{\max}\left(j_{\max}+1\right)-j_{\min}\left(j_{\min}-1\right)+\left(j_{\max}-j_{\min}+1\right)=\left(2j_1+1\right)\left(2j_2+1\right).$$

Helyettesítsük $j_{\max}$ helyébe $j_1 + j_2$-t, így:

$$j_{\min}^2 = j_1^2 + j_2^2 - 2j_1 j_2 = \left(j_1 - j_2\right)^2 .$$

Minthogy $j_{\min} \geq 0$, azt kapjuk, hogy

$$j_{\min} = \left| j_1 - j_2 \right| .$$

A csatolt és csatolatlan reprezentációk közötti összefüggések:

Csatolt reprezentáció $\lvert j_1 j_2 jm\rangle \equiv \lvert (j_1 j_2) jm\rangle \equiv \lvert j,m\rangle$		Csatolatlan reprezentáció $\lvert j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \equiv \lvert j_1 m_1\rangle \lvert j_2 m_2\rangle$
	$m = m_{\max}$	
$\lvert j_1+j_2, j_1+j_2\rangle$		$\lvert j_1 j_1, j_2 j_2\rangle$
	$m = m_{\max}-1$	
$\lvert j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$		$\lvert j_1 j_1, j_2 j_2-1\rangle$
$\lvert j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$		$\lvert j_1 j_1-1, j_2 j_2\rangle$
	$m = m_{\max}-2$	
$\lvert j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle$		$\lvert j_1 j_1, j_2 j_2-2\rangle$
$\lvert j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle$		$\lvert j_1 j_1-1, j_2 j_2-1\rangle$
$\lvert j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle$		$\lvert j_1 j_1-2, j_2 j_2\rangle$

A Clebsch–Gordan koefficiensek kiszámításának klasszikus és újabb lehetőségei:

- Rekurzív összefüggések: G. Racah, *Phys. Rev*. **62**, 438-440 (1942).
- Csoportelmélet: E. Wigner, Group Theory, Academic: New York, pp. 184-191.
- Kommutációs szabályok redukálása: J. Schwinger, On Angular Momentum, Nuclear Development Corporation report NYO-3071, pp. 21-30.
- R. T. Sharp, *Am. J. Phys*. **28**, 116 (1960).

Példa pálya és spin impulzusmomentumok csatolására:

Kétatomos molekulák

Feladat: A H atom alap elektronállapota: H 1*s*, ^{2}S. Az oxigén atom alap elektronállapota: O $(1s)^2(2s)^2(2p)^4$, ^{3}P. Adjuk meg a H_2, OH és O_2 kétatomos molekulák összes elektronállapotát, melyek a megfelelő alapállapotú atomokból felépíthetők.

Megoldás:

Két atom esetére legyen $\Lambda = \left| M_{L_1} + M_{L_2} \right|$, továbbá $L_>$ és $L_<$, valamint $S_>$ és $S_<$ a megfelelő (L_1,L_2) és (S_1,S_2) párok közül a nagyobb illetve a kisebb érték. Az atomi termek jele ^{2S+1}L. Az atomi term, ^{2S+1}L, spin tagja $\left| SM_S \right\rangle$-ként transzformálódik, míg a térbeli rész $\left| LM_L \right\rangle \equiv Y_{LM_L}$-ként. Kétatomos molekulákra a termek jele $^{2S+1}\Lambda$.

A. Mutassuk meg először, hogy a különböző multiplicitású Σ állapotok száma $N_\Sigma = (2S_< + 1)(2L_< + 1)$, míg az összes állapot száma ennek $(L_> + 1)$-szerese, azaz $N_{\text{total}} = (2S_< + 1)(2L_< + 1)(L_> + 1)$.

Σ állapotot akkor kapunk, ha $\Lambda = |M_1 + M_2| = 0$. Bármely L és S kombinációra ez mindössze egyszer történhet meg. Bármely S értékre L összes lehetséges értéke $L_> + L_< - (L_> - L_<) + 1 = 2L_< + 1$, konkrétabban

$$L = L_> - L_<, L_> - L_< + 1, \ldots, L_> + L_< \ .$$

Az S értékek száma $2S_< + 1$, hiszen

$$S = S_> - S_<, S_> - S_< + 1, \ldots, S_> + S_< \ .$$

Ennek megfelelően az összes Σ állapot száma:

$$\boxed{N_\Sigma = (2S_< + 1)(2L_< + 1)} \ .$$

B. Bármely kombinációja M_{L_1}-nek és M_{L_2}-nek egy meghatározott Λ állapothoz vezet, ahol $\Lambda = \left| M_{L_1} + M_{L_2} \right|$.

Minthogy $M_{L_<}$ $-L_<$-től $+L_<$-ig terjed, míg $M_{L_>}$ határai $-L_>$ és $+L_>$, így a Λ állapotok teljes száma

$$(2L_< + 1)(2L_> + 1)$$

Most vegyük figyelembe a $\Lambda > 0$ állapotok degeneráltságát. Először vonjuk le a nem degenerált, Σ állapotok számát, majd osszunk 2-vel (degenerációs faktor, hiszen $\Lambda = \left| M_{L_1} + M_{L_2} \right| = \left| -M_{L_1} - M_{L_2} \right|$ azonos termre vezet, kivéve ha $M_{L_1} = M_{L_2} = 0$), majd eredményünkhöz adjuk ismételten a Σ állapotok számát.

Minden egyes spin állapotra a nem-Σ állapotok száma

$$(2L_< + 1)(2L_> + 1) - (2L_< + 1) = 2L_>(2L_< + 1),$$

míg az összes L termek száma

$$\frac{2L_>(2L_< + 1)}{2} + (2L_< + 1) = (2L_< + 1)(L_> + 1).$$

A spin állapotok számával ezt megszorozva megkapjuk az összes lehetséges elektronállapot számát:

$$\boxed{N_{\text{total}} = (2S_< + 1)(2L_< + 1)(L_> + 1)}.$$

Ugyanakkor azt is felírhatjuk, hogy $N_{\text{total}} = N_\Sigma(L_> + 1)$, illetve $L_> = \frac{N_{\text{total}}}{N_\Sigma} - 1$, azaz ha például $L_> = 0$, úgy $N_{\text{total}} = N_\Sigma$, míg ha $L_> = 1$, úgy $N_{\text{total}} = 2N_\Sigma$, stb.

H$_2$ molekula: ^{2}S + ^{2}S

$\Lambda = \left| M_{L_1} + M_{L_2} \right|$ = 0, azaz csak Σ állapotok lehetségesek. $N_\Sigma = (2\cdot(1/2)+1)(2\cdot 0+1) = 2$. A két lehetséges választás: $S_1 - S_2 = 0$ és $S_1 + S_2 = 1$. A Wigner–Witmer szabályok (melyeket szintén az impulzus-momentum csatolások szimmetriája alapján állapítottak meg) szerint a két lehetséges állapot:

$$^1\Sigma_g^+ \text{ és } ^3\Sigma_u^+.$$

O$_2$ molekula: ^{3}P + ^{3}P

$\Lambda = \left| M_{L_1} + M_{L_2} \right|$ = 0, 1, 2, azaz Σ, Π, és Δ állapotok lehetségesek. A termek teljes száma: $N_{\text{total}} = (2\cdot 1+1)(2\cdot 1+1)(1+1) = 18$. A Σ állapotok száma: $N_\Sigma = (2\cdot 1+1)(2\cdot 1+1) = 9$. S lehetséges értékei: 0, 1, és 2. A Wigner–Witmer szabályok alkalmazásával a lehetséges termek:

$$\begin{array}{cccccc}
^1\Sigma_g^+ & ^1\Sigma_g^+ & ^1\Sigma_u^- & ^1\Pi_g & ^1\Pi_u & ^1\Delta_g \\
^3\Sigma_u^+ & ^3\Sigma_u^+ & ^3\Sigma_g^- & ^3\Pi_g & ^3\Pi_u & ^3\Delta_u \\
^5\Sigma_g^+ & ^5\Sigma_g^+ & ^5\Sigma_u^- & ^5\Pi_g & ^5\Pi_u & ^5\Delta_g
\end{array}$$

OH molekula: ^{3}P + ^{2}S

$\Lambda = \left| M_{L_1} + M_{L_2} \right|$ = 0 és 1, azaz Σ és Π állapotok lehetségesek. A termek teljes száma: $N_{\text{total}} = (2\cdot 0+1)(2\cdot(1/2)+1)(1+1) = 4$. A Σ állapotok száma: $N_\Sigma = (2\cdot 0+1)(2\cdot(1/2)+1) = 2$. S lehetséges értékei: 1/2 és 3/2. A Wigner–Witmer szabályok alkalmazásával a lehetséges termek:

$$\begin{array}{cc}
^2\Sigma^- & ^2\Pi \\
^4\Sigma^- & ^4\Pi
\end{array}$$

A Wigner–Witmer szabályok

(1) Ha Λ páratlan, úgy a ${}^{2S+1}\Lambda_g$ állapotok száma megegyezik a ${}^{2S+1}\Lambda_u$ állapotok számával.

(2) Ha Λ páros, úgy a ${}^{2S+1}\Lambda_g$ állapotok száma eggyel nagyobb illetve eggyel kisebb mint a ${}^{2S+1}\Lambda_u$ állapotok száma. Az 'extra' ${}^{2S+1}\Lambda$ állapot g illetve u szimmetriájú annak megfelelően, hogy S páros vagy páratlan.

(3) Ha S páros, úgy minden Σ^+ állapot g és minden Σ^- állapot u szimmetriájú.

(4) Ha S páratlan, úgy minden Σ^+ állapot u és minden Σ^- állapot g szimmetriájú.

g/*u*: gerade/ungerade az elektronmozgásra vonatkozó hullámfüggvény inverziós szimmetriája alapján (természetesen csak homonukleáris kétatomos molekulákra, de pl. ${}^{14}N_2$ és ${}^{14}N^{15}N$ esetére is).

+/–: Σ állapotoknak a z (molekula) tengelyt magukba foglaló síkokra vett tükrözéses szimmetriája

A Clebsch-Gordan koefficiensekre vonatkozó rekurzív összefüggéseket kapunk, ha a léptető operátort ($j_{\pm} = j_{1\pm} + j_{2\pm}$) hattatjuk a CG-koefficienseket definiáló alapegyenletünkre, mely

$$|jm\rangle \equiv |j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) | j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle . \tag{9}$$

A (9) egyenlet bal oldala a következőképpen alakul:

$$\begin{aligned} j_{\pm} | j, m \rangle &= [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} | j, m \pm 1 \rangle = \\ &= [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} \sum_{m_1', m_2'} C(j_1 j_2 j; m_1' m_2' m \pm 1) | j_1 m_1', j_2 m_2' \rangle \end{aligned} \tag{10}$$

A (9) egyenlet jobb oldala a következőképpen alakul:

$$\begin{aligned} &(j_{1\pm} + j_{2\pm}) \sum_{m_1, m_2} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) | j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle = \\ &\sum_{m_1, m_2} \{ [j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)]^{1/2} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) | j_1 m_1 \pm 1, j_2 m_2 \rangle + \\ &+ [j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)]^{1/2} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) | j_1 m_1, j_2 m_2 \pm 1 \rangle \} \end{aligned} \tag{11}$$

A (10) és (11) egyenletek hasonló $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$-re vonatkozó koefficienseit egyenlővé téve a következő összefüggéseket kapjuk:

$$\begin{aligned} &[j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j, m \pm 1 \rangle = \\ &= [j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)]^{1/2} \langle j_1 m_1 \mp 1, j_2 m_2 | j, m \rangle + \\ &+ [j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)]^{1/2} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 \mp 1 | j, m \rangle \end{aligned} \tag{12}$$

A (12) egyenlet baloldala eltűnik – a felső előjel választása esetén –, amennyiben $m = j$. Ekkor meg tudjuk határozni a különböző $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j, j \rangle$ CG koefficienseket, ha azok ortonormalitását is figyelembe vesszük.

Hasonló meggondolások alapján vezette le elsőként Racah (1942-ben) a Clebsch–Gordan koefficiensek alábbi alakját:

$$\boxed{\begin{aligned} &C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) \equiv \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle = \delta_{m_1+m_2,m_3} \times \\ &\times \left[\begin{aligned} &(2j_3+1) \times \frac{(s-2j_3)!(s-2j_2)!(s-2j_1)!}{(s+1)!} \times \\ &\times (j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j_3+m_3)!(j_3-m_3)! \end{aligned} \right]^{1/2} \times \\ &\times \sum_\nu (-1)^\nu \cdot \left[\begin{aligned} &\frac{1}{\nu!(j_1+j_2-j_3-\nu)!(j_1-m_1-\nu)!(j_2+m_2-\nu)!} \times \\ &\frac{1}{(j_3-j_2+m_1+\nu)!(j_3-j_1-m_2+\nu)!} \end{aligned} \right] \end{aligned}} \quad (13)\mathbf{M}$$

ahol $s = j_1 + j_2 + j_3$ és a ν index mindazon egész értékeken végigfut, melyekre a faktoriálisok nem-negatívak.

Alaposabb vizsgálat alapján megállapíthatnánk a CG koefficiensekre vonatkozó alábbi szimmetria összefüggéseket:

$$\begin{aligned} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle &= (-1)^{j_1+j_2-j_3} \langle j_1 -m_1, j_2 -m_2 | j_3 -m_3 \rangle \\ &= (-1)^{j_1+j_2-j_3} \langle j_2 m_2, j_1 m_1 | j_3 m_3 \rangle \\ &= (-1)^{j_1-m_1} \left[\frac{2j_3+1}{2j_2+1} \right]^{1/2} \langle j_1 m_1, j_3 -m_3 | j_2 -m_2 \rangle \\ &= (-1)^{j_2+m_2} \left[\frac{2j_3+1}{2j_1+1} \right]^{1/2} \langle j_3 -m_3, j_2 m_2 | j_1 -m_1 \rangle \\ &= (-1)^{j_1-m_1} \left[\frac{2j_3+1}{2j_2+1} \right]^{1/2} \langle j_3 m_3, j_1 -m_1 | j_2 m_2 \rangle \\ &= (-1)^{j_2+m_2} \left[\frac{2j_3+1}{2j_1+1} \right]^{1/2} \langle j_2 -m2, j_3 m_3 | j_1 m_1 \rangle \end{aligned} \qquad (14)$$

A 3-*J* SZIMBÓLUMOK

A (14) egyenletben megadott szimmetria relációk összességét legegyszerűbben a Clebsch–Gordan koefficiensek egy alternatív felírása segítségével lehet megadni:

$$\boxed{\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \equiv (-1)^{j_1-j_2-m_3}\left(2j_3+1\right)^{-1/2}\left\langle j_1m_1, j_2m_2 \,|\, j_3 -m_3\right\rangle} \qquad (15)$$

$$\left\langle j_1m_1, j_2m_2 \,|\, j_3m_3\right\rangle \equiv (-1)^{j_1-j_2+m_3}\left(2j_3+1\right)^{1/2}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \qquad (16)$$

A (15) egyenlet bal oldalán szereplő mennyiséget nevezzük, mely tehát kis mértékben tér csak el a Clebsch–Gordan koefficiensektől, Wigner-féle 3-*j* szimbólumnak. Figyeljük meg a fenti két egyenletben megjelenő előjeleket.

A 3-*j* szimbólumok további fontos tulajdonsága, hogy az oszlopok páros számú transzpozíciója (páros paritású permutációja) a szimbólum értékét változatlanul hagyja,

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix},$$

míg páratlan számú transzpozíciója (páratlan paritású permutációja) a $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ faktorral való szorzással egyenértékű, csakúgy mint az alsó sorban az összes argumentum negatívvá tétele.

A 3-*j* szimbólumok ortogonalitási tulajdonságai nem írhatk fel annyira egyszerűen, mint a Clebsch–Gordan koefficiensre vonatkozóak, azonban a gyakorlatban inkább a 3-*j* szimbólumok használata terjedt el. (A számítógépes algebra programok is ezeket generálják.)

TABLE 2.4 Algebraic Expressions for Some Commonly Occurring **Clebsch–Gordan Coefficients** $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m\rangle^a$

A. $j_2 = 0$

$$\langle j_1\ m_1, 0\ 0 | j\ m\rangle = \delta_{m_1 m}\delta_{j_1 j}$$

B. $j_2 = \frac{1}{2}$

$$\langle j_1\ m-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | j_1+\tfrac{1}{2}\ m\rangle = \left[\frac{(j_1+m+\frac{1}{2})}{(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2} | j_1-\tfrac{1}{2}\ m\rangle = -\left[\frac{(j_1-m+\frac{1}{2})}{(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m+\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | j_1+\tfrac{1}{2}\ m\rangle = \left[\frac{(j_1-m+\frac{1}{2})}{(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m+\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2} | j_1-\tfrac{1}{2}\ m\rangle = \left[\frac{(j_1+m+\frac{1}{2})}{(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

C. $j_2 = 1$

$$\langle j_1\ m-1, 1\ 1 | j_1+1\ m\rangle = \left[\frac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m-1, 1\ 1 | j_1\ m\rangle = -\left[\frac{(j_1+m)(j_1-m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m-1, 1\ 1 | j_1-1\ m\rangle = \left[\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m, 1\ 0 | j_1+1\ m\rangle = \left[\frac{(j_1-m+1)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m, 1\ 0 | j_1\ m\rangle = \frac{m}{[j_1(j_1+1)]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\langle j_1\ m, 1\ 0 | j_1-1\ m\rangle = -\left[\frac{(j_1-m)(j_1+m)}{j_1(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m+1, 1\ -1 | j_1+1\ m\rangle = \left[\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m+1, 1\ -1 | j_1\ m\rangle = \left[\frac{(j_1-m)(j_1+m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle j_1\ m+1, 1\ -1 | j_1-1\ m\rangle = \left[\frac{(j_1+m+1)(j_1+m)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

TABLE 2.5 **Algebraic** Expressions for Some Commonly Occurring 3-j Symbols $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}^*$

A. $j_3 = 0$

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m}(2j+1)^{-\frac{1}{2}}$$

B. $j_3 = \frac{1}{2}$

$$\begin{pmatrix} j+\frac{1}{2} & j & \frac{1}{2} \\ m & -m-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = (-1)^{j-m-\frac{1}{2}}\left[\frac{j-m+\frac{1}{2}}{(2j+2)(2j+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

C. $j_3 = 1$

$$\begin{pmatrix} j+1 & j & 1 \\ m & -m-1 & 1 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m-1}\left[\frac{(j-m)(j-m+1)}{(2j+3)(2j+2)(2j+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+1 & j & 1 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m-1}\left[\frac{2(j+m+1)(j-m+1)}{(2j+3)(2j+2)(2j+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j & j & 1 \\ m & -m-1 & 1 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m}\left[\frac{2(j-m)(j+m+1)}{(2j+2)(2j+1)(2j)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j & j & 1 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m}\frac{2m}{[(2j+2)(2j+1)(2j)]^{\frac{1}{2}}}$$

D. $j_3 = \frac{3}{2}$

$$\begin{pmatrix} j+\frac{3}{2} & j & \frac{3}{2} \\ m & -m-\frac{3}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m+\frac{1}{2}}A_{\frac{3}{2}}(2j+4)[(j-m-\tfrac{1}{2})(j-m+\tfrac{1}{2})(j-m+\tfrac{3}{2})]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+\frac{3}{2} & j & \frac{3}{2} \\ m & -m-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m+\frac{1}{2}}A_{\frac{3}{2}}(2j+4)[3(j-m+\tfrac{1}{2})(j-m+\tfrac{3}{2})(j+m+\tfrac{3}{2})]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+\frac{1}{2} & j & \frac{3}{2} \\ m & -m-\frac{3}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m-\frac{1}{2}}A_{\frac{3}{2}}(2j+3)[3(j-m-\tfrac{1}{2})(j-m+\tfrac{1}{2})(j+m+\tfrac{3}{2})]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+\frac{1}{2} & j & \frac{3}{2} \\ m & -m-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m-\frac{1}{2}}A_{\frac{3}{2}}(2j+3)(j+3m+\tfrac{3}{2})[j-m+\tfrac{1}{2}]^{\frac{1}{2}}$$

where $A_{\frac{3}{2}}(X) = [X(X-1)(X-2)(X-3)]^{-\frac{1}{2}}$

TABLE 2.5 (continued)

E. $j_3 = 2$

$$\begin{pmatrix} j+2 & j & 2 \\ m & -m-2 & 2 \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m}A_2(2j+5)[(j-m-1)(j-m)(j-m+1)(j-m+2)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+2 & j & 2 \\ m & -m-1 & 1 \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m}A_2(2j+5)[4(j+m+2)(j-m+2)(j-m+1)(j-m)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+2 & j & 2 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m}A_2(2j+5)[6(j+m+2)(j+m+1)(j-m+2)(j-m+1)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+1 & j & 2 \\ m & -m-2 & 2 \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m+1}A_2(2j+4)[4(j-m-1)(j-m)(j-m+1)(j+m+2)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+1 & j & 2 \\ m & -m-1 & 1 \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m+1}A_2(2j+4)2(j+2m+2)[(j-m+1)(j-m)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j+1 & j & 2 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m+1}A_2(2j+4)2m[6(j+m+1)(j-m+1)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j & j & 2 \\ m & -m-2 & 2 \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m}A_2(2j+3)[6(j-m-1)(j-m)(j+m+1)(j+m+2)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j & j & 2 \\ m & -m-1 & 1 \end{pmatrix}$$
$$= (-1)^{j-m}A_2(2j+3)(2m+1)[6(j+m+1)(j-m)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{pmatrix} j & j & 2 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m}A_2(2j+3)2[3m^2 - j(j+1)]$$

where $A_2(X) = [X(X-1)(X-2)(X-3)(X-4)]^{-\frac{1}{2}}$

*Symmetry relations [see Equations (2.29)–(2.31)] may be used in conjunction with this table to evaluate all nonvanishing 3-j symbols with one angular momentum argument equal to $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$, or 2.