Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Marián Simon

Přibližné symetrie atomu helia

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí diplomové práce: Doc. Mgr. Jaroslav Zamastil Ph.D.
Studijní program: teoretická fyzika

2009

Chcel by som poďakovať vedúcemu práce, Doc. Mgr. Jaroslavovi Zamastilovi Ph.D., za výborné zadanie práce a za neustálu pomoc pri vznikajúcich problémoch.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 12.04.2009 Marián Simon

Obsah

Název práce: Přibližné symetrie atomu helia
Autor: Marián Simon
Katedra (ústav): Ústav teoretické fyziky
Vedoucí diplomové práce: Doc. Mgr. Jaroslav Zamastil Ph.D.
e-mail vedoucího: zamastil@karlov.mff.cuni.cz

Abstrakt: V tejto práci budeme hľadať dvoj-elektrónové stavy, ktoré s veľkou presnosťou diagonalizujú Hamiltonián atómu hélia v podpriestoroch $n_1 = n_2$, kde n_1 a n_2 sú hlavné kvantové čísla stavov prvého a druhého elektrónu. Najprv ukážeme niektoré symetrie v atóme vodíku, ktoré neskôr použijeme na hľadanie vlastných stavov operátorov $(\vec{X}^I - \vec{X}^{II})^2$ a $[(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})]^2$, kde X^I a X^{II} sú Runge-Lenzove operátory a L^I a L^{II} sú operátory momentov hybnosti. Tieto stavy budeme hľadať dvoma metódami, metódou 9J koeficientov a priamou diagonalizáciou operátorov $(\vec{X}^I - \vec{X}^{II})^2$ a $[(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})]^2$. Koncom práce numericky spočítame s akou presnosťou nami nájdené stavy diagonalizujú Hamiltonián atómu hélia.
Klíčová slova: 9J koeficienty, Coulombova interakcia, komutačné relácie

Title: Approximate symmetries in helium atom
Author: Marián Simon
Department: Institute of theoretical physics
Supervisor: Doc. Mgr. Jaroslav Zamastil Ph.D.
Supervisor's e-mail address: zamastil@karlov.mff.cuni.cz

Abstract: In this thesis we will be looking for two-electron states which with great accuracy diagonalize Hamiltonian of helium atom in subspaces $n_1 = n_2$, where n_1 a n_2 are principal quantum numbers of states of first and second electron. First, we will show chosen symmetries of hydrogen atom which will be used later for finding eigen states of operators $(\vec{X}^I - \vec{X}^{II})^2$ and $[(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})]^2$, where X^I a X^{II} are Runge-Lenz operators and L^I and L^{II} are angular momentum operators. We will use two methods to find these states, 9J coefficients method and direct diagonalization of operators $(\vec{X}^I - \vec{X}^{II})^2$ and $[(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})]^2$. Finally we will use numerical computations to determine accuracy of diagonalization of Hamiltonian of helium atom by our states.
Keywords: 9J coefficients, Coulomb interaction, commutation relations

Kapitola 1

Úvod

Pre atómy odlišné od vodíku, sa v Hamiltoniáne vyskytujú členy typu $\frac{1}{|\vec{r}^I - \vec{r}^{II}|}$, kde $\vec{r}^I$ a $\vec{r}^{II}$ sú polohové vektory elektrónov. Prítomnosť členov tohto typu vyplýva z elektrostatického pôsobenia medzi jednotlivými elektrónmi. Tieto členy spôsobujú vo výpočtoch veľké ťažkosti a preto by bolo výhodné nájsť efektívnu metódu ako s nimi pracovať.
V prípade vodíku existuje Runge-Lenzov operátor $\vec{X}$, pre ktorý platí

$$[\vec{X}, H] = 0, \qquad \vec{X} = -\frac{3}{4H}\vec{r} + [\vec{Q}, H],$$

kde H je Hamiltonián atómu vodíku a $\vec{Q}$ je vektorový operátor, pre ktorý je podstatné, že vystupuje len v komutátore s Hamiltoniánom. To znamená, že maticové elementy $< n, l, m|\vec{r}|n, l', m' >$ môžeme spočítať z maticových elementov $< n, l, m|\vec{X}|n, l', m' >$, kde samozrejme $|n, l, m >$ sú vodíkové vlnové funkcie a kvantové čísla n, l a m sú hlavné, vedľajšie a magnetické kvantové čísla.
Z toho dôvodu pre hélium očakávame, že ak $n_1 = n_2 = n$, kde n_1 a n_2 sú hlavné kvantové čísla prvého a druhého elektrónu, podarí sa nám maticové elementy $< n, l, l_1, l_2, m|\frac{1}{|\vec{r}^I - \vec{r}^{II}|}|n, l, l_1', l_2', m >$ spočítať pomocou maticových elementov $< n, l, l_1, l_2, m|\frac{1}{|\vec{X}^I - \vec{X}^{II}|}|n, l, l_1', l_2', m >$, kde stavy $|n, l, l_1, l_2, m >$ sú vlastnými stavmi operátoru $L^2 = (L^I + L^{II})^2$, kde L^I a L^{II} sú operátory momentov hybnosti pre prvý a druhý elektrón a kvantové čísla l_1 a l_2 sú vedľajšie kvantové čísla prvého a druhého elektrónu.
V tejto práci teda budeme hľadať takú lineárnu kombináciu stavov $|n, l, l_1, l_2, m >$, aby diagonalizovala operátor $|\vec{X}^I - \vec{X}^{II}|^2$. Tento postup bol prvý krát použitý v práci [1], pozri tiež [2],[3],[4] a [5]. Autorovia tejto práce chceli vysvetliť zvláštnosti pozorované v spektre hélia z práce [6], kde sa objavili závažné odchýlky od očakávaných výsledkov z Hartree-Fockových modelov. V absorbčnom spektre hélia sa vrámci série $^1P^0$ pre

$n_1 = 2$ očakávali vzhľadom k jednotlivým elektrónom série $2sn_2p$, $2pn_2s$ a $2pn_2d$. Namiesto toho, autorovia práce namerali len prvú dominantnú sériu, druhá bola veľmi slabá a tretiu vôbec nenamerali. Naviac pomer intenzít silnej a slabej série neodpovedal žiadnym z očakávaných pomerov intenzít stavov $2sn_2p$ a $2pn_2s$.
Hlavným cieľom tejto práce je nájsť efektívnu metódu počítania maticových elementov Hamiltoniánu atómu hélia na podpriestore $n_1 = n_2 = n$. Budeme konštruovať vlastné stavy operátorov $(\vec{X}^I - \vec{X}^{II})^2$ a $[(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})]^2$, pretože očakávame, že pre veľké hodnoty kvantových čísel n_1, n_2, l_1 a l_2, budú tieto stavy diagonalizovať Hamiltonián hélia efektívnejšie ako je to možné doterajšími metódami. Taktiež predpokláme, že budú existovať vzťahy podobné výberovým pravidlám, teda že sa nám podarí určiť, ktoré nediagonálne maticové elementy Hamiltoniánu hélia v báze nami pripravených stavov sú nenulové. Očakávame tiež, že nami vytvorená metóda hľadania vlastných stavov ope-rátorov $(\vec{X}^I - \vec{X}^{II})^2$ a $(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})$ bude rýchlejšia ako už existujúca metóda 9J koeficientov.
V tejto práci ukážem potrebné symetrie atómu vodíku v Kapitole 2. V Kapitole 3 ukážem, ako pripraviť stavy, ktoré diagonalizujú operátory $|X^I - X^{II}|^2$ a $[(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})]^2$ pomocou 9J koeficientov. V Kapitole 4 budem hľadať tie isté stavy priamou diagonalizáciou operátorov $|X^I - X^{II}|^2$ a $[(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})]^2$ a na jej záver obidve metódy porovnám. V Kapitole 5 naznačím, ako by operátor $\frac{1}{|\vec{r}^I - \vec{r}^{II}|}$ na nami pripravené stavy pôsobil a ako by to bolo možné využiť.

Kapitola 2

Symetrie atómu vodíku

Pre Hamiltonián atómu vodíku H platí

$$[\vec{X}, H] = 0, \qquad \vec{X} = -\frac{3}{4H}\vec{r} + [\vec{Q}, H],$$

kde $\vec{Q}$ je vektorový operátor, pre ktorý je podstanté, že vystupuje len v komutátore s Hamiltoniánom a $\vec{X}$ je Runge-Lenzov vektor. To znamená, že maticové elementy $< n, l, m|\vec{r}|n, l', m' >$ môžeme spočítať z maticových elementov $< n, l, m|\vec{X}|n, l', m' >$. Z toho dôvodu bude dôležité zaoberať sa vlastnosťami Runge-Lenzovho operátoru.
Pre operátor momentu hybnosti platí $[\vec{L}, H] = 0$, čo znamená, že bude výhodné pracovať v sférických súradniciach. V tejto kapitole preto definujem operátor $\vec{\nabla}^n$ a prevediem operátory smerového vektoru a momentu hybnosti $\vec{n}$ a $\vec{L}$ do sférických súradníc a ukážem ich vzájomné komutačné vzťahy. Potom definujem operátor typu $\vec{V}$, ukážem jeho vlastnosti a maticové elementy. Ďalej ukážem, že Runge-Lenzov operátor $\vec{X}$ je operátorom typu $\vec{V}$, že komutuje s Hamiltoniánom, ktorý prevediem do sférických súradníc a dopočítam maticové elementy operátoru $\vec{X}$. Cieľom tejto kapitoly bude pripraviť všetky rovnice, komutačné vzťahy a maticové elementy potrebné pre ďalšie výpočty. Takmer všetky rovnice v tejto kapitole sú uvedené v prácach [7] a [8], alebo z týchto prác priamo vyplývajú. Naviac však ukážem niektoré podrobnosti, ktoré v prácach [7] a [8] neboli uvedené.

2.1 Vektorové operátory a ich komutátory

2.1.1 Operátory $\vec{n}$, $\vec{\nabla}^n$

Vyjadrenie polohového vektoru vo sférických súradniciach je

$$\vec{x} = r\vec{n}, \tag{2.1}$$

kde r je radiálna vzdialenosť a $\vec{n}$ je jednotkový smerový vektor, ktorý môžeme zapísať v tvare

$$\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta). \tag{2.2}$$

Pre zložky operátoru hybnosti platí vzťah

$$p_k = -i\nabla_k = -i\frac{\partial}{\partial x_k}. \tag{2.3}$$

Od operátoru ∇_k v kartézkych súradniciach prejdeme ku vyjadreniu v sférických súradniciach vzťahom

$$\nabla_k = \frac{\partial}{\partial x_k} = n_k\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\nabla_k^n}{r}, \tag{2.4}$$

kde člen ∇_k^n už neobsahuje derivácie podľa radiálnej premennej a vyzerá nasledovne:

$$\nabla^n = \left(-\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \cos\phi\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}, \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \sin\phi\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}, -\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \tag{2.5}$$

Na tomto mieste si všimneme, že pre skalárny súčin n_k a ∇_k^n platí vzťah

$$n_k\nabla_k^n = 0 \tag{2.6}$$

Aby sme si mohli na tomto mieste spočítať komutátor $[n_j, \nabla_k^n]$, potrebujeme dosadiť do komutačného vzťahu

$$[x_j, p_k] = i\delta_{jk}, \tag{2.7}$$

kde δ_{kl} je Kroneckerovo delta, vyjadrenie zložiek x_j a p_k z rovníc (2.1) a (2.3). Ak to urobíme, dostávame rovnicu

$$i\delta_{jk} = -i[rn_j, n_k\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\nabla_k^n}{r}] = -i[rn_j, n_k\frac{\partial}{\partial r}] - i[rn_j, \frac{\nabla_k^n}{r}]. \tag{2.8}$$

Teraz využijeme, že operátory $\vec{n}$ a $\vec{\nabla}^n$ nezávisia na r, pomocou čoho rovnicu (2.8) upravíme do tvaru

$$i\delta_{jk} = -in_j n_k[r, \frac{\partial}{\partial r}] - i[n_j, \nabla_k^n]. \tag{2.9}$$

Keď si ešte uvedomíme, že $[r, \frac{\partial}{\partial r}] = -1$, konečne dostáme rovnicu

$$[n_j, \nabla_k^n] = n_j n_k - \delta_{jk}. \tag{2.10}$$

V špeciálnom prípade $j = k$ a po vysčítaní cez index k prejde rovnica (2.10) na rovnicu

$$[n_k, \nabla_k^n] = -2. \tag{2.11}$$

S využitím rovnice (2.6) potom dostávame rovnicu

$$\nabla_k^n n_k = 2. \tag{2.12}$$

Podobne zo vzťahu $[x_j, x_k] = 0$ dostávame hneď rovnicu

$$[n_j, n_k] = 0. \tag{2.13}$$

Z rovnice $[p_j, p_k] = 0$ teraz spočítame hodnotu komutátoru $[\nabla_j^n, \nabla_k^n]$ tak, že dosadíme za zložky hybnosti z rovnice (2.3). Potom platí rovnica

$$[n_j\frac{\partial}{\partial r}, n_k\frac{\partial}{\partial r}] + [n_j\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\nabla_k^n}{r}] + [\frac{\nabla_j^n}{r}, n_k\frac{\partial}{\partial r}] + [\frac{\nabla_j^n}{r}, \frac{\nabla_k^n}{r}] = 0. \tag{2.14}$$

Opäť využijeme, že $\vec{n}$ a $\vec{\nabla}^n$ nezávisí na r, takže môžeme rovnicu (2.14) prepísať do tvaru

$$-\frac{1}{r^2}[\nabla_j^n, \nabla_k^n] = [n_j\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\nabla_k^n}{r}] + [\frac{\nabla_j^n}{r}, n_k\frac{\partial}{\partial r}]. \tag{2.15}$$

Teraz spočítame čiastočný komutátor $[n_j\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\nabla_k^n}{r}]$ z rovnice (2.15). Pre tento komutátor platí rovnica

$$\begin{aligned}
[n_j\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\nabla_k^n}{r}] &= n_j\nabla_k^n\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r} - \nabla_k^n n_j\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} \\
&= n_j\nabla_k^n\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - n_j\nabla_k^n\frac{1}{r^2} - \nabla_k^n n_j\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} \\
&= [n_j, \nabla_k^n]\frac{\partial}{\partial r} - n_j\nabla_k^n\frac{1}{r^2}.
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Ak tento výsledok dosadíme do rovnice (2.15), dostaneme rovnicu

$$-\frac{1}{r^2}[\nabla_j^n, \nabla_k^n] = [n_j, \nabla_k^n]\frac{\partial}{\partial r} - n_j\nabla_k^n\frac{1}{r^2} - [n_k, \nabla_j^n]\frac{\partial}{\partial r} + n_j\nabla_k^n\frac{1}{r^2}. \tag{2.17}$$

Teraz si už len uvedomíme, že komutátor $[n_j, \nabla^n_k]$ je symetrický v indexoch j a k, preto musí platiť rovnica

$$[n_j, \nabla^n_k] - [n_k, \nabla^n_j] = 0 \tag{2.18}$$

S využitím rovnice (2.18) a po prenásobení rovnice (2.17) faktorom $-\frac{1}{r^2}$ konečne dostávame rovnicu

$$[\nabla^n_j, \nabla^n_k] = n_j \nabla^n_k - n_k \nabla^n_j. \tag{2.19}$$

2.1.2 Operátor momentu hybnosti

Operátor momentu hybnosti je definovaný vzťahom

$$L_j = \epsilon_{jkl} x_k p_l, \tag{2.20}$$

čo je po vyjadrení v sférických súradniciach

$$L_j = -i\epsilon_{jkl} n_k \nabla^n_l, \tag{2.21}$$

pretože člen úmerný $\epsilon_{jkl} n_k n_l$ je identicky rovný nule. Na tomto mieste je vhodné pripomenúť niektoré vlastnosti Levi-Civitovho symbolu ϵ_{jkl}. Platia pre neho nasledujúce rovnice

$$\epsilon_{jkl}\epsilon_{jpq} = \delta_{kp}\delta_{lq} - \delta_{kq}\delta_{lp}, \tag{2.22}$$

$$\epsilon_{jkp}\epsilon_{jkq} = 2\delta_{pq}. \tag{2.23}$$

S využitím rovnice (2.22) sme schopný spočítať komutačný vzťah pre zložky operátoru momentu hybnosti. Do komutátoru $[L_j, L_k]$ dosadíme za zložky $\vec{L}$ z rovnice (2.20) a pri úpravách použijeme okrem rovnice (2.22) rovnicu (2.7):

$$\begin{aligned}
[L_j, L_k] &= (\epsilon_{j\alpha\beta} x_\alpha p_\beta)(\epsilon_{k\mu\nu} x_\mu p_\nu) - (\epsilon_{k\mu\nu} x_\mu p_\nu)(\epsilon_{j\alpha\beta} x_\alpha p_\beta) \\
&= \epsilon_{j\alpha\beta}\epsilon_{k\mu\nu}(x_\alpha p_\beta x_\mu p_\nu - x_\mu p_\nu x_\alpha p_\beta) \\
&= \epsilon_{j\alpha\beta}\epsilon_{k\mu\nu}(x_\alpha [p_\beta, x_\mu] p_\nu + x_\alpha x_\mu p_\beta p_\nu - x_\mu [p_\nu x_\alpha] p_\beta - x_\mu x_\alpha p_\nu p_\beta) \\
&= \epsilon_{j\alpha\beta}\epsilon_{k\mu\nu}(-i\delta_{\beta\mu} x_\alpha p_\nu + i\delta_{\alpha\nu} x_\mu p_\beta) \\
&= i\epsilon_{j\nu\beta}\epsilon_{k\mu\nu} x_\mu p_\beta - i\epsilon_{j\alpha\mu}\epsilon_{k\mu\nu} x_\alpha p_\nu = i\epsilon_{\nu\beta j}\epsilon_{\nu k\mu} x_\mu p_\beta - i\epsilon_{\mu j\alpha}\epsilon_{\mu\nu k} x_\alpha p_\nu \\
&= i(\delta_{\beta k}\delta_{j\mu} - \delta_{\beta\mu}\delta_{jk}) x_\mu p_\beta - i(\delta_{j\nu}\delta_{\alpha k} - \delta_{jk}\delta_{\alpha\nu}) x_\alpha p_\nu \\
&= i(x_j p_k - \delta_{jk} x_\beta p_\beta - x_k p_j + \delta_{jk} x_\alpha p_\alpha) = i(x_j p_k - x_k p_j) \\
&= i(\delta_{js}\delta_{kt} - \delta_{jt}\delta_{ks}) x_s p_t = i\epsilon_{ljk}\epsilon_{lst} x_s p_t = i\epsilon_{jkl} L_l.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Pre L^2 platí po priamom dosadení z rovnice (2.21) rovnica

$$L^2 = -(\epsilon_{jkl} n_k \nabla_l^n)(\epsilon_{jpq} n_p \nabla_q^n). \tag{2.25}$$

S využitím rovnice (2.22) upravíme rovnicu (2.25) do tvaru

$$\begin{aligned} L^2 &= (\delta_{kq}\delta_{lp} - \delta_{kp}\delta_{lq}) n_k \nabla_l^n n_p \nabla_q^n \\ &= n_k \nabla_l^n n_l \nabla_k^n - n_k \nabla_l^n n_k \nabla_l^n. \end{aligned} \tag{2.26}$$

Vďaka rovniciam (2.6) a (2.12) prvý člen v rovnici (2.26) vypadne a druhý upravím pomocou komutátoru z rovnice (2.10), takže dostávame rovnicu

$$\begin{aligned} L^2 &= -n_k [\nabla_l^n n_k] \nabla_l^n - n_k n_k \nabla_l^n \nabla_l^n \\ &= -n_k (\delta_{kl} - n_k n_l) \nabla_l^n - \nabla_l^n \nabla_l^n = -\nabla^{n2}. \end{aligned} \tag{2.27}$$

Pôsobenie zložiek operátoru momentu hybnosti a jeho kvadrátu na vodíkové stavy je nasledovné

$$L^2 |l, m >= l(l+1) |l, m >, \tag{2.28}$$

$$L_3 |l, m >= m |l, m >, \tag{2.29}$$

$$L_\pm |l, m >= \sqrt{(l \pm m)(l + 1 \mp m)} |l, m \pm 1 >, \tag{2.30}$$

kde samozrejme $L_\pm = L_1 \pm i L_2$. V neskorších výpočtoch sa ukáže vhodné definovať koeficienty λ_α tak, aby platilo

$$\lambda_3 = m \tag{2.31}$$

$$\lambda_\pm(l, m) = \sqrt{(l \pm m)(l + 1 \mp m)} \tag{2.32}$$

2.1.3 Vybrané komutačné vzťahy

V ďalších častiach práce bude potrebné poznať niektoré ďalšie komutačné vzťahy, preto si ich na tomto mieste spočítame.
Najprv spočítame komutátor $[L_k, n_j]$. Ak za L_k dosadíme z rovnice (2.21), tak pre $[L_k, n_j]$ platí rovnica

$$[L_k, n_j] = -i\epsilon_{kpq} [n_p \nabla_q^n, n_j] = -i\epsilon_{kpq} (n_p \nabla_q^n n_j - n_j n_p \nabla_q^n). \tag{2.33}$$

Po využití rovnice (2.10) na prehodenie ∇_q^n na poslendé miesto vo výraze $n_p \nabla_q^n n_j$ a odčítaní rovnakých členov dostávame výraz

$$[L_k, n_j] = -i\epsilon_{kpq} (n_p \delta_{qj} - n_p n_q n_j) = i\epsilon_{kjp} n_p \tag{2.34}$$

Člen $n_p n_q n_j$ vypadol, pretože je symetrický v indexoch p a q a Levi-Civitov tenzor je v nich antisymetrický.
Podobne spočítame aj komutátor $[L_k, \nabla^n_j]$, tu však použijeme naviac vzťah (2.19):

$$\begin{aligned} [L_k, \nabla^n_j] &= -i\epsilon_{kpq}[n_p \nabla^n_q, \nabla^n_j] = -i\epsilon_{kpq}(n_p \nabla^n_q \nabla^n_j - \nabla^n_j n_p \nabla^n_q) \\ &= -i\epsilon_{kpq}(n_p n_q \nabla^n_j - \delta_{jp} \nabla^n_q) = i\epsilon_{kjq}\nabla^n_q, \end{aligned} \tag{2.35}$$

kde zase člen symetrický v indexoch p a q vypadol.
Ďalej bude potrebné spočítať komutátor $[L^2, n_p]$. Za L^2 dosadíme z rovnice (2.27) a postupne upravujeme:

$$\begin{aligned} [L^2, n_p] &= -[\nabla^n_q \nabla^n_q, n_p] = n_p \nabla^n_q \nabla^n_q - \nabla^n_q \nabla^n_q n_p \\ &= [n_p, \nabla^n_q]\nabla^n_q + \nabla^n_q n_p \nabla^n_q - \nabla^n_q[\nabla^n_q, n_p] - \nabla^n_q n_p \nabla^n_q \\ &= (n_p n_q - \delta_{pq})\nabla^n_q - \nabla^n_q(\delta_{pq} - n_p n_q). \end{aligned} \tag{2.36}$$

Na tomto mieste je potrebné opäť použiť rovnice (2.6) a (2.12), čím dostávame rovnicu (2.36) v tvare:

$$[L^2, n_p] = -\delta_{pq}\nabla^n_q - \nabla^n_q \delta_{pq} + 2n_p = 2(n_p - \nabla^n_p). \tag{2.37}$$

Teraz sa budeme venovať komutátoru $[L^2, \nabla^n_p]$. Za L^2 dosadíme z rovnice (2.27) a postupne upravujeme:

$$\begin{aligned} [L^2, n_p] &= -[\nabla^n_q \nabla^n_q, \nabla^n_p] = \nabla^n_p \nabla^n_q \nabla^n_q - \nabla^n_q \nabla^n_q \nabla^n_p \\ &= [\nabla^n_p \nabla^n_q]\nabla^n_q + \nabla^n_q \nabla^n_p \nabla^n_q - \nabla^n_q[\nabla^n_q, \nabla^n_p] - \nabla^n_q \nabla^n_p \nabla^n_q \end{aligned} \tag{2.38}$$

Tu dosadíme do rovnice (2.38) komutačný vzťah (2.19) a zase vhodne použijeme rovnice (2.6) a (2.12), teda dostávame:

$$\begin{aligned} [L^2, n_p] &= (n_p \nabla^n_q - n_q \nabla^n_p)\nabla^n_q - \nabla^n_q(n_q \nabla^n_p - n_p \nabla^n_q) \\ &= -n_p L^2 - ([n_q, \nabla^n_p] + \nabla^n_p n_q)\nabla^n_q - 2\nabla^n_p + \nabla^n_q([n_p, \nabla^n_q] + \nabla^n_q n_p) \\ &= -n_p L^2 - [n_q, \nabla^n_p]\nabla^n_q - 2\nabla^n_p + \nabla^n_q[n_p, \nabla^n_q] - L^2 n_p \\ &= -n_p L^2 + \nabla^n_p - 2\nabla^n_p + 2n_p - \nabla^n_p - L^2 n_p \\ &= -n_p L^2 + 2(n_p - \nabla^n_p) - [L^2, n_p] - n_p L^2 = -2n_p L^2. \end{aligned} \tag{2.39}$$

V úpravách rovnice (2.39) sme (okrem už spomenutých rovníc) použili naviac rovnice (2.10) a (2.37).
Posledný komutátor, ktorý v tejto časti budeme počítať je $[L_k, n_j L^2]$.

$$\begin{aligned} [L_k, n_j L^2] &= L_k n_j L^2 - n_j L^2 L_k \\ &= L_k n_j L^2 - n_j L_k L^2 + n_j L_k L^2 - n_j L^2 L_k \\ &= [L_k, n_j]L^2 - n_j[L_k, L^2] \end{aligned} \tag{2.40}$$

Tu využijeme, že $[L_k, L^2] = 0$ a rovnicu (2.34), teda pre komutátor $[L_k, n_j L^2]$ platí:

$$[L_k, n_j L^2] = i\epsilon_{kjp} n_p L^2. \tag{2.41}$$

2.2 Maticové elementy operátoru typu $\vec{V}$

Operátory, ktoré sa dajú napísať v tvare

$$\vec{V} = \vec{n}[f(r) + h(r)L^2] + g(r)\vec{\nabla}^n, \tag{2.42}$$

budem v tejto práci nazývať operátormi typu $\vec{V}$. Predtým, ako začneme skúmať maticové elementy takýchto operátorov, ukážeme, že platí komutačný vzťah

$$[L_k, V_j] = i\epsilon_{kjm} V_m. \tag{2.43}$$

Platnosť tejto komutačnej relácie ľahko ukážeme, ak dosadíme rozpis operátoru $\vec{V}$ z rovnice (2.42).

$$[L_k, V_j] = [L_k, n_j]f(r) + [L_k, n_j L^2]h(r) + [L_k, \nabla_j^n]g(r) \tag{2.44}$$

Všetky dielčie komutátory už máme spočítané v rovniciach (2.34), (2.35) a (2.41), takže za nich do rovnice (2.44) dosadíme, teda

$$[L_k, V_j] = i\epsilon_{kjm}(n_m f(r) + n_m L^2 h(r) + \nabla_m^n g(r)), \tag{2.45}$$

čo už je zrejme rovnica (2.43).
Poďme sa teraz zamerať na maticové elementy operátorov typu $\vec{V}$. Ak napríklad budeme chcieť určiť, kedy budú maticové elementy $< l', m'|V_\alpha|l, m >$ nenulové, tak to urobíme nasledovne. Vzťahy (2.37) a (2.39) obložíme stavmy $< l', m'|$ zľava a $|l, m >$ zprava a dostaneme rovnicu

$$< l', m'|[L^2, n_k]|l, m > = < l', m'|2(n_k - \nabla_k^n)|l, m > \tag{2.46}$$

z dosadenia za komutátor $[L^2, n_k]$ a rovnicu

$$< l', m'|[L^2, n_k]|l, m > = \{l'(l'+1) - l(l+1)\} < l', m'|n_k|l, m > \tag{2.47}$$

z pôsobenia operátoru L^2. Ak obidve rovnice dáme dokopy, musí byť splnené

$$l'(l'+1) - l(l+1) - 2 < l', m'|n_k|l, m > = -2 < l', m'|\nabla_k^n|l, m > . \tag{2.48}$$

Z obloženia druhého komutátoru dostávame rovnicu

$$< l', m'|[L^2, \nabla_k^n]|l, m >=< l', m'| - 2n_k L^2|l, m > \tag{2.49}$$

z dosadenia za komutátor $[L^2, \nabla_k^n]$ a rovnicu

$$l'(l'+1) + l(l+1) < l', m'|\nabla_k^n|l, m >= -2l(l+1) < l', m'|n_k|l, m > \tag{2.50}$$

z pôsobenia operátoru L^2 a dosadení z predošlej rovnice. Jednoduchými algebraickými úpravami by sme z rovníc (2.48) a (2.50) naviac ukázali, že musí platiť:

$$(l'+l)(l'+l+2)(l'-l+1)(l'-l-1) < l', m'|n_k|l, m >= 0 \tag{2.51}$$

To teda znamená, že elementy $< l', m'|n_k|l, m >$ a $< l', m'|\nabla_k^n|l, m >$ budú nenulové len ak platí $l' = l \pm 1$. Len by som pripomenul, že zátvorky $(l'+l)$ a $(l'+l+2)$ nebudú nikdy nulové, pretože l' a l su nezáporné čísla. Ak si teraz uvedomíme, že sme požadovali operátor $\vec{V}$ v tvare (2.42) a obložíme ho stavmi $< l', m'|$ a $|l, m >$, dostneme:

$$< l', m'|V_k|l, m >=< l', m'|n_k\{f(r) + h(r)L^2\} + g(r)\nabla_k^n|l, m > \tag{2.52}$$

$$\begin{aligned} < l', m'|V_k|l, m > &= \{f(r) + h(r)l(l+1)\} < l', m'|n_k|l, m > + \\ &+ g(r) < l', m'|\nabla_k^n|l, m > \end{aligned} \tag{2.53}$$

Tu už je viedieť, že pre vektor $\vec{V}$ typu (2.42) musí platiť:

$$< l', m'|V_k|l, m >= 0 \qquad l' \neq l \pm 1 \tag{2.54}$$

Ak ďalej budeme uvažovať $[L_3, V_3] = 0$ a tento komutačný vzťah obložíme stavmi $< l', m'|$ a $|l, m >$, dostaneme:

$$< l', m'|[L_3, V_3]|l, m >= 0, \tag{2.55}$$

$$< l', m'|L_3V_3 - V_3L_3|l, m >= 0, \tag{2.56}$$

$$(m' - m) < l', m'|V_3|l, m >= 0, \tag{2.57}$$

$$< l', m'|V_3|l, m >= 0, \; m' \neq m. \tag{2.58}$$

Podobne ak vezmeme a $[L_3, V_\pm] = \pm V_\pm$ a obložíme ho $< l', m'|$ a $|l, m >$ dostaneme:

$$< l', m'|[L_3, V_\pm]|l, m >= \pm < l', m'|V_\pm|l, m >, \tag{2.59}$$

$$< l', m'|L_3V_\pm - V_\pm L_3|l, m >= \pm < l', m'|V_\pm|l, m >, \tag{2.60}$$

$$(m' - m) < l', m'|V_\pm|l, m >= \pm < l', m'|V_\pm|l, m >, \tag{2.61}$$

$$< l', m'|V_\pm|l, m >= 0, \; m' \neq m \pm 1. \tag{2.62}$$

Ak napríklad vezmeme komutátor $[L_+, V_+] = 0$, kde $L_+ = L_1 + iL_2$ a $V_+ = V_1 + iV_2$ a tento komutátor obložíme stavmi $< l - 1, m + 2|$ zľava a $|l, m >$ zprava dostávame:

$$< l - 1, m + 2|[L_+, V_+]|l, m >= 0, \tag{2.63}$$

$$< l - 1, m + 2|L_+V_+|l, m >=< l - 1, m + 2|V_+L_+|l, m > . \tag{2.64}$$

Po dosadení pôsobenia operátoru L_+ na stav $< l - 1, m + 2|$ zprava a na stav $|l, m >$ zľava dostávame:

$$\frac{< l - 1, m + 1|V_+|l, m >}{< l - 1, m + 2|V_+|l, m + 1 >} = \sqrt{\frac{(l - m)(l + m + 1)}{(l + m + 1)(l - m - 2)}}. \tag{2.65}$$

Teraz len podelíme identické členy pod odmocninou a nahradíme ich členmi $(l - m - 1)$:

$$\frac{< l - 1, m + 1|V_+|l, m >}{< l - 1, m + 2|V_+|l, m + 1 >} = \sqrt{\frac{(l - m)(l - m - 1)}{(l - m - 1)(l - m - 2)}}. \tag{2.66}$$

V tomto tvare rovnice (2.66) je vidieť, že citateľ a menovateľ sa líšia len posunom čísla m o jednotku. Preto môžeme napísať maticový element operátoru V_+ v tvare:

$$< l - 1, m + 1|V_+|l, m >= c_l\sqrt{(l - m)(l - m - 1)}, \tag{2.67}$$

kde c_l je konštanta závislá len od kvantového čísla l. Ak teraz uvážime rovnicu (2.67) a využijeme, že $2V_3 = [V_+, L_-]$, ľahko dostaneme:

$$< l - 1, m|V_3|l, m >= c_l\sqrt{(l - m)(l + m)}. \tag{2.68}$$

A podobne, uvážením $V_- = [L_-, V_3]$ dostaneme:

$$< l - 1, m - 1|V_-|l, m >= -c_l\sqrt{(l + m - 1)(l + m)}. \tag{2.69}$$

Ak budeme predpokladať, že operátor V_3 je reálny, potom aj koeficient c_l je reálny a hermitovským združením rovníc (2.67), (2.69) a (2.68) a posunutím čísla l tak, aby napravo od operátoru bol stav $|l,m>$ obdrží me rovnice:

$$< l+1, m+1|V_+|l,m >= -c_{l+1}\sqrt{(l+m+1)(l+m+2)}, \qquad (2.70)$$

$$< l+1, m|V_3|l,m >= c_{l+1}\sqrt{(l+1-m)(l+1+m)}, \qquad (2.71)$$

$$< l+1, m-1|V_-|l,m >= c_{l+1}\sqrt{(l-m+2)(l-m-1)}. \qquad (2.72)$$

Ešte ale potrebujeme určiť koeficient c_l. K tomu si pomôžeme rovnicami:

$$(V_+V_- + V_3^2)|l,m >= [c_l^2(2l-1)(l+m) + c_{l+1}^2(l+1-m)(2l+3)]|l,m >, \qquad (2.73)$$

$$(V_+V_- + V_3^2)|l,m >= (V^2 - i[V_1,V_2]])|l,m >, \qquad (2.74)$$

kde rovnicu (2.73) by sme dostali priamym pôsobením operátorov na stav $|l,m>$ a rovnica (2.74) je len využitie nasledujúceho:

$$V^2 = V_1^2 + V_2^2 + V_3^2 = V_3^2 + (V_+V_- + V_-V_+)/2. \qquad (2.75)$$

Na to, aby sme zistili presný tvar koeficientu c_l už budeme potrebovať konkrétny vektor typu $\vec{V}$.

2.3 Runge-Lenzov vektor

2.3.1 Runge-Lenzov vektor v sférických súradniciach

Runge-Lenzov vektor má v kartézskych súradniciach tvar

$$\vec{X} = -\frac{N}{2}\Big(\vec{L}\times\vec{p} - \vec{p}\times\vec{L}\Big) - N\vec{n}, \qquad (2.76)$$

kde N je hlavné kvantové číslo stavu na ktorý tento vektor pôsobí, $\vec{L}$ je ope-rátor momentu hybnosti, $\vec{p}$ je operátor hybnosti a $\vec{n}$ je jendotkový smerový vektor. Tento vektor si vyjadríme v sférických súradniciach. Dosadíme teda za $\vec{p}$ a $\vec{L}$ z rovníc (2.3),(2.4) a (2.21). Potom

$$\begin{aligned}\vec{X} &= -\frac{N}{2}\Big(- i\vec{L}\times(\vec{n}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\nabla^n}{r}) + i(\vec{n}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\nabla^n}{r})\times\vec{L}\Big) - N\vec{n} \\ &= -\frac{N}{2}\Big(i\frac{\partial}{\partial r}(\vec{n}\times\vec{L} - \vec{L}\times\vec{n}) + \frac{i}{r}(\vec{\nabla}^n\times\vec{L} - \vec{L}\times\vec{\nabla}^n)\Big) - N\vec{n}. \qquad (2.77)\end{aligned}$$

Teraz upravíme členy $(\vec{n}\times\vec{L} - \vec{L}\times\vec{n})$ a $(\vec{\nabla}^n\times\vec{L} - \vec{L}\times\vec{\nabla}^n)$.

$$\begin{aligned}(\vec{L}\times\vec{n} - \vec{n}\times\vec{L})_\gamma &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\alpha n_\beta - \epsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\alpha L_\beta = \epsilon_{\alpha\beta\gamma}(L_\alpha n_\beta - n_\alpha L_\beta) \\ &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma}(n_\beta L_\alpha - n_\alpha L_\beta + [L_\alpha, n_\beta]) \qquad (2.78)\end{aligned}$$

Využitím rovnice (2.34) dostávame

$$(\vec{L} \times \vec{n} - \vec{n} \times \vec{L})_\gamma = \epsilon_{\alpha\beta\gamma}(n_\beta L_\alpha - n_\alpha L_\beta + i\epsilon_{\alpha\beta k} n_k).$$

S využitím identity (2.23) potom platí

$$(\vec{L} \times \vec{n} - \vec{n} \times \vec{L})_\gamma = n_\alpha L_\beta(\epsilon_{\beta\alpha\gamma} - \epsilon_{\alpha\beta\gamma}) + 2i\delta_{k\gamma} n_k = -2\epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\alpha L_\beta + 2in_\gamma.$$

Avšak platí

$$\begin{aligned} -2\epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\alpha L_\beta &= 2i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\epsilon_{\mu\nu\beta} n_\alpha n_\mu \nabla^n_\nu = 2i(\delta_{\mu\gamma}\delta_{\nu\alpha} - \delta_{\mu\alpha}\delta_{\nu\gamma}) n_\alpha n_\mu \nabla^n_\nu \\ &= 2i(n_\nu n_\gamma \nabla^n_\nu - n_\mu n_\mu \nabla^n_\gamma). \end{aligned} \tag{2.79}$$

Kedže platí rovnica (2.6), potom

$$-2\epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\alpha L_\beta = -2i\nabla^n_\gamma,$$

a teda

$$(\vec{n} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{n})_\gamma = -2i(n_\gamma - \nabla^n_\gamma).$$

Podobne si rozpíšeme člen $(\vec{\nabla}^n \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{\nabla}^n)$:

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla}^n \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{\nabla}^n)_\gamma &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma}(\nabla^n_\alpha L_\beta - L_\alpha \nabla^n_\beta) \\ &= \epsilon_{\alpha\beta\gamma}(\nabla^n_\alpha L_\beta - \nabla^n_\beta L_\alpha - [L_\alpha, \nabla^n_\beta]) \\ &= \nabla^n_\alpha L_\beta(\epsilon_{\alpha\beta\gamma} - \epsilon_{\beta\alpha\gamma}) - \epsilon_{\alpha\beta\gamma}[L_\alpha, \nabla^n_\beta] \\ &= 2\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\nabla^n_\alpha L_\beta - \epsilon_{\alpha\beta\gamma}[L_\alpha, \nabla^n_\beta], \end{aligned} \tag{2.80}$$

kde po využití rovnice (2.35) a identity (2.22) dostávame

$$-\epsilon_{\alpha\beta\gamma}[L_\alpha, \nabla^n_\beta] = -2i\nabla^n_\gamma.$$

Zatiaľ teda máme

$$(\vec{\nabla}^n \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{\nabla}^n)_\gamma = 2\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\nabla^n_\alpha L_\beta - 2i\nabla^n_\gamma.$$

Ešte upravíme člen $2\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\nabla^n_\alpha L_\beta$:

$$\begin{aligned} 2\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\nabla^n_\alpha L_\beta &= 2\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\nabla^n_\alpha(-i\epsilon_{\mu\nu\beta} n_\mu \nabla^n_\nu) \\ &= -2i(\delta_{\mu\gamma}\delta_{\nu\alpha} - \delta_{\mu\alpha}\delta_{\nu\gamma})\nabla^n_\alpha n_\mu \nabla^n_\nu) \\ &= -2i(\nabla^n_\nu n_\gamma \nabla^n_\nu - \nabla^n_\mu n_\mu \nabla^n_\gamma). \end{aligned} \tag{2.81}$$

Kedže $\nabla^n_\mu n_\mu = 2$, potom platí

$$2\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\nabla^n_\alpha L_\beta = 4i\nabla^n_\gamma - 2i(n_\gamma \nabla^n_\nu \nabla^n_\nu + [\nabla^n_\nu, n_\gamma]\nabla^n_\nu).$$

Ak ešte na úpravu $[\nabla^n_\nu, n_\gamma]$ použijeme rovnicu (2.10), dostaneme:

$$\begin{aligned}2\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\nabla^n_\alpha L_\beta &= 4i\nabla^n_\gamma - 2i(n_\gamma\nabla^n_\nu\nabla^n_\nu + (\delta_{\nu\gamma} - n_\nu n_\gamma)\nabla^n_\nu) \\ &= 4i\nabla^n_\gamma - 2i\delta_{\nu\gamma}\nabla^n_\nu - 2in_\gamma\nabla^n_\nu\nabla^n_\nu \\ &= 2i\nabla^n_\gamma + 2in_\gamma L^2. \end{aligned} \tag{2.82}$$

Teda celkovo máme

$$(\vec{\nabla}^n \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{\nabla}^n)_\gamma = 2i\nabla^n_\gamma + 2in_\gamma L^2 - 2i\nabla^n_\gamma = 2in_\gamma L^2.$$

Teraz dosadíme za obidve zátvorky $(\vec{\nabla}^n \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{\nabla}^n)$ a $(\vec{\nabla}^n \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{\nabla}^n)$ do rovnice (2.77) a dostávame rovnicu

$$\begin{aligned}\vec{X} &= -\frac{N}{2}\Big(i\frac{\partial}{\partial r}2i(\vec{\nabla}^n - \vec{n}) + \frac{i}{r}2i\vec{n}L^2\Big) - N\vec{n} \\ &= N\Big(- \vec{n} - \vec{n}\frac{\partial}{\partial r} + \vec{n}\frac{1}{r}L^2 + \vec{\nabla}^n\frac{\partial}{\partial r}\Big) \\ &= N\Big[\vec{n}\Big(- 1 - \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}L^2\Big) + \vec{\nabla}^n\frac{\partial}{\partial r}\Big]. \end{aligned} \tag{2.83}$$

2.3.2 Kvadrát Runge-Lenzovho vektoru

Pre kvadrát operátoru $\vec{X}$ platí

$$X^2 = N^2[1 + 2H(L^2 + 1)], \tag{2.84}$$

kde H je operátor, ktorý zatiaľ nešpecifikujeme. Neskôr však ukážeme, že sa jedná o Hamiltonián atómu vodíku. Na to, aby sme dostali operátor X^2 v tvare rovnice (2.84), zoberieme druhú mocninu operátoru $\vec{X}$ z rovnice (2.83)

$$X^2 = N^2\Big[n_k\Big(- 1 - \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{r}\Big) + \nabla^n_k\frac{\partial}{\partial r}\Big]^2,$$

kde si navyše označíme $O = \Big(- 1 - \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{r}\Big)$. Potom platí

$$\frac{X^2}{N^2} = n_k O n_k O + n_k O \nabla^n_k\frac{\partial}{\partial r} + \nabla^n_k\frac{\partial}{\partial r}n_k O + \nabla^n_k\frac{\partial}{\partial r}\nabla^n_k\frac{\partial}{\partial r} \tag{2.85}$$

Teraz postupne upravíme jednotlivé členy v rovnici (2.85)

$$n_k O n_k O = n_k n_k O^2 + n_k[O, n_k]O$$

Komutátor $[O, n_k] = \frac{1}{r}[L^2, n_k]$, pretože zvyšné členy v operátore O komutujú s operátorom n_k. Potom vďaka rovnici (2.37) platí

$$[O, n_k] = \frac{2}{r}(n_k - \nabla_k^n),$$

$$\begin{aligned} n_k O n_k O &= O^2 + n_k \tfrac{2}{r}(n_k - \nabla_k^n)O = O^2 + \tfrac{2}{r}O \\ &= (\tfrac{L^2}{r} - 1 - \tfrac{\partial}{\partial r})(\tfrac{L^2}{r} - 1 - \tfrac{\partial}{\partial r}) + \tfrac{2}{r}(\tfrac{L^2}{r} - 1 - \tfrac{\partial}{\partial r}) \\ &= (\tfrac{L^2}{r} - 1)^2 + \left(\tfrac{\partial}{\partial r}\right)^2 - (\tfrac{L^2}{r} - 1)\tfrac{\partial}{\partial r} - \tfrac{\partial}{\partial r}(\tfrac{L^2}{r} - 1) + \tfrac{2}{r}(\tfrac{L^2}{r} - 1 - \tfrac{\partial}{\partial r}) \\ &= (\tfrac{L^2}{r} - 1)^2 + \left(\tfrac{\partial}{\partial r}\right)^2 - 2(\tfrac{L^2}{r} - 1)\tfrac{\partial}{\partial r} + \tfrac{L^2}{r^2} + \tfrac{2}{r}(\tfrac{L^2}{r} - 1 - \tfrac{\partial}{\partial r}) \\ &= \tfrac{L^4}{r^2} + 1 - 2\tfrac{L^2}{r} + \left(\tfrac{\partial}{\partial r}\right)^2 - 2(\tfrac{L^2}{r} - 1)\tfrac{\partial}{\partial r} + 3\tfrac{L^2}{r^2} + \tfrac{2}{r}(-1 - \tfrac{\partial}{\partial r}). \end{aligned} \tag{2.86}$$

Posledný výraz zatiaľ necháme, a budeme upravovať ďalšie členy:

$$n_k O \nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r} = n_k \nabla_k^n O \frac{\partial}{\partial r} + n_k [O, \nabla_k^n] \frac{\partial}{\partial r}.$$

Komutátor $[O, \nabla_k^n] = \frac{1}{r}[L^2, \nabla_k^n]$, pretože zvyšné členy v operátore O komutujú s operátorom ∇_k^n. Potom vďaka rovnici (2.39) a vďaka $n_k \nabla_k^n = 0$ platí

$$n_k O \nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r} = -2 n_k \frac{1}{r}(n_k L^2)\frac{\partial}{\partial r} = -2\frac{L^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}.$$

Upravíme ďalší člen:

$$\begin{aligned} \nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r} n_k O &= \nabla_k^n n_k \frac{\partial}{\partial r} O = 2\frac{\partial}{\partial r} O \\ &= -2\frac{\partial}{\partial r} - 2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + 2\frac{L^2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - 2\frac{L^2}{r^2}. \end{aligned} \tag{2.87}$$

A už ostáva upraviť len posledný člen:

$$\nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r} \nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r} = \nabla_k^n \nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r} = -L^2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2$$

Po dosadení za všekty spočítané členy dostávame pre X^2 rovnicu

$$\begin{aligned} \frac{X^2}{N^2} &= \frac{L^4}{r^2} + 1 - 2\frac{L^2}{r} + \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - 2(\frac{L^2}{r} - 1)\frac{\partial}{\partial r} + 3\frac{L^2}{r^2} + \frac{2}{r}(-1 - \frac{\partial}{\partial r}) \\ &\quad -2\frac{L^2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - 2\frac{\partial}{\partial r} - 2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + 2\frac{L^2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - 2\frac{L^2}{r^2} - L^2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 \\ &= \frac{L^4}{r^2} + 1 - 2\frac{L^2}{r} - \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - 2(\frac{L^2}{r} - 1)\frac{\partial}{\partial r} \\ &\quad + \frac{2}{r}(-1 - \frac{\partial}{\partial r}) - 2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{r^2} - L^2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2. \end{aligned} \tag{2.88}$$

Teraz len usporiadame vhodne členy

$$\begin{aligned}
\frac{X^2}{N^2} &= 1+\frac{L^2}{r^2}+\frac{L^4}{r^2}-\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-L^2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 \\
&\quad -2\frac{L^2}{r}-2\left(\frac{L^2}{r}-1\right)\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2}{r}\left(-1-\frac{\partial}{\partial r}\right)-2\frac{\partial}{\partial r} \\
&= 1+\frac{L^2}{r^2}+\frac{L^4}{r^2}-\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-L^2\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 \\
&\quad -\frac{2}{r}-\frac{2L^2}{r}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{2L^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+2\frac{\partial}{\partial r}-2\frac{\partial}{\partial r} \\
&= 1+\frac{L^2}{r^2}(1+L^2)-\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2(1+L^2) \\
&\quad -\frac{2}{r}(1+L^2)-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}(1+L^2).
\end{aligned} \tag{2.89}$$

Teraz konečne môžeme napísať rovnicu

$$\frac{X^2}{N^2}=1+\left[\frac{L^2}{r^2}-\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-\frac{2}{r}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right](1+L^2), \tag{2.90}$$

kde operátor $\left[\frac{L^2}{r^2}-\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-\frac{2}{r}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right]$ označíme ako $2H$ a neskôr ukážeme, že sa skutočne jedná o Hamiltonián atómu vodíku. Po tejto substitúcii teda dostávame rovnicu

$$\frac{X^2}{N^2}=1+2H(1+L^2). \tag{2.91}$$

Podarilo sa nám teda ukázať, že platí rovnica (2.84).

2.3.3 Komutátor zložiek Runge-Lenzovho vektoru

Pre komutátor $[X_i, X_j]$ dostaneme priamym dosadením za zložky $\vec{X}$ rovnicu

$$[X_i,X_j]=N^2[n_i\frac{L^2}{r}-n_i(1+\frac{\partial}{\partial r})+\nabla_i^n\frac{\partial}{\partial r},n_j\frac{L^2}{r}-n_j(1+\frac{\partial}{\partial r})+\nabla_j^n\frac{\partial}{\partial r}] \tag{2.92}$$

Komutátor $[X_i, X_j]$ si rozdelíme na 9 častí nasledovne

$$T_1=[n_i\frac{L^2}{r},n_j\frac{L^2}{r}],\quad T_2=[n_i(1+\frac{\partial}{\partial r}),n_j(1+\frac{\partial}{\partial r})],\quad T_3=[\nabla_i^n\frac{\partial}{\partial r},\nabla_j^n\frac{\partial}{\partial r}],$$

$$T_4=[n_i\frac{L^2}{r},n_j(1+\frac{\partial}{\partial r})],\quad T_5=[n_i(1+\frac{\partial}{\partial r}),n_j\frac{L^2}{r}],\quad T_6=[n_i\frac{L^2}{r},\nabla_j^n\frac{\partial}{\partial r}],$$

$$T_7 = [\nabla_i^n \frac{\partial}{\partial r}, n_j \frac{L^2}{r}], \quad T_8 = [n_i(1+\frac{\partial}{\partial r}), \nabla_j^n \frac{\partial}{\partial r}], \quad T_9 = [\nabla_i^n \frac{\partial}{\partial r}, n_j(1+\frac{\partial}{\partial r})],$$

Teda

$$[X_i, X_j] = N^2(T_1 + T_2 + T_3 - T_4 - T_5 + T_6 + T_7 - T_8 - T_9)$$

Teraz spočítame hodnoty jednolivých komutátorov $T_1 ... T_9$:

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{1}{r^2}(n_i L^2 n_j L^2 - n_j L^2 n_i L^2) \\ &= \frac{1}{r^2}(n_i n_j L^2 L^2 + n_i [L^2, n_j] L^2 - n_j n_i L^2 L^2 - n_j [L^2, n_i] L^2) \\ &= \frac{1}{r^2}(n_i [L^2, n_j] - n_j [L^2, n_i]) L^2, \end{aligned} \tag{2.93}$$

využijeme rovnicu (2.37) a dostávame

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{1}{r^2} 2[n_i(n_j - \nabla_j^n) - n_j(n_i - \nabla_i^n)] L^2 \\ &= \frac{2}{r^2}(n_j \nabla_i^n - n_i \nabla_j^n) L^2. \end{aligned} \tag{2.94}$$

Komutátor T_1 ponecháme v tomto tvare a ideme upraviť komutátor T_2:

$$\begin{aligned} T_2 &= n_i(1 + \frac{\partial}{\partial r}) n_j (1 + \frac{\partial}{\partial r}) - n_j (1 + \frac{\partial}{\partial r}) n_i (1 + \frac{\partial}{\partial r}) \\ &= n_i n_j (1 + \frac{\partial}{\partial r})(1 + \frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i (1 + \frac{\partial}{\partial r})(1 + \frac{\partial}{\partial r}) = 0. \end{aligned} \tag{2.95}$$

Upravíme komutátor T_3:

$$\begin{aligned} T_3 &= \nabla_i^n \frac{\partial}{\partial r} \nabla_j^n \frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n \frac{\partial}{\partial r} \nabla_i^n \frac{\partial}{\partial r} \\ &= \nabla_i^n \nabla_j^n \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n \nabla_i^n \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r} \\ &= [\nabla_i^n, \nabla_j^n] \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}. \end{aligned} \tag{2.96}$$

Pre posledný výraz vďaka rovnici (2.19) platí rovnica

$$T_3 = (n_i \nabla_j^n - n_j \nabla_i^n) \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}. \tag{2.97}$$

Upravíme komutátor T_4:

$$T_4 = n_i \frac{L^2}{r} n_j (1 + \frac{\partial}{\partial r}) - n_j (1 + \frac{\partial}{\partial r}) n_i \frac{L^2}{r}$$

$$
\begin{aligned}
&= n_i L^2 n_j \frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i L^2 (1+\frac{\partial}{\partial r})\frac{1}{r} \\
&= n_i L^2 n_j \frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i L^2 \frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i L^2 (\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}) \\
&= (n_i L^2 n_j - n_j n_i L^2)\frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i L^2 (\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}) \\
&= (n_i n_j L^2 + n_i [L^2, n_j] - n_j n_i L^2)\frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i L^2 (\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}) \\
&= n_i [L^2, n_j]\frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i L^2 (\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}). \qquad (2.98)
\end{aligned}
$$

S využitím rovnice (2.37) potom pre komutátor T_4 platí rovnica

$$
T_4 = 2n_i(n_j - \nabla_j^n)\frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i L^2(\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}). \qquad (2.99)
$$

Na tomto mieste si všimneme, že pre dvojice komutátorov (T_4, T_5), (T_6, T_7) a (T_8, T_9) z ich definície vyplýva

$$
T_4(i,j) = -T_5(j,i), \quad T_6(i,j) = -T_7(j,i), \quad T_8(i,j) = -T_9(j,i)
$$

Potom teda pre komutátor T_5 platí rovnica

$$
T_5 = -2n_j(n_i - \nabla_i^n)\frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) + n_i n_j L^2(\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}). \qquad (2.100)
$$

Teraz upravíme komutátor T_6:

$$
\begin{aligned}
T_6 &= n_i L^2 \frac{1}{r}\nabla_j^n \frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n \frac{\partial}{\partial r} n_i L^2 \frac{1}{r} = n_i L^2 \nabla_j^n \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n n_i L^2 \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r} \\
&= n_i L^2 \nabla_j^n \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r^2} \\
&= n_i \nabla_j^n L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + n_i [L^2, \nabla_j^n]\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r^2} \\
&= \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + [n_i, \nabla_j^n] L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + n_i [L^2, \nabla_j^n]\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r^2} \\
&= [n_i, \nabla_j^n] L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + n_i [L^2, \nabla_j^n]\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r^2}. \qquad (2.101)
\end{aligned}
$$

Posledný výraz ešte zjednodušíme dosadením z rovníc (2.10) a (2.39):

$$
\begin{aligned}
T_6 &= (n_i n_j - \delta_{ij}) L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + n_i(-2n_j L^2)\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r^2} \\
&= [(n_i n_j - \delta_{ij}) L^2 + n_i(-2n_j L^2)]\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r^2} \\
&= -(n_i n_j + \delta_{ij}) L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r^2}. \qquad (2.102)
\end{aligned}
$$

Potom pre T_7 platí rovnica

$$T_7 = (n_j n_i + \delta_{ji})L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_i^n n_j L^2 \frac{1}{r^2}. \tag{2.103}$$

Upravíme komutátor T_8:

$$\begin{aligned} T_8 &= n_i(1+\frac{\partial}{\partial r})\nabla_j^n \frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n \frac{\partial}{\partial r} n_i (1+\frac{\partial}{\partial r}) \\ &= n_i \nabla_j^n (1+\frac{\partial}{\partial r})\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n n_i \frac{\partial}{\partial r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) \\ &= n_i \nabla_j^n (1+\frac{\partial}{\partial r})\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_j^n n_i (1+\frac{\partial}{\partial r})\frac{\partial}{\partial r} \\ &= [n_i, \nabla_j^n](1+\frac{\partial}{\partial r})\frac{\partial}{\partial r}. \end{aligned} \tag{2.104}$$

Tu dosadíme za $[n_i, \nabla_j^n]$ z rovnice (2.10) a dostaneme rovnicu

$$T_8 = (n_i n_j - \delta_{ij})(1+\frac{\partial}{\partial r})\frac{\partial}{\partial r}. \tag{2.105}$$

Potom pre komutátor T_9 platí rovnica

$$T_9 = -(n_j n_i - \delta_{ij})(1+\frac{\partial}{\partial r})\frac{\partial}{\partial r}. \tag{2.106}$$

Vzhľadom k tomu, že dvojice (T_4, T_5), (T_6, T_7) a (T_8, T_9) vystupujú v komutátore $[X_i, X_j]$ s rovnakým znamienkom a platia pre nich vzťahy $T_4(i,j) = -T_5(j,i)$, $T_6(i,j) = -T_7(j,i)$ a $T_8(i,j) = -T_9(j,i)$, bude výhodné si pred dosadením komutátorov $T_1 ... T_9$ do komutátoru $[X_i, X_j]$ spočítať hodnoty $T_{10} = T_4 + T_5$, $T_{11} = T_6 + T_7$ a $T_{12} = T_8 + T_9$, pretože členy symerické v indexoch i a j vypadnú.

$$\begin{aligned} T_{10} &= 2n_i(n_j - \nabla_j^n)\frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) - n_j n_i L^2(\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}) \\ &\quad -2n_j(n_i - \nabla_i^n)\frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) + n_i n_j L^2(\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}) \\ &= 2(n_j \nabla_i^n - n_i \nabla_j^n)\frac{1}{r}(1+\frac{\partial}{\partial r}) \end{aligned} \tag{2.107}$$

$$\begin{aligned} T_{11} &= -(n_i n_j + \delta_{ij})L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla_j^n n_i L^2 \frac{1}{r^2} \\ &\quad +(n_j n_i + \delta_{ji})L^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \nabla_i^n n_j L^2 \frac{1}{r^2} \\ &= (\nabla_j^n n_i - \nabla_i^n n_j)L^2 \frac{1}{r^2} \end{aligned} \tag{2.108}$$

$$T_{12} = (n_i n_j - \delta_{ij})(1 + \frac{\partial}{\partial r})\frac{\partial}{\partial r} - (n_j n_i - \delta_{ij})(1 + \frac{\partial}{\partial r})\frac{\partial}{\partial r} = 0 \quad (2.109)$$

Potom môžeme napísať pre komutátor $[X_i, X_j]$ rovnicu

$$\begin{aligned} [X_i, X_j] &= N^2(T_1 + T_3 - T_{10} + T_{11}) = N^2\Big[\frac{2}{r^2}(n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)L^2 \\ &+(n_i\nabla_j^n - n_j\nabla_i^n)\Big(\frac{\partial}{\partial r}\Big)^2 - 2(n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)\frac{1}{r}(1 + \frac{\partial}{\partial r}) \\ &+(\nabla_j^n n_i - \nabla_i^n n_j)L^2\frac{1}{r^2}\Big]. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Na tomto mieste využijem, že platí:

$$\begin{aligned} (\nabla_j^n n_i - \nabla_i^n n_j) &= (n_i\nabla_j^n + [\nabla_j^n, n_i] - n_j\nabla_i^n - [\nabla_i^n, n_j]) \\ &= (n_i\nabla_j^n - n_j\nabla_i^n) + (n_j n_i - \delta_{ji}) - (n_i n_j - \delta_{ij}) \\ &= (n_i\nabla_j^n - n_j\nabla_i^n). \end{aligned} \quad (2.111)$$

S využitím poslednej rovnice teda platí:

$$\begin{aligned} [X_i, X_j] &= N^2\Big[\frac{2}{r^2}(n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)L^2 - (n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)\Big(\frac{\partial}{\partial r}\Big)^2 \\ &-2(n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)\frac{1}{r}(1 + \frac{\partial}{\partial r}) - (n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)L^2\frac{1}{r^2}\Big] \\ &= N^2(n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)[\frac{2}{r^2}L^2 - \Big(\frac{\partial}{\partial r}\Big)^2 - 2\frac{1}{r}(1 + \frac{\partial}{\partial r}) - L^2\frac{1}{r^2}] \\ &= N^2(n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)\Big[\frac{L^2}{r^2} - \Big(\frac{\partial}{\partial r}\Big)^2 - \frac{2}{r}\Big(1 + \frac{\partial}{\partial r}\Big)\Big]. \end{aligned} \quad (2.112)$$

Ak urobíme substitúciu, ktorá viedla na rovnicu (2.91) za výraz v hranatej zátvorke, dostaneme pre komutátor $[X_i, X_j]$ vzťah

$$[X_i, X_j] = N^2(n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n)(2H). \quad (2.113)$$

Ak si ešte uvedomíme, že platí:

$$\begin{aligned} n_j\nabla_i^n - n_i\nabla_j^n &= (\delta_{\mu j}\delta_{\nu i} - \delta_{\mu i}\delta_{\nu j})n_\mu\nabla_\nu^n = \epsilon_{jik}\epsilon_{\mu\nu k}n_\mu\nabla_\nu^n \\ &= i\epsilon_{jik}(-i)\epsilon_{\mu\nu k}n_\mu\nabla_\nu^n = i\epsilon_{jik}L_k, \end{aligned} \quad (2.114)$$

potom môžeme rovnicu (2.113) napísať v tvare

$$[X_i, X_j] = N^2 i\epsilon_{jik}L_k(2H) = i\epsilon_{ijk}L_k(-2H)N^2. \quad (2.115)$$

2.3.4 Komutátor $[X_k, 2H]$

V tomto okamžiku bude užitočné spočítať komutátor $[X_k, 2H]$, pretože ak potom neskôr ukážeme, že H má význam Hamiltoniánu vodíku a Runge-Lenzov operátor s ním bude komutovať, potom je možné tento operátor diagonalizovať na vlastných stavoch Hamiltoniánu. Komutátor $[X_k, 2H]$ spočítame priamo, pričom za $2H$ dosadzujeme tak ako doteraz výraz $\left[\frac{L^2}{r^2} - \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right]$. Potom teda hľadáme hodnotu výrazu

$$\left[N\left\{n_k\left(-1 - \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}L^2\right) + \nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r}\right\}, \frac{L^2}{r^2} - \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] \quad (2.116)$$

Kvôli prehľadnosti opäť počítaný komutátor rozdelíme na menšie časti, tak aby platilo:

$$[X_k, 2H] = N \sum_{i=1}^{12} P_i, \quad (2.117)$$

pričom členy P_i sú definované nasledovne:

$$\begin{aligned}
P_1 &= -\left[n_k, \frac{L^2}{r^2}\right], \quad P_2 = \left[n_k, \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right], \quad P_3 = \left[n_k, \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right], \\
P_4 &= -\left[n_k \frac{\partial}{\partial r}, \frac{L^2}{r^2}\right], \quad P_5 = \left[n_k \frac{\partial}{\partial r}, \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right], \quad P_6 = \left[n_k \frac{\partial}{\partial r}, \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right], \\
P_7 &= \left[n_k \frac{L^2}{r}, \frac{L^2}{r^2}\right], \quad P_8 = -\left[n_k \frac{L^2}{r}, \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right], \quad P_9 = -\left[n_k \frac{L^2}{r}, \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right], \\
P_{10} &= \left[\nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r}, \frac{L^2}{r^2}\right], P_{11} = -\left[\nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r}, \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right], P_{12} = -\left[\nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r}, \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right].
\end{aligned}$$

Vzhľadom k tomu, že operátory n_k a ∇_k^n nezávisia na r, musí byť $P_2 = P_3 = P_5 = P_{11} = 0$. Zvyšných 8 komutátorov teraz spočítame.

$$P_1 = -\left[n_k, \frac{L^2}{r^2}\right] = \frac{1}{r^2}[L^2, n_k] \quad (2.118)$$

Dosadíme rovnicu (2.37), teda pre P_1 platí:

$$P_1 = \frac{2}{r^2}(n_k - \nabla_k^n). \quad (2.119)$$

Teraz upravíme operátor P_4:

$$\begin{aligned}
P_4 &= -\left[n_k \frac{\partial}{\partial r}, \frac{L^2}{r^2}\right] = L^2 n_k \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} - n_k L^2 \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r^2} \\
&= L^2 n_k \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} - n_k L^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} + 2 n_k L^2 \frac{1}{r^3} \\
&= [L^2, n_k]\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} + 2 n_k L^2 \frac{1}{r^3}. \quad (2.120)
\end{aligned}$$

Opäť dosadíme rovnicu (2.37), teda pre P_4 platí:

$$P_4 = 2(n_k - \nabla_k^n)\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} + 2n_k L^2 \frac{1}{r^3}. \tag{2.121}$$

Teraz upravíme operátor P_6:

$$\begin{aligned} P_6 &= \left[n_k \frac{\partial}{\partial r}, \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] = 2n_k \left[\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] \\ &= 2n_k \left\{\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{\partial}{\partial r}\right\} \\ &= 2n_k \left\{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{\partial}{\partial r}\right\} \\ &= -2n_k \frac{1}{r^2}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right). \end{aligned} \tag{2.122}$$

Teraz upravíme operátor P_7:

$$P_7 = \left[n_k \frac{L^2}{r}, \frac{L^2}{r^2}\right] = \frac{1}{r^3}[n_k L^2, L^2] = \frac{1}{r^3}[n_k, L^2]L^2. \tag{2.123}$$

Opäť dosadíme rovnicu (2.37), teda pre P_7 platí:

$$P_7 = \frac{2}{r^3}(\nabla_k^n - n_k)L^2. \tag{2.124}$$

Teraz upravíme operátor P_8:

$$\begin{aligned} P_8 &= -\left[n_k \frac{L^2}{r}, \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right] = n_k L^2 \left[\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2, \frac{1}{r}\right] \\ &= n_k L^2 \left\{\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 \frac{1}{r} - \frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right\} \\ &= n_k L^2 \left\{\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) - \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{1}{r^2} - \frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right\} \\ &= n_k L^2 \left\{\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{2}{r^3} - \frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2\right\} \\ &= 2n_k L^2 \left\{\frac{1}{r^3} - \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{2.125}$$

Teraz upravíme operátor P_9:

$$\begin{aligned} P_9 &= -\left[n_k \frac{L^2}{r}, \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] = 2n_k L^2 \left[\frac{1}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right), \frac{1}{r}\right] \\ &= 2n_k L^2 \left[\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right), \frac{1}{r}\right] = 2n_k L^2 \left[\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\right] \\ &= 2n_k L^2 \left[\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^3} - \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\right] = -2n_k L^2 \frac{1}{r^3}. \end{aligned} \tag{2.126}$$

Teraz upravíme operátor P_{10}:

$$\begin{aligned}
P_{10} &= \left[\nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r}, \frac{L^2}{r^2}\right] = \nabla_k^n L^2 \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r^2} - L^2 \nabla_k^n \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \\
&= \nabla_k^n L^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} - 2\nabla_k^n L^2 \frac{1}{r^3} - L^2 \nabla_k^n \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \\
&= [\nabla_k^n, L^2]\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} - 2\nabla_k^n L^2 \frac{1}{r^3}. \qquad (2.127)
\end{aligned}$$

Dosadíme rovnicu (2.39), teda pre P_{10} platí:

$$P_{10} = 2n_k L^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} - 2\nabla_k^n L^2 \frac{1}{r^3}. \qquad (2.128)$$

Teraz upravíme operátor P_{12}:

$$P_{12} = -\left[\nabla_k^n \frac{\partial}{\partial r}, \frac{2}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\right] = 2\nabla_k^n \left[\frac{1}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right), \frac{\partial}{\partial r}\right], \qquad (2.129)$$

pričom komutátor $\left[\frac{1}{r}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right), \frac{\partial}{\partial r}\right]$ sme už počítali pre operátor P_6 a jeho hodnota bola $\frac{1}{r^2}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)$. Potom pre operátor P_{12} platí rovnica

$$P_{12} = 2\nabla_k^n \frac{1}{r^2}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right). \qquad (2.130)$$

Teraz dosadíme komutátory $P_1 ... P_{12}$ do rovnice (2.117) a dostávame:

$$\begin{aligned}
[X_k, 2H] &= N\Big\{\frac{2}{r^2}(n_k - \nabla_k^n) + 2(n_k - \nabla_k^n)\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} + 2n_k L^2 \frac{1}{r^3} - 2n_k \frac{1}{r^2}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right) \\
&\quad + \frac{2}{r^3}(\nabla_k^n - n_k)L^2 + 2n_k L^2\left[\frac{1}{r^3} - \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)\right] - 2n_k L^2 \frac{1}{r^3} \\
&\quad + 2n_k L^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} - 2\nabla_k^n L^2 \frac{1}{r^3} + 2\nabla_k^n \frac{1}{r^2}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right)\Big\} \\
&= N\Big\{\frac{2}{r^2}(n_k - \nabla_k^n)\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right) - 2(n_k - \nabla_k^n)\frac{1}{r^2}\left(1 + \frac{\partial}{\partial r}\right) \\
&\quad + \frac{2}{r^3}(\nabla_k^n - n_k)L^2 + 2(n_k - \nabla_k^n)L^2 \frac{1}{r^3} - 2n_k L^2 \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) \\
&\quad + 2n_k L^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big\} = 0. \qquad (2.131)
\end{aligned}$$

Faktor 2 pri operátore H samozrejme môžeme vynechať, teda dostávame rovnicu

$$[X_k, H] = 0 \qquad (2.132)$$

2.4 Maticové elementy Runge-Lenzovho vektoru

2.4.1 Hamiltonián vodíku v sférických súradniciach

Hamiltonián nerelativistického atómu vodíku v kartézskych súradniciach má tvar

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{1}{r}. \tag{2.133}$$

Ak dosadíme za hybnosť $\vec{p}$ z rovníc (2.3) a (2.4), dostávame pre p^2 rovnicu

$$p^2 = -\left(\vec{n}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{\nabla}^n}{r}\right)^2 = -\left[\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + \vec{n}\frac{\partial}{\partial r}.\frac{\vec{\nabla}^n}{r} + \frac{\vec{\nabla}^n}{r}.\vec{n}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2}\right]. \tag{2.134}$$

Ak naviac využijeme rovnice (2.6) a (2.12), potom platí

$$p^2 = -\left[\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2}\right]. \tag{2.135}$$

Potom pre Hamiltonián platí rovnica

$$H = \frac{1}{2}\left[\frac{L^2}{r^2} - \left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - \frac{2}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r} + 1\right)\right]. \tag{2.136}$$

Teda vidíme, že operátor H v sekcii 2.3 skutočne odpovedá Hamiltoniánu atómu vodíku.
Pre pôsobenie Hamiltoniánu na jeho vlastné stavy $|N, l, m>$ platí rovnica

$$H|N, l, m> = -\frac{1}{2N^2}|N, l, m> . \tag{2.137}$$

Rovnica (2.137) nám naviac umožňuje prepísať komutátor (2.115) do pohodlnejšieho tvaru, pretože v zmysle pôsobenia na stavy $|N, l, m>$ platí:

$$[X_i, X_j]|N, l, m> = i\epsilon_{ijk}L_k|N, l, m> . \tag{2.138}$$

2.4.2 Maticové elementy

Z rovnice (2.83) je vidieť, že Runge-Lenzov vektor je operátor typu $\vec{V}$. Preto pre neho môžeme napísať rovnice (2.73), (2.74), kde od parametru c_l prejdeme k parametru c_l^N, aby sme zahrnuli aj závislosť na hlavnom kvantovom čísle pre vodíkové stavy a dostaneme rovnicu

$$\begin{aligned} &(X^2 - i[X_1, X_2])|N, l, m> = \\ = \ &[c_l^{N2}(2l-1)(l+m) + {c_{l+1}^N}^2(l+1-m)(2l+3)]|N, l, m> \end{aligned} \tag{2.139}$$

Ďalej využijeme rovnice (2.84) a (2.115) a dostávame z nich pre koeficienty c_l^N rovnice

$$\begin{aligned} & [N^2(1+2H(L^2+1)) - i^2L_3]|N,l,m>= \\ = & [c_l^{N^2}(2l-1)(l+m) + c_{l+1}^{N\ 2}(l+1-m)(2l+3)]|N,l,m>, \end{aligned} \quad (2.140)$$

$$\begin{aligned} & [N^2(1-\tfrac{1}{N^2}(l(l+1)+1)) + m]|N,l,m>= \\ = & [c_l^{N^2}(2l-1)(l+m) + c_{l+1}^{N\ 2}(l+1-m)(2l+3)]|N,l,m>, \end{aligned} \quad (2.141)$$

$$\begin{aligned} & [N^2 - l(l+1) - 1 + m]|N,l,m>= \\ = & [c_l^{N^2}(2l-1)(l+m) + c_{l+1}^{N\ 2}(l+1-m)(2l+3)]|N,l,m>. \end{aligned} \quad (2.142)$$

V tejto chvíli si ešte uvedomíme, že koeficienty c_l^N, nezávisia na kvantovom čísle m, preto dostávame pre koeficienty c_l^N vzhľadom k mocnine čísla m rovnice

$$m^0: \quad N^2 - l(l+1) - 1 = c_l^{N^2}(2l^2-l) + c_{l+1}^{N\ 2}(2l+3)(l+1), \quad (2.143)$$

$$m^1: \quad 1 = c_l^{N^2}(2l-1) - c_{l+1}^{N\ 2}(2l+3). \quad (2.144)$$

Z rovnice (2.144) si vyjadríme $c_{l+1}^{N\ 2}$ a dosadíme do rovnice (2.143):

$$c_{l+1}^{N\ 2} = \frac{c_l^{N^2}(2l-1) - 1}{(2l+3)} \quad (2.145)$$

$$N^2 - l(l+1) - 1 = c_l^{N^2}(2l^2-l) + (l+1)[c_l^{N^2}(2l-1) - 1]. \quad (2.146)$$

Rovnicu (2.146) už len nasledovne upravíme:

$$N^2 - l(l+1) - 1 = c_l^{N^2}[(2l^2-l) + (l+1)(2l-1)] - (l+1), \quad (2.147)$$

$$N^2 - (l-1)(l+1) - 1 = c_l^{N^2}[(2l^2-l) + (2l^2-l+2l-1)], \quad (2.148)$$

$$N^2 - l^2 = c_l^{N^2}(4l^2-1), \quad (2.149)$$

$$\frac{(N^2-l^2)}{(4l^2-1)} = c_l^{N^2}. \quad (2.150)$$

Z čoho teda pre koeficienty c_l^N dostávame nasledujúcu rovnicu

$$c_l^N = \sqrt{\frac{(N-l)(N+l)}{(2l+1)(2l-1)}} \quad (2.151)$$

V tomto okamihu už teda poznáme pôsobenie všetkých zložiek operátoru $\vec{X}$ na vodíkové stavy, ak sa pozrieme na rovnice (2.67), (2.68), (2.69), (2.70), (2.71) a (2.72) a uvedomíme si, že $\vec{X}$ je operátor typu $\vec{V}$:

$$X_3|N,l,m>= c_l^N\alpha(l,m)|l-1,m> +c_{l+1}^N\alpha(l+1,m)|l+1,m>, \tag{2.152}$$

$$\begin{aligned} X_+|N,l,m> &= c_l^N\beta(l-1,m)|l-1,m+1> - \\ &\quad -c_{l+1}^N\gamma(l+1,m)|l+1,m-1>, \end{aligned} \tag{2.153}$$

$$\begin{aligned} X_-|N,l,m> &= -c_l^N\beta(l-1,-m)|l-1,m-1> + \\ &\quad +c_{l+1}^N\gamma(l+1,-m)|l+1,m-1>, \end{aligned} \tag{2.154}$$

kde

$$\alpha(l,m) = \sqrt{(l+m)(l-m)}, \tag{2.155}$$

$$\beta(l,m) = \sqrt{(l-m+1)(l-m)}, \tag{2.156}$$

$$\gamma(l,m) = \sqrt{(l+m+1)(l+m)}. \tag{2.157}$$

Tieto výsledky budeme používať hlavne v Kapitole 4, kde budeme operátorom $\vec{X}$ pôsobiť na dvoj-elektrónové stavy.

Kapitola 3

Metóda 9J koeficientov

V tejto kapitole budeme hľadať vlastné stavy operátorov $(\vec{X}^I - \vec{X}^{II})^2$ a $[(\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II})]^2$ (ďalej už len X^2 a $(X.L)^2$), metódou 9J koeficientov, kde $\vec{X}^I$ a $\vec{X}^{II}$ sú Runge-Lenzove vektory dané rovnicou (2.76), resp. (2.83), pričom horné indexy odpovedajú prvém a druhému elektrónu. Analogicky L^I a L^{II} sú operátory momentu hybnosti pre prvý a druhý elektrón. Táto metóda je rozpracovaná v článkoch [1], [2], [3], [4] a [5]. V tejto kapitole budú zhrnuté výsledky z týchto článkov a naviac budú pridané všetky súvislosti a odvodenia, ktoré pomôžu danú tému pochopiť. V prvej časti tejto kapitoly sa zameriame na atóm vodíku a na bázu stavov, v ktorej sú operátory $\vec{L} + \vec{X}$ a $\vec{L} - \vec{X}$ diagonálne, pričom použijeme výsledky z článku [9]. Neskôr ukážeme, ako túto bázu využiť na diagonalizáciu ope-rátorov X^2 a $(X.L)^2$ a vysvetlíme význam 9J koeficientov.

3.1 Atóm vodíku - alternatívna báza

Najznámejšia báza stavov atómu vodíku je báza $|n, l, m >$, teda báza stavov, ktoŕa diagonalizuje operátory H, L^2 a L_z. My sa teraz budeme zaoberať alternatívnou bázou stavov, konkrétne bázou stavov, ktorá diagonalizuje ope-rátory j_1^2, j_2^2, j_{1z} a j_{2z}, kde

$$\vec{j}_1 = \frac{\vec{L} + \vec{X}}{2}, \tag{3.1}$$

$$\vec{j}_2 = \frac{\vec{L} - \vec{X}}{2}. \tag{3.2}$$

Operátory $\vec{j}_1$ a $\vec{j}_2$, majú vlastnosti operátorov momentu hybnosti, pretože splňujú rovnice:

$$
\begin{aligned}
[j_{1k}, j_{1l}] &= \frac{1}{4}[L_k + X_k, L_l + X_l] \\
&= \frac{1}{4}\Big([L_k, L_l] + [L_k, X_l] + [X_k, L_l] + [X_k, X_l]\Big) \\
&= \frac{1}{4}\Big(i\epsilon_{klm}L_m + i\epsilon_{klm}X_m - i\epsilon_{lkm}X_m + i\epsilon_{klm}L_m\Big) \\
&= \frac{1}{4}\Big(2i\epsilon_{klm}L_m + 2i\epsilon_{klm}X_m\Big) \\
&= i\epsilon_{klm}j_{1m}, \qquad (3.3)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[j_{2k}, j_{2l}] &= \frac{1}{4}[L_k - X_k, L_l - X_l] \\
&= \frac{1}{4}\Big([L_k, L_l] - [L_k, X_l] - [X_k, L_l] + [X_k, X_l]\Big) \\
&= \frac{1}{4}\Big(i\epsilon_{klm}L_m - i\epsilon_{klm}X_m + i\epsilon_{lkm}X_m + i\epsilon_{klm}L_m\Big) \\
&= \frac{1}{4}\Big(2i\epsilon_{klm}L_m - 2i\epsilon_{klm}X_m\Big) \\
&= i\epsilon_{klm}j_{2m}, \qquad (3.4)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[j_{1k}, j_{2l}] &= \frac{1}{4}[L_k + X_k, L_l - X_l] \\
&= \frac{1}{4}\Big([L_k, L_l] - [L_k, X_l] + [X_k, L_l] - [X_k, X_l]\Big) \\
&= \frac{1}{4}\Big(i\epsilon_{klm}L_m - i\epsilon_{klm}X_m - i\epsilon_{lkm}X_m - i\epsilon_{klm}L_m\Big) = 0. (3.5)
\end{aligned}
$$

V úpravách sme použili rovnice (2.43) a (2.138). Na tomto mieste je dôležité ukázať, že platí:

$$\vec{X}.\vec{L} = 0. \qquad (3.6)$$

To urobíme nasledovne:

$$\vec{X}.\vec{L} = \Big[-\frac{N}{2}(\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L}) - N\vec{n}\Big].\vec{L}$$

$$
\begin{aligned}
[\vec{L} \times \vec{p}].\vec{L} &= [\vec{L} \times \vec{p}]_i L_i = \epsilon_{ikl}L_k p_l L_i \\
&= \epsilon_{ikl}p_l L_k L_i + \epsilon_{ikl}[L_k, p_l]L_i \qquad (3.7)
\end{aligned}
$$

Prvý člen vypadne, pretože je symetrický v indexoch k a i a k úprave druhého členu využijeme $[L_k, p_l] = i\epsilon_{klm}p_m$:

$$\begin{aligned}
[\vec{L} \times \vec{p}].\vec{L} &= i\epsilon_{ikl}\epsilon_{klm}p_m L_i = 2ip_i L_i \\
&= 2ip_i\epsilon_{ipq}x_p p_q = 2i\epsilon_{ipq}p_i p_q x_p + i\epsilon_{ipq}p_i[x_p, p_q] \\
&= i\epsilon_{ipq}p_i[x_p, p_q] = -\epsilon_{ipq}p_i\delta_{pq} = 0,
\end{aligned} \tag{3.8}$$

$$[\vec{p} \times \vec{L}].\vec{L} = [\vec{p} \times \vec{L}]_i L_i = \epsilon_{ikl}p_k L_l L_i = 0, \tag{3.9}$$

$$\vec{n}.\vec{L} = n_i(-i\epsilon_{ikl}n_k\nabla_l^n) = -i\epsilon_{ikl}n_i n_k\nabla_l^{n\alpha} = 0. \tag{3.10}$$

Týmto sme teda ukázali, že platí $\vec{X}.\vec{L} = 0$. Zároveň však vďaka vzťahu (2.43) platí aj rovnica

$$X_j L_j = L_j X_j - i\epsilon_{jjk}X_k = L_j X_j, \tag{3.11}$$

teda taktiež platí

$$\vec{L}.\vec{X} = 0. \tag{3.12}$$

Teraz môžeme spočítať j_1^2 a j_2^2:

$$j_1^2 = \left(\frac{\vec{L} + \vec{X}}{2}\right)^2, \tag{3.13}$$

$$4j_1^2 = L^2 + X^2 + \vec{L}.\vec{X} + \vec{X}.\vec{L}, \tag{3.14}$$

$$j_2^2 = \left(\frac{\vec{L} - \vec{X}}{2}\right)^2, \tag{3.15}$$

$$4j_2^2 = L^2 + X^2 - \vec{L}.\vec{X} - \vec{X}.\vec{L}. \tag{3.16}$$

Po dosadení rovníc (3.6) a (3.12) do rovníc (3.14) a (3.16) dostávame rovnicu

$$4j_1^2 = 4j_2^2 = L^2 + X^2. \tag{3.17}$$

Všimnime si teraz, že vďaka rovnici (3.17) máme namiesto štyroch operátorov j_1^2, j_2^2, j_{1z} a j_{2z}, len tri rôzne. Teda vlastné stavy týchto operátorov môžeme značiť troma kvantovými číslami. Zvoľme ich tak, aby platilo:

$$\hat{j}_1^2|j_1, j_2, j_{1z}, j_{2z}> = \hat{j}_2^2|j_1, j_2, j_{1z}, j_{2z}> = j_1(j_1+1)|j_1, j_2, j_{1z}, j_{2z}>, \tag{3.18}$$

$$\hat{j}_{1z}|j_1, j_2, j_{1z}, j_{2z}> = j_{1z}|j_1, j_2, j_{1z}, j_{2z}>, \tag{3.19}$$

$$\hat{j}_{2z}|j_1, j_2, j_{1z}, j_{2z}> = j_{2z}|j_1, j_2, j_{1z}, j_{2z}>. \tag{3.20}$$

Kvantové čísla j_{1z} a j_{2z} nebudeme potrebovať v ďalších výpočtoch, preto sa podrobnejšie pozrieme len na význam kvantového čísla $j_1 = j_2$.
Z rovnice (2.84) je vidieť , že platí:

$$\begin{aligned} X^2|n,l,m> &= n^2\{1 - \frac{2}{2n^2}[l(l+1)+1]\}|n,l,m> \\ &= [n^2 - (l(l+1)-1]|n,l,m> . \end{aligned} \tag{3.21}$$

To znamená, že platí aj:

$$(X^2 + L^2)|n,l,m>= (n^2-1)|n,l,m> . \tag{3.22}$$

Ak ešte použijeme rovnicu (3.17), dostávame rovnicu

$$4\hat{j}_1^2|n,l,m>= 4\hat{j}_2^2|n,l,m>= (n^2-1)|n,l,m> . \tag{3.23}$$

Ak teraz požadujeme vlastné čísla operátrov $\hat{j}_1^2 = \hat{j}_2^2$ v tvare (3.18), musia potom pre tieto čísla platiť rovnice

$$4j_1(j_1+1) = 4j_2(j_2+1) = (n^2-1), \tag{3.24}$$

$$j_1(j_1+1) = j_2(j_2+1) = \frac{(n-1)}{2}\frac{(n+1)}{2}, \tag{3.25}$$

$$j_1 = j_2 = \frac{(n-1)}{2}. \tag{3.26}$$

3.2 Skladanie momentov hybnosti

Ak pracujeme s dvoj-elektrónovými stavmi $|n_1, l_1, m_1> |n_2, l_2, m_2>$, kde stavy $|n,l,m>$ sú stavy jednotlivých elektrónov v báze vodíkových stavov, je vďaka vzťahu $[L^2, H] = 0$ vhodné z nich konštruovať stavy $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ tak, aby pre $L^2 = (\vec{L}^I + \vec{L}^{II})^2$ platil vzťah

$$L^2|n_1,n_2,l,l_1,l_2,m>= l(l+1)|n_1,n_2,l,l_1,l_2,m> . \tag{3.27}$$

Tieto dvojelektrónové stavy sa dajú vyjadriť kombináciou súčinov jednoelektrónových stavov nasledovne:

$$|l,l_1,l_2,m>= \sum_{i=0} c_i|l_1, l_1 - i> |l_2, m - l_1 + i>, \tag{3.28}$$

kde c_i sú Clebsch-Gordanove koeficienty a platí pre nich nasledujúce:

$$c_i =< l_1, l_1 - i, l_2, m - l_1 + i|l, l_1, l_2, m> . \tag{3.29}$$

Pre Clebsch-Gordanove koeficienty platí rekurentný vzťah:

$$f_1(l,l_1,l_2,m,i)c_{i+1} + f_2(l,1_l,l_2,m,i)c_{i-1} = f_3(l,l_1,l_2,m,i)c_i, \quad (3.30)$$

$$f_1(l,l_1,l_2,m,i) \equiv [(i+1)(2l_1-i)(2l_2-m+i+1)(m-i)]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.31)$$

$$f_2(l,l_1,l_2,m,i) \equiv [(2l_1-i+1)i(m-i+1)(2l_2-m+i)]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.32)$$

$$f_3(l,l_1,l_2,m,i) \equiv [l(l+1)-l_1(l_1+1)-l_2(l_2+1)-2(l_1-i)(l_2-m+i)]. \quad (3.33)$$

Formulku (3.30) budem využívať pri konštrukcii vlastných stavov operátoru L^2. Konkrétne budem postupovať tak, že vezmem $c_0 = 1$, potom c_1 sa vypočíta z rovnice (3.30) pre $i = 0$, vyššie členy podobne. Posledným krokom bude normalizácia koeficientov c_i tak, aby platilo $c_0^2 + ...c_n^2 = 1$. Existuje priama súvislosť medzi Clebsch-Gordanovými koeficientmi a tak-zvanými 3J koeficientami tak, že platí rovnica

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} =$$

$$= \quad (-1)^{j_2-j_1-m}(2j+1)^{-\frac{1}{2}} < j_1,m_1,j_2,m_2|j,j_1,j_2,m >, \quad (3.34)$$

ktorá je vlastne definičnou rovnicou pre 3J koeficienty a člen $< j_1,m_1,j_2,m_2|j,j_1,j_2,m >$ je podľa (3.29) $c_{j_1-m_1}$, teda Clebsch-Gordanov koeficient prislúchajúci daným j_1, m_1, j_2, m_2, j a m.
Samozrejme, je možné skladať aj väčší počet momentov hybnosti. Pre nás zaujímavý prípad bude skladanie štyroch momentov hybnosti, ktoré je tiež opísané v knižkách [3] a [10]. Predstavme si, že by sme mali skladať 4 momenty hybnosti, označme si ich $\vec{j}_1$, $\vec{j}_2$, $\vec{j}_3$ a $\vec{j}_4$. Môžeme postupovať tak, že poskladáme najprv $\vec{j}_1 + \vec{j}_2 = \vec{j}_{12}$ a $\vec{j}_3 + \vec{j}_4 = \vec{j}_{34}$ a budeme hľadať bázu $|(j_1j_2)j_{12}(j_3j_4)j_{34} >$, v ktorej sú operátory j_{12}^2 a j_{34}^2 diagonálne. Potom definujeme $\vec{j}_{12} + \vec{j}_{34} = \vec{j}$, a budeme hľadať bázu $|[(j_1j_2)j_{12}(j_3j_4)j_{34}]j >$ v ktorej je diagonálny naviac operátor j^2. Podobným postupom by sme mohli vytvoriť bázu $|[(j_1j_3)j_{13}(j_2j_4)j_{24}]j >$. Potom pre sklárny súčin

$$C_{1324}^{1234} =< [(j_1j_2)j_{12}(j_3j_4)j_{34}]j|[(j_1j_3)j_{13}(j_2j_4)j_{24}]j > \quad (3.35)$$

platí nasledujúce:

$$C_{1324}^{1234} = [(2j_{12}+1)(2j_{34}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}, \quad (3.36)$$

kde pre všetky čísla j j_α a $j_{\beta\gamma}$ platí, že výrazy $j(j+1)$, $j_\alpha(j_\alpha+1)$ a $j_{\beta\gamma}(j_{\beta\gamma}+1)$ sú vlastné čísla operátorov j^2, j_α^2 a $j_{\beta\gamma}^2$ a

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix} \tag{3.37}$$

je $9J$ symbol a platí pre neho

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} = \sum_{m_{ij}} \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ m_{11} & m_{12} & m_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ m_{11} & m_{21} & m_{31} \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ m_{12} & m_{22} & m_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ m_{13} & m_{23} & m_{33} \end{pmatrix}, \tag{3.38}$$

kde symboly v okrúhlych zátvorkách sú 3J koeficienty definované rovnicou (3.34). Ak nás bude zaujímať, ako prejsť od bázy $|[(j_1j_2)j_{12}(j_3j_4)j_{34}]j>$ do bázy $|[(j_1j_3)j_{13}(j_2j_4)j_{24}]j>$, vieme tento prechod napísať v tvare:

$$|[(j_1j_3)j_{13}(j_2j_4)j_{24}]j> = \sum_{j_{12}j_{34}} C^{1234}_{1324} |[(j_1j_2)j_{12}(j_3j_4)j_{34}]j> . \tag{3.39}$$

Tento postup bude užitočný, pretože ak nájdeme také $\vec{j}_1$, $\vec{j}_2$, $\vec{j}_3$ a $\vec{j}_4$, aby jeden reťazec skladania momentov hybnosti viedol na stavy vlastné operátorov L^{I^2}, L^{II^2} a L^2 a druhý reťazec na stavy vlastné operátorom X^2, $\vec{X}.\vec{L}$ a L^2, budeme schopný z rovnice (3.39) vlastné stavy operátorov X^2, $\vec{X}.\vec{L}$ a L^2 vyjadriť ako lineárnu kombináciu stavov, ktoré sú vlastnými stavmi operátorov L^{I^2}, L^{II^2} a L^2.

3.3 Diagonalizácia X^2 a $(X.L)^2$ pomocou 9J koeficientov

V tejto sekcii využijeme výsledky sekcií 3.1 a 3.2 na to, aby sme našli vlastné stavy a vlastné čísla operátorov X^2 a $(X.L)^2$ vyjadrené v báze dvoj-elektrónových vodíkových stavov. Ostáva nám už iba vhodne zvoliť momenty $\vec{j}_1$, $\vec{j}_2$, $\vec{j}_3$ a $\vec{j}_4$ a vhodne navrhnúť poradie, v ktorom ich budeme skladať. To urobíme nasledovne:

$$\vec{j}_1 = \frac{\vec{L}^I + \vec{X}^I}{2}, \tag{3.40}$$

$$\vec{j}_2 = \frac{\vec{L}^I - \vec{X}^I}{2}, \tag{3.41}$$

$$\vec{j}_3 = \frac{\vec{L}^{II} - \vec{X}^{II}}{2}, \tag{3.42}$$

$$\vec{j}_4 = \frac{\vec{L}^{II} + \vec{X}^{II}}{2}, \tag{3.43}$$

kde značenie rímskymi indexmi odpovedá tomu, že operátory $\vec{j}_1$ a $\vec{j}_2$ pôsobia na prvý elektrón a operátory $\vec{j}_3$ a $\vec{j}_4$ na druhý elektrón. To, že operátory $\vec{j}_1 ... \vec{j}_4$ majú význam operátorov momentu hybnosti je zrejmé z časti 3.1, z rovníc (3.3), (3.4) a (3.5) a z toho, že operátory pôsobiace na rôzne častice spolu komutujú. Teraz môžeme navrhnúť postupnosť ich skladania.

Prvý spôsob ako tieto 4 momenty hybnosti poskladať je:

$$\vec{j}_{12} \equiv \vec{j}_1 + \vec{j}_2 = \vec{L}^I, \tag{3.44}$$

$$\vec{j}_{34} \equiv \vec{j}_3 + \vec{j}_4 = \vec{L}^{II}, \tag{3.45}$$

$$\vec{j} \equiv \vec{j}_{12} + \vec{j}_{34} = \vec{L}^I + \vec{L}^{II} = \vec{L}. \tag{3.46}$$

Ďalším z možných spôsobov skladania je:

$$\vec{j}_{13} \equiv \vec{j}_1 + \vec{j}_3 = \frac{\vec{L}^I + \vec{L}^{II}}{2} + \frac{\vec{X}^I - \vec{X}^{II}}{2} = \frac{\vec{L} + \vec{X}}{2}, \tag{3.47}$$

$$\vec{j}_{24} \equiv \vec{j}_2 + \vec{j}_4 = \frac{\vec{L}^I + \vec{L}^{II}}{2} - \frac{\vec{X}^I - \vec{X}^{II}}{2} = \frac{\vec{L} - \vec{X}}{2}, \tag{3.48}$$

$$\vec{j} \equiv \vec{j}_{13} + \vec{j}_{24} = \frac{\vec{L} + \vec{X}}{2} + \frac{\vec{L} - \vec{X}}{2} = \vec{L}. \tag{3.49}$$

Na tomto mieste sa ešte pozastavme, pretože sa tu objavuje menší problém. Aby sme si nespôsobili zbytočné problémy pri ďalších výpočtoch, požadujeme aby platilo pre pôsobenie zložiek operátorov $\vec{X}^I$ a $\vec{X}^{II}$

$$X_k^I|n_1, l_1, m_1 >= X_k^{II}|n_2, l_2, m_2 >, \tag{3.50}$$

ak $n_1 = n_2$, $l_1 = l_2$ a $m_1 = m_2$, teda aby operátory $\vec{X}^I$ a $\vec{X}^{II}$ pôsobili na obe častice rovnakým spôsobom. Pri našom postupe skladania momentov $\vec{j}_1 ... \vec{j}_4$ nám však platia pre $\vec{X}^I$ a $\vec{X}^{II}$ rovnice

$$\begin{aligned} \vec{X}^I &= \vec{j}_1 - \vec{j}_2, \\ \vec{X}^{II} &= \vec{j}_4 - \vec{j}_3. \end{aligned} \tag{3.51}$$

Pričom stavy $|n_1, l_1, m_1>$ a $|n_2, l_2, m_2>$ sú vlastnými stavmi operátorov ${L^I}^2$ a ${L^{II}}^2$, kde (v zmysle operátorov $\vec{j}_1 ... \vec{j}_4$)

$$\begin{aligned} \vec{L}^I &= \vec{j}_1 + \vec{j}_2, \\ \vec{L}^{II} &= \vec{j}_4 + \vec{j}_3. \end{aligned} \tag{3.52}$$

To znamená, že pre rozpis stavov $|n_1, l_1, m_1>$ a $|n_2, l_2, m_2>$ v bázi vlastných stavov operátorov $j_1^2 ... j_4^2$ platia rovnice

$$\begin{aligned} |l_1(j_1, j_2), m_1 > &= \sum_i c_i^I |j_1, i > |j_2, m_1 - i >, \\ |l_2(j_3, j_4), m_2 > &= \sum_i c_i^{II} |j_3, i > |j_4, m_2 - i >, \end{aligned} \tag{3.53}$$

kde c_i^I a c_i^{II} sú Clebsch-Gordanove koeficienty. Ak teraz zapôsobíme operátormi X_3^I a X_3^{II} na tieto stavy, dostávame

$$\begin{aligned} X_3^I |l_1(j_1, j_2), m_1 > &= (j_{13} - j_{23}) \sum_i c_i^I |j_1, i > |j_2, m_1 - i > \\ &= \sum_i (2i - m_1) c_i^I |j_1, i > |j_2, m_1 - i >, \\ X_3^{II} |l_2(j_3, j_4), m_2 > &= (j_{43} - j_{33}) \sum_i c_i^{II} |j_3, i > |j_4, m_2 - i > \\ &= \sum_i (m_2 - 2i) c_i^{II} |j_3, i > |j_4, m_2 - i > . \end{aligned} \tag{3.54}$$

Vidíme teda, že pôsobenie takto definovaných operátorov $\vec{X}^I$ a $\vec{X}^{II}$ nemá rovnakú formu. Ak by sme však uvažovali operátory $\vec{X}^I$ a $-\vec{X}^{II}$, už by to bolo v poriadku. Zámena $\vec{X}^{II}$ na $-\vec{X}^{II}$ odpovedá zámene $\vec{r}^{II}$ na $-\vec{r}^{II}$, čo je zrejmé priamo z definície operátoru $\vec{X}^{II}$ v rovnici (2.76). Lenže pri tejto zámene prechádza stav $|n_2, l_2, m_2>$ na $(-1)^{l_2}|n_2, l_2, m_2>$ a preto musíme faktor $(-1)^{l_2}$ do koeficientu C_{1324}^{1234} z rovnice (3.39) zahrnúť.
Tieto dva postupy skladania momentov hybnosti nám teda umožnia prechod z bázy, v ktorej sú vlastné operátory ${L^I}^2$, ${L^{II}}^2$ a L^2, teda stavy bežne značené $|l, l_1, l_2, m>$, definované rovnicou (3.29), do bázy v ktorej sú vlastnými ope-rátormi operátory j_{13}^2, j_{24}^2 a L^2. Značme zatiaľ tieto stavy $|p, q, l, m>$, kde význam kvantových čísel p a q vysvetlím neskôr. Pritom platí

$$j_{13}^2 = \left(\frac{\vec{L} + \vec{X}}{2}\right)^2 = \frac{L^2 + X^2 + \vec{L}.\vec{X} + \vec{X}.\vec{L}}{4}, \tag{3.55}$$

$$j_{24}^2 = \left(\frac{\vec{L} - \vec{X}}{2}\right)^2 = \frac{L^2 + X^2 - \vec{L}.\vec{X} - \vec{X}.\vec{L}}{4}. \tag{3.56}$$

Tu si ešte je potrebné uvedomiť, že pre skalárny súčin $\vec{X}.\vec{L}$ platí rovnica (4.38) a že operátory pôsobiace na rôzne elektróny spolu komutujú, teda

$$\vec{X}.\vec{L} = \vec{X}^{I}.\vec{L}^{II} - \vec{X}^{II}.\vec{L}^{I} = \vec{L}^{II}.\vec{X}^{I} - \vec{L}^{I}.\vec{X}^{II} = \vec{L}.\vec{X}. \tag{3.57}$$

Potom môžeme rovnice (3.55) a (3.56) zjednodušiť do tvaru

$$j_{13}^2 = \left(\frac{\vec{L}+\vec{X}}{2}\right)^2 = \frac{L^2 + X^2 + 2\vec{X}.\vec{L}}{4}, \tag{3.58}$$

$$j_{24}^2 = \left(\frac{\vec{L}-\vec{X}}{2}\right)^2 = \frac{L^2 + X^2 - 2\vec{X}.\vec{L}}{4}. \tag{3.59}$$

Kedže operátory j_{13}^2, j_{24}^2 a L^2 sú diagonálne v báze stavov $|p,q,l,m>$, potom je zrejmé, že v báze týchto stavov budú diagonálne aj operátory

$$j_{13}^2 + j_{24}^2 = \frac{L^2 + X^2}{2}, \tag{3.60}$$

$$X^2 = 2j_{13}^2 + 2j_{24}^2 - L^2, \tag{3.61}$$

$$j_{13}^2 - j_{24}^2 = \vec{X}.\vec{L}, \tag{3.62}$$

$$(X.L)^2 = (j_{13}^2 - j_{24}^2)^2. \tag{3.63}$$

Tu ešte na chvíľu odbočíme, pretože z rovníc (3.61) a (3.62) ľahko ukážeme, že platia rovnice

$$[X^2, L^2] = 0, \tag{3.64}$$

$$[(X.L), L^2] = 0. \tag{3.65}$$

Stačí si uvedomiť, že platí rovnica

$$[j_{13k}, j_{24l}] = [j_{1k} + j_{3k}, j_{2l} + j_{4l}] = 0, \tag{3.66}$$

čo vyplýva z rovnice (3.5) a z toho, že operátory pôsobiace na rôzne elektróny spolu komutujú. Potom určite platí aj:

$$[j_{13}^2, L^2] = [j_{13}^2, (\vec{j}_{13} + \vec{j}_{24})^2] = 0, \tag{3.67}$$

$$[j_{24}^2, L^2] = [j_{24}^2, (\vec{j}_{13} + \vec{j}_{24})^2] = 0. \tag{3.68}$$

Kedže operátory X^2 a $X.L$ máme rovnicami (3.61) a (3.62) vyjadrené pomocou operátorov j_{13}^2, j_{24}^2 a L^2, platnosť rovníc (3.64) a (3.65) je potom zrejmá. Tieto rovnice v tejto kapitole priamo využívať nebudeme, ale budú potrebné, keď budeme v ďalšej kapitole diagonalizovať operátory X^2 a $(X.L)^2$ priamou metódou.

Vďaka rovniciam (3.61) a (3.62) sa nám podarilo nájsť vlastné stavy operátorov X^2 a $(X.L)^2$, značíme ich $|n_1, n_2, p, q, l, m>$ a podľa (3.36) a (3.39) platí

$$|n_1, n_2, p, q, l, m >= \sum_{l_1 l_2} |n_1, n_2, l, l_1, l_2, m > C^{pql}_{n_1 l_1 n_2 l_2}, \tag{3.69}$$

$$C^{pql}_{n_1 l_1 n_2 l_2} = (-1)^{l_2}[(2l_1+1)(2l_2+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & l_1 \\ j_3 & j_4 & l_2 \\ j_{13} & j_{24} & l \end{Bmatrix}, \tag{3.70}$$

kde všetky zatiaľ neurčené kvantové čísla chápeme ako funkcie parametrov na ľavej strane rovnice (3.70).
Tu vidíme, že sme ešte celkom neskončili, pretože je potrebné určiť hodnoty kvantových čísel $j_1...j_4$, j_{13} a j_{24}. Kvantové čísla $j_1...j_4$ sú však určené vďaka rovnici (3.26), teda platia pre nich rovnice:

$$j_1 = j_2 = \frac{(n_1 - 1)}{2}, \tag{3.71}$$

$$j_3 = j_4 = \frac{(n_2 - 1)}{2}. \tag{3.72}$$

Pre kvantové čísla j_{13} a j_{24} platí obmedzenie

$$|j_1 - j_3| \leq j_{13} \leq (j_1 + j_3), \tag{3.73}$$

$$|j_2 - j_4| \leq j_{24} \leq (j_2 + j_4), \tag{3.74}$$

pretože operátory $\vec{j}_{13}$ a $\vec{j}_{24}$ sú dané rovnicami (3.47) a (3.48). Ak teraz dosadíme za kvantové čísla $j_1...j_4$, dostaneme

$$\frac{1}{2}|n_1 - n_2| \leq j_{13}, j_{24} \leq \frac{1}{2}(n_1 + n_2 - 2). \tag{3.75}$$

Ak budeme ďalej považovať elekrón s väčším hlavným kvantovým číslom za prvý, teda $n_1 \geq n_2$, rovnica (3.75) prejde na

$$\frac{1}{2}(n_1 - n_2) \leq j_{13}, j_{24} \leq \frac{1}{2}(n_1 + n_2 - 2). \tag{3.76}$$

Je zvykom neponechávať kvantové čísla j_{13} a j_{24}, ale prejsť od nich dvoma dvojicami transformácií k kvantovým číslam K a T

$$p = j_{13} + j_{24}, \tag{3.77}$$

$$q = j_{13} - j_{24}, \tag{3.78}$$

$$K = p - n_1 + 1, \tag{3.79}$$

$$T = |q|. \tag{3.80}$$

Rovnice (3.77) a (3.78) vysvetľujú význam kvantových čísel p a q v značení stavov $|p, q, l, m>$. Pre tieto kvantové čísla platí obmedzenie:

$$(n_1 - n_2) \leq p \leq (n_1 + n_2 - 2), \tag{3.81}$$

$$(1 - n_2) \leq q \leq (n_2 - 1). \tag{3.82}$$

Predtým ako napíšem obmedzenie pre K a T, upozorním na to, že extrémy K a T splňujú rovnice

$$(K + T)_{max} = (K - T)_{max} = n_2 - 1, \tag{3.83}$$

$$(K + T)_{min} = (K - T)_{min} = 1 - n_2. \tag{3.84}$$

Ak teda neuvažujeme extremálnu hodnotu kvanotvého čísla T, dostávame obmedzenia čísla K v závislosti na T

$$K_{max} + T \leq n_2 - 1, \tag{3.85}$$

$$K_{max} - T \leq n_2 - 1, \tag{3.86}$$

$$K_{min} + T \geq 1 - n_2, \tag{3.87}$$

$$K_{min} - T \geq 1 - n_2, \tag{3.88}$$

Teda konečne môzeme napísať rozsah povolených hodnôt kvantových čísel K a T

$$0 \leq T \leq (n_2 - 1) \tag{3.89}$$

a kedže $T \geq 0$

$$1 - n_2 + T \leq K \leq n_2 - 1 - T. \tag{3.90}$$

Posledným krokom je si uvedomiť, že $\vec{j}_{13} + \vec{j}_{24} = \vec{L}$, teda musí naviac platiť

$$|j_{13} - j_{24}| \leq l \leq (j_{13} + j_{24}), \tag{3.91}$$

$$|q| \leq l \leq p, \tag{3.92}$$

$$T \leq l \leq (K + n_1 - 1). \tag{3.93}$$

Potom teda definitívne

$$0 \leq T \leq min(l, n_2 - 1), \tag{3.94}$$

$$max(l+1-n_1, 1-n_2+T) \leq K \leq n_2 - 1 - T. \qquad (3.95)$$

Po zavedení čísel p a q môžeme rovnicu (3.70) napísať v tvare

$$C^{pql}_{n_1 l_1 n_2 l_2} = (-1)^{l_2}[(2l_1+1)(2l_2+1)(p+q)(p-q)]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} (n_1-1)/2 & (n_1-1)/2 & l_1 \\ (n_2-1)/2 & (n_2-1)/2 & l_2 \\ (p+q)/2 & (p-q)/2 & l \end{Bmatrix} \qquad (3.96)$$

Teraz spočítam poslednú vlastnosť stavov $|n_1, n_2, p, q, l, m>$, konkrétne vlastné čísla operátorov X^2 a $(X.L)^2$ pri pôsobení na tieto stavy, označme si ich κ a λ. Využijeme k tomu vyjadrenie operátorov X^2 a $(X.L)^2$ pomocou L^2, j_{13}^2 a j_{24}^2 z rovníc (3.61) a (3.63).

$$\kappa|p,q,l,m> = X^2|p,q,l,m> = 2j_{13}^2 + 2j_{24}^2 - L^2|p,q,l,m>, \qquad (3.97)$$

$$\lambda|p,q,l,m> = (X.L)^2|p,q,l,m> = (j_{13}^2 - j_{24}^2)^2|p,q,l,m> . \qquad (3.98)$$

Teda

$$\kappa = 2j_{13}(j_{13}+1) + 2j_{24}(j_{24}+1) - l(l+1), \qquad (3.99)$$

$$\lambda = [j_{13}(j_{13}+1) + j_{24}(j_{24}+1)]^2. \qquad (3.100)$$

Kvantové čísla j_{13} a j_{24} si vyjadríme z (3.77) a (3.78)

$$j_{13} = \frac{1}{2}(p+q),$$

$$j_{24} = \frac{1}{2}(p-q).$$

Potom teda pre κ a λ dostávame:

$$\kappa = (p+q)\Big(\frac{1}{2}(p+q)+1\Big) + (p-q)\Big(\frac{1}{2}(p-q)+1\Big) - l(l+1), \qquad (3.101)$$

$$\lambda = \Big[\frac{1}{2}(p+q)\Big(\frac{1}{2}(p+q)+1\Big) - \frac{1}{2}(p-q)\Big(\frac{1}{2}(p-q)+1\Big)\Big]^2, \qquad (3.102)$$

$$\kappa = \frac{1}{2}\Big((p+q)^2 + (p-q)^2\Big) + (p+q) + (p-q) - l(l+1), \qquad (3.103)$$

$$\lambda = \Big[\frac{1}{4}\Big((p+q)^2 - (p-q)^2\Big) + \frac{1}{2}\Big((p+q) - (p-q)\Big)\Big]^2, \qquad (3.104)$$

$$\kappa = p^2 + q^2 + 2p - l(l+1), \qquad (3.105)$$

$$\lambda = (pq+q)^2, \qquad (3.106)$$

$$\kappa = p(p+2) + q^2 - l(l+1), \qquad (3.107)$$

$$\lambda = (p+1)^2 q^2. \tag{3.108}$$

Počas odvodenia tvaru vlastného čísla λ si môžeme všimnúť, že operátor $(X.L)^2$ nerozlišuje znamienko vlastného čísla q. A kedže hľadáme vlastné stavy práve tohto operátoru, je preto nežiadúce, aby výsledok závisel na znamienku čísla q. Z toho dôvodu je teraz vhodné prejsť ku kvantovým číslam K a T z rovníc (3.79) a (3.80). Definujme potom stav $|K, T, l, m, \pi>$ nasledovne

$$|K, T, l, m, \pi> = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|p, |q|, l, m> + \pi(-1)^{n_1+n_2+p+l}|p, |q|, l, m>\Big), \tag{3.109}$$

kde π je parita stavu $|K, T, l, m, \pi>$. V stavoch vyššie sú obsiahnuté aj hlavné kvantové čísla n_1 a n_2, len nie sú vypísané. S využitím rovnice (3.69) môžeme napísať rovnice

$$|K, T, l, m, \pi> = \sum_{l_1 l_2} |n_1, n_2, l, l_1, l_2, m> D^{KTl\pi}_{n_1 l_1 n_2 l_2}, \tag{3.110}$$

kde koeficient $D^{KTl\pi}_{n_1 l_1 n_2 l_2}$ má vďaka rovniciam (3.69) a (3.109) tvar

$$D^{KTl\pi}_{n_1 l_1 n_2 l_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(C^{pTl}_{n_1 l_1 n_2 l_2} + \pi(-1)^{n_1+n_2+p+l} C^{p(-T)l}_{n_1 l_1 n_2 l_2}). \tag{3.111}$$

Tu je potrebné spomenúť, ze pre 9J symbol platí pri permutácii stĺpcov rovnica

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \\ j_7 & j_8 & j_9 \end{Bmatrix} = (-1)^S \begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ j_5 & j_4 & j_6 \\ j_8 & j_7 & j_9 \end{Bmatrix}, \tag{3.112}$$

kde pre symbol S platí $S = \sum_{i=1}^{9} j_i$. Teraz si uvedomme, že koeficienty $C^{pTl}_{n_1 l_1 n_2 l_2}$ a $C^{p(-T)l}_{n_1 l_1 n_2 l_2}$ sa líšia len permutáciou prvých dvoch sptĺpcov, teda platí

$$C^{p(-T)l}_{n_1 l_1 n_2 l_2} = (-1)^{n_1-1+n_2-1+l_1+l_2+l+p} C^{pTl}_{n_1 l_1 n_2 l_2}. \tag{3.113}$$

To znamená

$$D^{KTl\pi}_{n_1 l_1 n_2 l_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} C^{pTl}_{n_1 l_1 n_2 l_2}[1 + \pi(-1)^{(2n_1-1+2n_2-1+l_1+l_2+2l+2p)}], \tag{3.114}$$

$$D^{KTl\pi}_{n_1 l_1 n_2 l_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} C^{pTl}_{n_1 l_1 n_2 l_2}[1 + \pi(-1)^{(l_1+l_2)}]. \tag{3.115}$$

To ešte upravíme do tvaru

$$D^{KTl\pi}_{n_1 l_1 n_2 l_2} = C^{pTl}_{n_1 l_1 n_2 l_2} M(T, \pi), \tag{3.116}$$

kde pre normalizačný faktor $M(T,\pi)$ platí

$$\begin{aligned} M(T,\pi) &= \sqrt{2}, \quad ak \quad T > 0 \quad a \quad \pi = (-1)^{l_1+l_2}, \\ M(T,\pi) &= 0, \quad ak \quad T > 0 \quad a \quad \pi = (-1)^{l_1+l_2+1}, \\ M(T,\pi) &= 1, \quad ak \quad T = 0. \end{aligned} \tag{3.117}$$

V prípade $T = 0$ totiž nemáme rôzne hodnoty pre $+q$ a $-q$, teda uvažujeme len 1 stav. Ak ešte teraz dosadíme za p a q kvantové čísla K a T z rovníc (3.79) a (3.80) do rovnice (3.96) dostávame pre koeficienty $D^{KTl\pi}_{n_1l_1n_2l_2}$ rovnicu

$$D^{KTl\pi}_{n_1l_1n_2l_2} = (-1)^{l_2}[(2l_1+1)(2l_2+1)(K+T+n_1-1)(K-T+n_1-1)]^{\frac{1}{2}}$$
$$\begin{Bmatrix} (n_1-1)/2 & (n_1-1)/2 & l_1 \\ (n_2-1)/2 & (n_2-1)/2 & l_2 \\ (K+n_1-1+T)/2 & (K+n_1-1-T)/2 & l \end{Bmatrix} M(T,\pi). \tag{3.118}$$

A pre vlastné čísla operátorov X^2 a $(X.L)^2$ rovnice:

$$\kappa = (K+n_1-1)(K+n_1+1) + T^2 - l(l+1), \tag{3.119}$$

$$\lambda = (K+n_1)^2T^2, \tag{3.120}$$

ktoré ešte upravíme do tvaru:

$$\kappa = (K+n_1)^2 - 1 + T^2 - l(l+1), \tag{3.121}$$

$$\lambda = [(K+n_1)T]^2. \tag{3.122}$$

3.4 Program a jeho časová zložitosť

Program na výpočet vlastných stavov operátorov X^2 a $(X.L)^2$ pomocou 9J koeficientov je opäť priamočiary. Na začiatku počíta Clebsch-Gordanove koeficienty a to metódou uvedenou v podkapitole 3.2. Tie potom využíva vo funkciách odpovedajúcim rovniciam (3.34) a (3.38). Potom sa 9J symbol prenásobí faktorom z rovnice (3.118). Týmto získame koeficienty $D^{KTl\pi}_{n_1l_1n_2l_2}$ definované rovnicou (3.110).
Časová zložitosť programu je $O(n^{10})$, kde $n = n_1 + n_2$. Je to spôsobené tým, že funkcia na výpočet 9J koeficientov v programe obsahuje sumu prebiehajúcu cez 9 parametrov rádu $O(n)$ a konktrétny výpočet pod sumou je tiež rádu $O(n)$, odpovedajúci výpočtu Clebsch-Gordanvých koeficientov. Teda ak si znova označíme $O(CG)$ ako zložitosť výpočtu Clebsch-Gordanvých koeficientov, potom zložitosť celého programu je $O(n^9).O(CG)$.

Kapitola 4

Priama diagonalizácia operátorov X^2 a $(X.L)^2$

V Kapitole 3 sme ukázali metódu hľadania vlastných stavov operátorov X^2 a $(X.L)^2$ pomocou 9J koeficientov. V tejto kapitole budeme diagonalizovať tieto operátory priamo a ukážeme, že táto metóda má oproti metóde 9J koeficientov isté výhody. Materiál v tejto kapitole je pôvodný a hlavným výsledkom tejto kapitoly a celej práce je spolu so sústavami rovníc (4.86) a (4.91) program, popísaný na konci tejto kapitoly a pridaný v prílohe k práci.

4.1 Pôsobenie operátoru X^2

V predošlej kapitole sa nám podarilo ukázať, že platí $[L^2, X^2] = 0$. To znamená, že môzme hľadať vlastné stavy operátoru X^2 ako lineárnu kombináciu vlastných stavov operátoru L^2. Teda naším problémom je nájsť stavy označené $|\mathcal{L}>$, pre ktoré budeme požadovať nasledujúce:

$$X^2|\mathcal{L}>= \kappa|\mathcal{L}>, \tag{4.1}$$

$$|\mathcal{L}>= \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1 l_2}|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>, \tag{4.2}$$

kde $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ sú vlastné stavy operátoru L^2. Aby sme boli schopní túto úlohu vyriešiť, potrebujeme si najprv spočítať, ako pôsobí operátor X^2 na stavy $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$. To urobíme tak, že operátor X^2 rozpíšeme do tvaru

$$X^2 = (X^I - X^{II})^2 = (X^{I^2} + X^{II^2} - 2X_3^I X_3^{II} - X_+^I X_-^{II} - X_-^I X_+^{II}) \tag{4.3}$$

a zapôsobíme jednotlivými členmi na stavy $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$. Z pôsobenia dvojice $X^{I^2} + X^{II^2}$ dostávame:

$$(X^{I^2} + X^{II^2})|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>= K|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>, \tag{4.4}$$

$$K = (n_1^2 - l_1(l_1 + 1) - 1 + n_2^2 - l_2(l_2 + 1) - 1). \tag{4.5}$$

Pre tento čiastočný člen sme výnimočne nemuseli stav $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ rozpisovať, pretože operátory X^{I^2} a X^{II^2} majú tú vlastnosť, že vodíkové jednoelektrónové stavy sú ich vlastné stavy, tak ako to vyplýva z rovnice (2.84).
Ďalej by som ešte rád zdôraznil, že K je funkciou kvantových čísel, takže korektne by sme ho značili $K(n_1, n_2, l_1, l_2)$, ale to kvôli prehľadnosti robiť nebudeme, v prípade potreby dôležité parametre uvedieme ako dolné indexy. Pre nasledujúce členy už bude potrebné stav $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ rozpísať

$$X_3^I X_3^{II}|l, l_1, l_2, m>= \sum_{i=0}^{m} c_i X_3^I|l_1, l_1 - i> X_3^{II}|l_2, l_2 - m + i>, \tag{4.6}$$

$$X_3^I|l_1, l_1 - i>= \chi_{3-}|l_1 - 1, l_1 - i> + \chi_{3+}|l_1 + 1, l_1 - i>, \tag{4.7}$$

$$\chi_{3-}(n_1, l_1, i) = \alpha(l_1, l_1 - i)c_{n_1 l_1}, \tag{4.8}$$

$$\chi_{3+}(n_1, l_1, i) = \alpha(l_1 + 1, l_1 - i)c_{n_1(l_1+1)}, \tag{4.9}$$

$$X_3^{II}|l_2, l_2-m+i>= \xi_{3-}|l_2-1, l_2-m+i> + \xi_{3+}|l_2+1, l_2-m+i>, \tag{4.10}$$

$$\xi_{3-}(n_2, l_2, m, i) = \alpha(l_2, l_2 - m + i)c_{n_2 l_2}, \tag{4.11}$$

$$\xi_{3+}(n_2, l_2, m, i) = \alpha(l_2 + 1, l_2 - m + i)c_{n_2(l_2+1)}. \tag{4.12}$$

Kvôli prehľadnosti sú hlavné kvantové čísla n_1 a n_2 v stavoch nevypisované. Operátor X_i^α tieto čísla nemení a objavujú sa len v koeficientoch c_{ln}, takže to nebude spôsobovať problémy. Ešte by som poznamenal, že je potrebné rozlišovať Clebsch-Gordanove koeficienty c_i a koeficienty c_{ln}, ktoré dostávame z pôsobenia operátoru $\vec{X}$ a ktoré majú vždy dva indexy. Koeficienty $\alpha(l, m)$ sú definované rovnicou (2.155).
Celkovo teda dostávame:

$$\begin{aligned} X_3^I X_3^{II}|l, l_1, l_2, m> &= \sum_{i=0}^{m} c_i \Big[K_{33--}|l_1 - 1, l_1 - i>|l_2 - 1, l_2 - m + i> \\ &+ K_{33-+}|l_1 - 1, l_1 - i>|l_2 + 1, l_2 - m + i> \\ &+ K_{33+-}|l_1 + 1, l_1 - i>|l_2 - 1, l_2 - m + i> \\ &+ K_{33++}|l_1 + 1, l_1 - i>|l_2 + 1, l_2 - m + i> \Big] \end{aligned} \tag{4.13}$$

Tu je ešte potrebné vysvetliť význam koeficientov typu K_{33--}. Prvé dva indexy odpovedajú indexom operátorov ktoré na stav pôsobia v ich poradí a druhé dva indexy hovoria o tom, pri akom stave sa koeficient vyskytuje a ako ho spočítať. Teda koeficient $K_{ab\gamma\delta}$ sa spočíta nasledovne

$$K_{ab\gamma\delta}(n_1, n_2, l_1, l_2, m, i) = \chi_{a\gamma}(n_1, l_1, i)\xi_{b\delta}(n_2, l_2, m, i). \tag{4.14}$$

Indexy a a b nadobúdajú teda hodnoty $3, +, -$ a indexy γ a δ len $+, -$. Ďalej budeme pôsobiť operátorom $X_+^I X_-^{II}$:

$$X_+^I X_-^{II}|l, l_1, l_2, m >= \sum_{i=0}^{m} c_i X_+^I|l_1, l_1 - i > X_-^{II}|l_2, l_2 - m + i >, \tag{4.15}$$

kde

$$\begin{aligned} X_+^I|l_1, l_1 - i > &= \chi_{+-}|l_1 - 1, l_1 - i + 1 > \\ &+ \chi_{++}|l_1 + 1, l_1 - i + 1 >, \end{aligned} \tag{4.16}$$

$$\chi_{+-}(n_1, l_1, i) = \beta(l_1 - 1, l_1 - i)c_{n_1 l_1}, \tag{4.17}$$

$$\chi_{++}(n_1, l_1, i) = -\gamma(l_1 + 1, l_1 - i)c_{n_1(l_1+1)}, \tag{4.18}$$

$$\begin{aligned} X_-^{II}|l_2, l_2 - m + i > &= \xi_{--}|l_2 - 1, l_2 - m + i - 1 > \\ &+ \xi_{-+}|l_2 + 1, l_2 - m + i - 1 >, \end{aligned} \tag{4.19}$$

$$\xi_{--}(n_2, l_2, m, i) = -\beta(l_2 - 1, m - l_2 - i)c_{n_2 l_2}, \tag{4.20}$$

$$\xi_{-+}(n_2, l_2, m, i) = \gamma(l_2 + 1, m - l_2 - i)c_{n_2(l_2+1)}, \tag{4.21}$$

$$\begin{aligned} &X_+^I X_-^{II}|l, l_1, l_2, m >= \\ &= \textstyle\sum_{i=0}^{m} c_i \Big[K_{+---}|l_1 - 1, l_1 - i + 1 > |l_2 - 1, l_2 - m + i - 1 > \\ &\quad + K_{+--+}|l_1 - 1, l_1 - i + 1 > |l_2 + 1, l_2 - m + i - 1 > \\ &\quad + K_{+-+-}|l_1 + 1, l_1 - i + 1 > |l_2 - 1, l_2 - m + i - 1 > \\ &\quad + K_{+-++}|l_1 + 1, l_1 - i + 1 > |l_2 + 1, l_2 - m + i - 1 > \Big]. \end{aligned} \tag{4.22}$$

Ďalej budeme pôsobiť operátorom $X_-^I X_+^{II}$:

$$X_-^I X_+^{II}|l, l_1, l_2, m >= \sum_{i=0}^{m} c_i X_-^I|l_1, l_1 - i > X_+^{II}|l_2, l_2 - m + i >, \tag{4.23}$$

$$\begin{aligned} X_-^I|l_1, l_1 - i> &= \chi_{--}|l_1 - 1, l_1 - i - 1> \\ &+ \chi_{-+}|l_1 + 1, l_1 - i - 1>, \end{aligned} \tag{4.24}$$

$$\chi_{--}(n_1, l_1, i) = -\beta(l_1 - 1, i - l_1)c_{n_1 l_1}, \tag{4.25}$$

$$\chi_{-+}(n_1, l_1, i) = \gamma(l_1 + 1, i - l_1)c_{n_1(l_1+1)}, \tag{4.26}$$

$$\begin{aligned} X_+^{II}|l_2, l_2 - m + i> &= \xi_{+-}|l_2 - 1, l_2 - m + i + 1> \\ &+ \xi_{++}|l_2 + 1, l_2 - m + i + 1>, \end{aligned} \tag{4.27}$$

$$\xi_{+-}(n_2, l_2, m, i) = \beta(l_2 - 1, l_2 - m + i)c_{n_2 l_2}, \tag{4.28}$$

$$\xi_{++}(n_2, l_2, m, i) = -\gamma(l_2 + 1, l_2 - m + i)c_{n_2(l_2+1)}, \tag{4.29}$$

$$\begin{aligned} &X_-^I X_+^{II}|l, l_1, l_2, m >= \\ &= \textstyle\sum_{i=0}^m c_i \Big[K_{-+--}|l_1 - 1, l_1 - i - 1 > |l_2 - 1, l_2 - m + i + 1 > \\ &+K_{-+-+}|l_1 - 1, l_1 - i - 1 > |l_2 + 1, l_2 - m + i + 1 > \\ &+K_{-++-}|l_1 + 1, l_1 - i - 1 > |l_2 - 1, l_2 - m + i + 1 > \\ &+K_{-+++}|l_1 + 1, l_1 - i - 1 > |l_2 + 1, l_2 - m + i + 1 > \Big]. \end{aligned} \tag{4.30}$$

Ak to zhrnieme, tak pôsobením operátoru X^2 na vlastný stav operátoru L^2 sme dostali celkom 13 súm, z ktorých tých 12, ktoré obsahujú koeficienty typu $K_{ab\gamma\delta}$, sa už všeobecne nedá napísať ako nejaký vlastný stav operátoru L^2, pretože tieto koeficienty priamo závisia na sčítacom indexe sumy. To však predstavuje problém, pretože naším cieľom je práve zapísať pôsobenie X^2 v tvare (4.1). Naviac z komutácie operátorov X^2 a L^2 vyplýva, že to je možné. Pomôžeme si nasledovne. Všimneme si, že 12 súm je možné preindexovať tak, aby sa pod nimi vyskytoval ten istý stav. Sú to trojice súm s koeficientami $K_{33\gamma\delta}$, $K_{+-\gamma\delta}$ a $K_{-+\gamma\delta}$. Sumu s koeficientom $K_{33\gamma\delta}$ necháme, v sume s koeficientom $K_{+-\gamma\delta}$ prejdeme od i ku $i+1$ a v poslednej sume prejdem od i ku $i-1$. Napríklad pre $\gamma = -$ a $\delta = -$ touto procedúrou dostaneme pre K_{33--}:

$$\sum_{i=0}^m c_i K_{33--}(i)|l_1 - 1, l_1 - i > |l_2 - 1, l_2 - m + i >,$$

teda ze suma s koeficientom K_{33--} sa neposúva. Ďalej pre K_{+---} prejde suma

$$\sum_{i=0}^m c_i K_{+---}(i)|l_1 - 1, l_1 - i + 1 > |l_2 - 1, l_2 - m + i - 1 >$$

na sumu

$$\sum_{i=1}^{m+1} c_{i+1} K_{+---}(i+1)|l_1-1, l_1-i> |l_2-1, l_2-m+i> .$$

Nakoniec suma

$$\sum_{i=0}^{m} c_i K_{-+--}(i)|l_1-1, l_1-i-1> |l_2-1, l_2-m+i+1>$$

prejde na sumu

$$\sum_{i=-1}^{m-1} c_{i-1} K_{-+--}(i-1)|l_1-1, l_1-i> |l_2-1, l_2-m+i> .$$

Teraz môžeme všetky 3 sumy vyššie zlúčiť pod jednu, ktorá bude prebiehať indexmi od $i=-1$ po $i=m+1$, kde samozrejme budeme uvažovať len tie stavy $|n, l, m>$, ktoré spĺňajú podmienku $|m| \leq l$. To už ale závisí na druhej dvojici indexov koeficientov $K_{ab\gamma\delta}$, pretože tie určujú posun parametrov l_1 a l_2 v stavoch. Takto by sme zistili, že skutočné medze pre prípad druhej dvojice indexov $-,-$ sú $i=1$ dole a $i=m-1$ hore. Pre vyššie uvedený prípad bude pod zlúčenou sumou stav $|l_1-1, l_1-i>$ $|l_2-1, l_2-m+i>$. Tento stav bude násobený výrazom

$$L_{--}(i) \equiv 2c_i K_{33--}(i) + c_{i+1} K_{+---}(i+1) + c_{i-1} K_{-+--}(i-1)$$

Rovnakým postupom by sme získali aj koeficienty $L_{-+}(i)$, $L_{+-}(i)$ a $L_{++}(i)$. Faktor 2 pri koeficiente c_i odpovedá tomu, že pred operátorom $X_3^I X_3^{II}$ je taktiež faktor 2. Zatiaľ teda máme

$$\begin{aligned}
X^2|l, l1, l2, l> = K|l, l1, l2, m> - \\
- \sum_{i=1}^{m-1} L_{--}(i)|l_1-1, l_1-i> |l_2-1, l_2-m+i> - \\
- \sum_{i=1}^{m+1} L_{-+}(i)|l_1-1, l_1-i> |l_2+1, l_2-m+i> - \\
- \sum_{i=-1}^{m-1} L_{+-}(i)|l_1+1, l_1-i> |l_2-1, l_2-m+i> - \\
- \sum_{i=-1}^{m+1} L_{++}(i)|l_1+1, l_1-i> |l_2+1, l_2-m+i>
\end{aligned} \tag{4.31}$$

To však ešte stále nie je požadovaný tvar, pretože koeficienty $L_{\gamma\delta}$ sú závislé na sumovacom indexe. Ale keďže výsledkom pôsobenia operátoru

X^2 má byť lineárna kombinácia vlastných stavov L^2 musí byť možné sa tejto závisloti zbaviť nasledovne

$$L_{--}(i) = -c_{i-1}Q_{--}, \tag{4.32}$$

$$L_{-+}(i) = -c_{i-1}Q_{-+}, \tag{4.33}$$

$$L_{+-}(i) = -c_{i+1}Q_{+-}, \tag{4.34}$$

$$L_{++}(i) = -c_{i+1}Q_{++}, \tag{4.35}$$

kde už $Q_{\alpha\beta}$ sú koeficienty nezávislé na indexe i a znamienka $-$ (v rovniciach vyššie) majú len kozmetický význam. Konečne

$$\begin{aligned} X^2|l, l_1, l_2, l> &= K|l, l_1, l_2, m> + Q_{--}|l, l_1 - 1, l_2 - 1, m> + \\ &+ Q_{-+}|l, l_1 - 1, l_2 + 1, m> + Q_{+-}|l, l_1 + 1, l_2 - 1, m> + \\ &+ Q_{++}|l, l_1 + 1, l_2 + 1, m>, \end{aligned} \tag{4.36}$$

kde koeficienty $Q_{\alpha\beta}$ sú definované rovnicami (4.32), (4.33), (4.34) a (4.35).

4.2 Pôsobenie operátoru $(X.L)^2$

V tejto sekcii zistíme pôsobenie operátoru $(X.L)^2$ na vlastné stavy operátoru L^2. Tým umožníme hľadanie vlastných stavov operátoru $(X.L)^2$. Na to, aby sme mohli očakávať výsledok v tvare lineárnej kombinácie vlastných stavov operátoru L^2, musíme najprv ukázať, že platí $[(X.L)^2, L^2] = 0$. Ak platí, že ľubovoľné dva operátory A,B splňujú $[A, B] = 0$, potom

$$[A^2, B] = AAB - BAA = ABA + A[A, B] - ABA - [B, A]A,$$

$$[A^2, B] = A[A, B] - [B, A]A = 0.$$

Teda vďaka rovnici (3.65) nutne platí $[(X.L)^2, L^2] = 0$.
V tomto momente sme už oprávnený očakávať, že ak zapôsobíme operátorom $(X.L)^2$ na vlastné stavy operátoru L^2, dostaneme lineárnu kombináciu týchto stavov.
Výpočet pôsobenia operátoru $(X.L)^2$ bude prebiehať obdobne, ako prebiehal výpočet pre operátor X^2. Najprv zapôsobíme operátorom $(X.L)$ na stav
$|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ a potom na výsledok zapôsobíme tým istým operátorom ešte raz.
Teraz sa pozrieme ako vyzerá operátor $(X.L)$ v rozpísanom tvare.

$$\vec{X}.\vec{L} = (\vec{X}^I - \vec{X}^{II}).(\vec{L}^I + \vec{L}^{II}) = \vec{X}^I.\vec{L}^I + \vec{X}^I.\vec{L}^{II} - \vec{X}^{II}.\vec{L}^I - \vec{X}^{II}.\vec{L}^{II}. \tag{4.37}$$

Na tomto mieste je dôležité, že platia rovnice (3.12) a (3.6), pretože potom môžeme rovnicu (4.37) upraviť nasledovne:

$$\vec{X}.\vec{L} = \vec{X}^I.\vec{L}^{II} - \vec{X}^{II}.\vec{L}^I. \tag{4.38}$$

A po rozpísaní do zložiek:

$$2\vec{X}.\vec{L} = 2X_3^I L_3^{II} + X_+^I L_-^{II} + X_-^I L_+^{II} - 2X_3^{II} L_3^I - X_+^{II} L_-^I - X_-^{II} L_+^I. \tag{4.39}$$

Teraz už začneme počítať pôsobenie jednotlivých operátorov na stav $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$. Opäť budem kvôli prehľadnosti vynechávať kvantové čísla n_1 a n_2.

$$X_3^I L_3^{II} |l, l_1, l_2, m >= \sum_{i=0}^{m} c_i X_3^I |l_1, l_1 - i > L_3^{II} |l_2, l_2 - m + i >, \tag{4.40}$$

$$X_3^I |l_1, l_1 - i >= \chi_{3-} |l_1 - 1, l_1 - i > + \chi_{3+} |l_1 + 1, l_1 - i > . \tag{4.41}$$

Kde χ_{3-} a χ_{3+} sú funkcie definované rovnicami (4.9) a (4.8).

$$L_3^{II} |l_2, l_2 - m + i >= \lambda_3 |l_2, l_2 - m + i > . \tag{4.42}$$

Funkcia λ_3 je definovaná rovnicou (2.31). Teraz naviac definujeme nové funkcie $P_{ab\gamma}$ tak, aby platilo:

$$P_{ab\gamma}(n_1, l_1, l_2, m, i) = \chi_{a\gamma}(n_1, l_1, i) \lambda_b(l_2, m, i). \tag{4.43}$$

Potom:

$$X_3^I L_3^{II} |l, l_1, l_2, m >= \sum_{i=0}^{m} c_i \Big[P_{33-} |l_1 - 1, l_1 - i > |l_2, l_2 - m + i > + \\ + P_{33+} |l_1 + 1, l_1 - i > |l_2, l_2 - m + i > \Big] \tag{4.44}$$

Ďalej:

$$X_+^I L_-^{II} |l, l_1, l_2, m >= \sum_{i=0}^{m} c_i X_+^I |l_1, l_1 - i > L_-^{II} |l_2, l_2 - m + i >, \tag{4.45}$$

$$X_+^I |l_1, l_1 - i >= \chi_{+-} |l_1 - 1, l_1 - i + 1 > + \chi_{++} |l_1 + 1, l_1 - i + 1 >, \tag{4.46}$$

$$L_-^{II} |l_2, l_2 - m + i >= \lambda_- |l_2, l_2 - m + i - 1 >, \tag{4.47}$$

kde funkcie χ_{+-} a χ_{++} sú definované rovnicami (4.17) a (4.18) a λ_- zase vzťahom (2.32).

$$X^I_+ L^{II}_-|l,l_1,l_2,m>=\sum_{i=0}^{m} c_i\Big[P_{+--}|l_1-1,l_1-i+1>|l_2,l_2-m+i-1>$$
$$+P_{+-+}|l_1+1,l_1-i+1>|l_2,l_2-m+i-1>\Big], \qquad (4.48)$$

$$X^I_- L^{II}_+|l,l_1,l_2,m>=\sum_{i=0}^{m} c_i X^I_-|l_1,l_1-i>L^{II}_+|l_2,l_2-m+i>, \qquad (4.49)$$

$$X^I_-|l_1,l_1-i>=\chi_{--}|l_1-1,l_1-i-1>+\chi_{-+}|l_1+1,l_1-i-1>, \qquad (4.50)$$

$$L^{II}_+|l_2,l_2-m+i>=\lambda_+|l_2,l_2-m+i+1>, \qquad (4.51)$$

kde funkcie χ_{--} a χ_{-+} sú definované rovnicami (4.25) a (4.26) a λ_+ zase vzťahom (2.32).

$$X^I_- L^{II}_+|l,l_1,l_2,m>=\sum_{i=0}^{m} c_i\Big[P_{-+-}|l_1-1,l_1-i-1>|l_2,l_2-m+i+1>+$$
$$+P_{-++}|l_1+1,l_1-i-1>|l_2,l_2-m+i+1>\Big]. \qquad (4.52)$$

Podobne, ako to bolo pri pôsobení operátoru X^2, aj v tomto prípade je možné po vhodnom posunutí súm v ich sčítacích indexoch viaceré stavy dať pod jednu sumu. Jedná sa o stavy s koeficientmi $P_{33\gamma}$, $P_{+-\gamma}$ a $P_{-+\gamma}$. Pri stave s koeficientom $P_{33\gamma}$ index necháme, pri stave s koeficientom $P_{+-\gamma}$ zmeníme index i na $i+1$ a v poslednom prípade prejdeme od i k $i-1$. Ešte prejdeme ku novým koeficientom:

$$U_-(n_1,l_1,l_2,m,i)=2c_iP_{33-}(i)+c_{i+1}P_{+--}(i+1)+c_{i-1}P_{-+-}(i-1), \qquad (4.53)$$

$$U_+(n_1,l_1,l_2,m,i)=2c_iP_{33+}(i)+c_{i+1}P_{+-+}(i+1)+c_{i-1}P_{-++}(i-1). \qquad (4.54)$$

Potom:

$$\vec{X}^I.\vec{L}^{II}|l,l_1,l_2,m>=\sum_{i=-1}^{m+1}\Big[U_-|l_1-1,l_1-i>|l_2,l_2-m+i>+$$
$$+U_+|l_1+1,l_1-i>|l_2,l_2-m+i>\Big]. \qquad (4.55)$$

Podobne by sme mohli pre operátor $\vec{L}^I.\vec{X}^{II}$ definovať koeficienty $Z_{ab\gamma}$:

$$Z_{ab\gamma}(n_2,l_1,l_2,m,i)=\lambda_a(l_1,i)\xi_{b\gamma}(n_2,l_2,m,i), \qquad (4.56)$$

kde funkcie λ_3 a $\lambda_\pm$ sa určené rovnicami (2.31) a (2.32) a funkcie ξ_{3+}, ξ_{3-}, ξ_{++}, ξ_{+-}, ξ_{-+} a ξ_{--}, rovnicami (4.12), (4.11), (4.29), (4.28), (4.21) a (4.20). Potom samozrejme

$$L_3^I X_3^{II}|l,l_1,l_2,m>=\sum_{i=0}^{m}\Big[Z_{33+}|l_1,l_1-i>|l_2+1,l_2-m+i>+ \\ +Z_{33-}|l_1,l_1-i>|l_2-1,l_2-m+i>\Big], \quad (4.57)$$

$$L_+^I X_-^{II}|l,l_1,l_2,m>=\sum_{i=0}^{m}\Big[Z_{+-+}|l_1,l_1-i+1>|l_2+1,l_2-m+i-1>+ \\ +Z_{+--}|l_1,l_1-i+1>|l_2-1,l_2-m+i-1>\Big], \quad (4.58)$$

$$L_-^I X_+^{II}|l,l_1,l_2,m>=\sum_{i=0}^{m}\Big[Z_{-++}|l_1,l_1-i-1>|l_2+1,l_2-m+i+1>+ \\ +Z_{-+-}|l_1,l_1-i-1>|l_2-1,l_2-m+i+1>\Big]. \quad (4.59)$$

V tejto situácii zase preindexujeme vhodne sumy, a definujeme nové koeficienty:

$$-W_-(n_2,l_1,l_2,m,i)=2c_iZ_{33-}(i)+c_{i+1}Z_{+--}(i+1)+c_{i-1}Z_{-+-}(i-1), \quad (4.60)$$

$$-W_+(n_2,l_1,l_2,m,i)=2c_iZ_{33+}(i)+c_{i+1}Z_{+-+}(i+1)+c_{i-1}Z_{-++}(i-1). \quad (4.61)$$

Potom:

$$-\vec{L}^I.\vec{X}^{II}|l,l_1,l_2,m>=\sum_{i=-1}^{m+1}\Big[W_-|l_1,l_1-i>|l_2-1,l_2-m+i>+ \\ +W_+|l_1,l_1-i>|l_2+1,l_2-m+i>\Big] \quad (4.62)$$

Teda celkom máme:

$$L.X|l,l_1,l_2,m>=(\vec{X}^I.\vec{L}^{II}-\vec{L}^I.\vec{X}^{II})|l,l_1,l_2,m>= \\ =\sum_{i=-1}^{m+1}\Big[W_-|l_1,l_1-i>|l_2-1,l_2-m+i>+ \\ +W_+|l_1,l_1-i>|l_2+1,l_2-m+i>+ \\ +U_-|l_1-1,l_1-i>|l_2,l_2-m+i>+ \\ +U_+|l_1+1,l_1-i>|l_2,l_2-m+i>\Big]. \quad (4.63)$$

Teraz opäť využijeme to, že $[L.X, L^2] = 0$, teda výsledkom pôsobenia operátoru $L.X$ na vlastné stavy operátoru L^2 musí byť lineárna kombinácia vlastných stavov operátoru L^2. A kedže všetky stavy z rovnice (4.63) sú lineárne nezávislé (pre konkrétnu voľbu $|l, l_1, l_2, m>$), potom je možné definovať funkcie $A_\pm$ a $B_\pm$ nasledovne:

$$U_\pm(i) = c_{i\pm 1} A_\pm \qquad A_\pm \neq A_\pm(i), \tag{4.64}$$

$$W_\pm(i) = c_i B_\pm \qquad B_\pm \neq B_\pm(i). \tag{4.65}$$

A využitím toho potom:

$$\begin{aligned} L.X|l, l_1, l_2, m >= A_-|l, l_1 - 1, l_2, m > +A_+|l, l_1 + 1, l_2, m > + \\ +B_-|l, l_1, l_2 - 1, m > +B_+|l, l_1, l_2 + 1, m > . \end{aligned} \tag{4.66}$$

Tu sme ale neskončili, pretože nás zaujíma pôsobenie operátoru $(L.X)^2$. Našťastie z rovnice (4.66) to zistíme jednoducho tak, že na pravú stranu rovnice zapôsobíme operátorom $(L.X)$ ešte raz:

$$\begin{aligned} (L.X)^2|l, l_1, l_2, m >= A_- L.X|l, l_1 - 1, l_2, m > +A_+ L.X|l, l_1 + 1, l_2, m > \\ +B_- L.X|l, l_1, l_2 - 1, m > +B_+ L.X|l, l_1, l_2 + 1, m >, \end{aligned} \tag{4.67}$$

$$\begin{aligned} (L.X)^2|l, l_1, l_2, m >= A_- A_-|l, l_1 - 2, l_2, m > +A_- A_+|l, l_1, l_2, m > \\ +A_- B_-|l, l_1 - 1, l_2 - 1, m > +A_- B_+|l, l_1 - 1, l_2 + 1, m > \\ +A_+ A_-|l, l_1, l_2, m > +A_+ A_+|l, l_1 + 2, l_2, m > \\ +A_+ B_-|l, l_1 + 1, l_2 - 1, m > +A_+ B_+|l, l_1 + 1, l_2 + 1, m > \\ +B_- A_-|l, l_1 - 1, l_2 - 1, m > +B_- A_+|l, l_1 + 1, l_2 - 1, m > \\ +B_- B_-|l, l_1, l_2 - 2, m > +B_- B_+|l, l_1, l_2, m > \\ +B_+ A_-|l, l_1 - 1, l_2 + 1, m > +B_+ A_+|l, l_1 + 1, l_2 + 1, m > \\ +B_+ B_-|l, l_1, l_2, m > +B_+ B_+|l, l_1, l_2 + 2, m > \end{aligned} \tag{4.68}$$

Teraz už len zhrnieme rovnaké stavy dokopy a prejdeme k novým koeficientom.

$$\begin{aligned} (L.X)^2|l, l_1, l_2, m >= E_0|l, l_1, l_2, m > + \\ E_1|l, l_1 - 2, l_2, m > +E_2|l, l_1 + 2, l_2, m > + \\ +E_3|l, l_1, l_2 - 2, m > +E_4|l, l_1, l_2 + 2, m > + \\ +E_5|l, l_1 - 1, l_2 - 1, m > +E_6|l, l_1 - 1, l_2 + 1, m > + \\ +E_7|l, l_1 + 1, l_2 - 1, m > +E_8|l, l_1 + 1, l_2 + 1, m > . \end{aligned} \tag{4.69}$$

Pre koficienty E_i platí:

$$E_0 = A_-A_+ + A_+A_- + B_-B_+ + B_+B_-, \tag{4.70}$$

$$E_1 = A_-A_-, \tag{4.71}$$

$$E_2 = A_+A_+ \tag{4.72}$$

$$E_3 = B_-B_-, \tag{4.73}$$

$$E_4 = B_+B_+, \tag{4.74}$$

$$E_5 = A_-B_- + B_-A_-, \tag{4.75}$$

$$E_6 = A_-B_+ + B_+A_-, \tag{4.76}$$

$$E_7 = A_+B_- + B_+A_-, \tag{4.77}$$

$$E_8 = A_+B_+ + B_+A_+. \tag{4.78}$$

Samozrejme funkcie E_i závisia na rovnakých parametroch ako koeficienty $A_\pm$ s $B_\pm$ ktoré obsahujú.

4.3 Riešenie sústavy a výpočet koeficientov

To, ako pôsobia operátory X^2 a $(X.L)^2$ na stavy $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ už vieme. Teraz si tieto stavy potrebujeme vhodne nakombinovať, aby sme získlali stavy $|\mathcal{L}>$, pre ktoré platí:

$$\begin{aligned} X^2|\mathcal{L}> &= \kappa|\mathcal{L}>, \\ (X.L)^2|\mathcal{L}> &= \Lambda|\mathcal{L}>, \\ |\mathcal{L}> &= \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m> . \end{aligned} \tag{4.79}$$

Cieľom tejto podkapitoly teda bude nájsť koeficienty $k_{l_1l_2}$. Najprv sa budeme zaoberať týmto problémom pre operátor X^2, potom pre $(X.L)^2$. Postupovať budeme tak, že do rovnice (4.1) dosadíme sa stav $|\mathcal{L}>$ jeho rozvoj (4.2) a pomocou rovnice (4.36) zapôsobíme operátorom X^2 na jednotlivé stavy.

$$X^2 \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m> = \kappa \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>, \tag{4.80}$$

$$X^2 \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}|l,l_1,l_2,m>= \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}\Big[K(l_1,l_2)|l,l1,l2,m>$$
$$+Q_{--}(l_1,l_2)|l,l_1-1,l_2-1,m> +Q_{-+}(l_1,l_2)|l,l_1-1,l_2+1,m>$$
$$+Q_{+-}(l_1,l_2)|l,l_1+1,l_2-1,m> +Q_{++}(l_1,l_2)|l,l_1+1,l_2+1,m>\Big] \quad (4.81)$$

$$\begin{aligned} X^2 \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}|l,l_1,l_2,m>= &\sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}K(l_1,l_2)|l,l1,l2,m> \\ &+ \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}Q_{--}(l_1,l_2)|l,l_1-1,l_2-1,m> \\ &+ \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}Q_{-+}(l_1,l_2)|l,l_1-1,l_2+1,m> \\ &+ \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}Q_{+-}(l_1,l_2)|l,l_1+1,l_2-1,m> \\ &+ \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}Q_{++}(l_1,l_2)|l,l_1+1,l_2+1,m>\,. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Teraz posunieme sumovacie indexy tak, aby sme pod sumami dostali rovnaké stavy.

$$\begin{aligned} X^2 \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}|l,l_1,l_2,m>= &\sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}K(l_1,l_2)|l,l1,l2,m> \\ &+ \sum_{l_1,l_2=1} k_{(l_1+1)(l_2+1)}Q_{--}(l_1+1,l_2+1)|l,l_1,l_2,m> \\ &+ \sum_{(l_1=1),(l_2=-1)} k_{(l_1+1)(l_2-1)}Q_{-+}(l_1+1,l_2-1)|l,l_1,l_2,m> \\ &+ \sum_{(l_1=-1),(l_2=1)} k_{(l_1-1)(l_2+1)}Q_{+-}(l_1-1,l_2+1)|l,l_1,l_2,m> \\ &+ \sum_{l_1,l_2=-1} k_{(l_1-1)(l_2-1)}Q_{++}(l_1-1,l_2-1)|l,l_1,l_2,m>\,. \end{aligned} \quad (4.83)$$

Pričom je potrebné spomenúť, že v sumách sa sčíta aj cez nefyzikálne stavy, napríklad $l_2 = -1$. To je potrebné chápať tak, že koeficienty k_{ij} sú nulové ak $i < 0$, $i \geq n_1$, $j < 0$ a $j \geq n_2$.

$$\begin{aligned} X^2 \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}|l,l_1,l_2,m>= &\sum_{l_1,l_2=-1} \Big[k_{l_1l_2}K(l_1,l_2) \\ &+k_{(l_1+1)(l_2+1)}Q_{--}(l_1+1,l_2+1) \\ &+k_{(l_1+1)(l_2-1)}Q_{-+}(l_1+1,l_2-1) \\ &+k_{(l_1-1)(l_2+1)}Q_{+-}(l_1-1,l_2+1) \\ &+k_{(l_1-1)(l_2-1)}Q_{++}(l_1-1,l_2-1)\Big]|l,l_1,l_2,m>\,. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Pričom požadujeme:

$$\sum_{l_1,l_2=0} \kappa k_{l_1 l_2}|l,l_1,l_2,m>= \sum_{l_1,l_2=-1} \Big[k_{l_1 l_2}K(l_1,l_2)$$
$$+k_{(l_1+1)(l_2+1)}Q_{--}(l_1+1,l_2+1)$$
$$+k_{(l_1+1)(l_2-1)}Q_{-+}(l_1+1,l_2-1)$$
$$+k_{(l_1-1)(l_2+1)}Q_{+-}(l_1-1,l_2+1)$$
$$+k_{(l_1-1)(l_2-1)}Q_{++}(l_1-1,l_2-1)\Big]|l,l_1,l_2,m> . \tag{4.85}$$

Keď si uvedomíme, že stavy $|l,l_1,l_2,m>$ sú lineárne nezávislé, môžeme napísať:

$$[\kappa - K(l_1,l_2)]k_{l_1 l_2} = k_{(l_1+1)(l_2+1)}Q_{--}(l_1+1,l_2+1)$$
$$+k_{(l_1+1)(l_2-1)}Q_{-+}(l_1+1,l_2-1)$$
$$+k_{(l_1-1)(l_2+1)}Q_{+-}(l_1-1,l_2+1)$$
$$+k_{(l_1-1)(l_2-1)}Q_{++}(l_1-1,l_2-1). \tag{4.86}$$

Rovnica (4.86) spolu s normovacou podmienkou

$$\sum_{l_1,l_2=0} k^2_{l_1 l_2} = 1 \tag{4.87}$$

nám tvorí systém rovníc pre koeficienty $k_{l_1 l_2}$.
Na tomto mieste je potrebné odbočiť a povedať niečo o stavoch $|\mathcal{L}>$. Stavy $|\mathcal{L}>$ odpovedajú stavom značeným $|n_1,n_2,K,T,l,m>$ z kapitoly 3, kde K a T spĺňajú rovnice

$$\kappa = (n_1+K)^2 + T^2 - 1 - l(l+1),$$

$$\lambda = (n_1+K)^2 T^2,$$

kde κ a λ sú vlastné čísla operátorov X^2 a $(X.L)^2$.
Ako vidíme, vlastné čísla κ a λ závisia na číslach K a T kvadraticky, teda môže nastať prípad, keď pre rôzne dvojice $\{K,T\}$ dostaneme rovnaké vlastné číslo κ. To spôsobuje, že systém rovníc (4.86) s normalizačnou podmienkou nebude musieť byť jednoznačne riešiteľný, pretože niektoré rovnice v systéme (4.86) sa budú môcť opakovať. V tom prípade je potrebné dodať ďalšie rovnice pre koeficienty $k_{l_1 l_2}$. Tie získame samozrejme z rovnice (4.79) tak, že dosadíme za stav $|\mathcal{L}>$ a využijeme rovnicu (4.69).

$$(X.L)^2 \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1 l_2}|l,l_1,l_2,m>= \lambda \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1 l_2}|l,l_1,l_2,m>, \tag{4.88}$$

$$
\begin{aligned}
(X.L)^2 \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}|l,l_1,l_2,m> = & \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_0(l_1,l_2)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_1(l_1,l_2)|l,l_1-2,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_2(l_1,l_2)|l,l_1+2,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_3(l_1,l_2)|l,l_1,l_2-2,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_4(l_1,l_2)|l,l_1,l_2+2,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_5(l_1,l_2)|l,l_1-1,l_2-1,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_6(l_1,l_2)|l,l_1-1,l_2+1,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_7(l_1,l_2)|l,l_1+1,l_2-1,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_8(l_1,l_2)|l,l_1+1,l_2+1,m>, \quad (4.89)
\end{aligned}
$$

Opäť vhodne preindexujeme sumy:

$$
\begin{aligned}
\sum_{l_1,l_2=0} \lambda k_{l_1l_2}|l,l_1,l_2,m> = & \sum_{l_1,l_2=0} k_{l_1l_2}E_0(l_1,l_2)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1=2,l_2=0} k_{(l_1+2)l_2}E_1(l_1+2,l_2)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1=-2,l_2=0} k_{(l_1-2)l_2}E_2(l_1-2,l_2)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1=0,l_2=2} k_{l_1(l_2+2)}E_3(l_1,l_2+2)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1=0,l_2=-2} k_{l_1(l_2-2)}E_4(l_1,l_2-2)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=1} k_{(l_1+1)(l_2+1)}E_5(l_1+1,l_2+1)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1=1,l_2=-1} k_{(l_1+1)(l_2-1)}E_6(l_1+1,l_2-1)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1=-1,l_2=1} k_{(l_1-1)(l_2+1)}E_7(l_1-1,l_2+1)|l,l_1,l_2,m> \\
& + \sum_{l_1,l_2=-1} k_{(l_1-1)(l_2-1)}E_8(l_1-1,l_2-1)|l,l_1,l_2,m>. \quad (4.90)
\end{aligned}
$$

Vďaka nezávislosti stavov $|l,l_1,l_2,m>$ potom:

$$
\lambda k_{l_1l_2} - k_{l_1l_2}E_0(l_1,l_2) = k_{(l_1+2)l_2}E_1(l_1+2,l_2) + k_{(l_1-2)l_2}E_2(l_1-2,l_2)
$$

$$+k_{l_1(l_2+2)}E_3(l_1,l_2+2)+k_{l_1(l_2-2)}E_4(l_1,l_2-2)$$
$$+k_{(l_1+1)(l_2+1)}E_5(l_1+1,l_2+1)+k_{(l_1+1)(l_2-1)}E_6(l_1+1,l_2-1)$$
$$+k_{(l_1-1)(l_2+1)}E_7(l_1-1,l_2+1)+k_{(l_1-1)(l_2-1)}E_8(l_1-1,l_2-1) \quad (4.91)$$

V tomto momente sme hotoví, pretože systém (4.86) a systém (4.91) spolu s normalizačnou podmienkou (4.87) už jednoznačne určujú koficinety $k_{l_1 l_2}$ a teda aj vlastný stav $|\mathcal{L}>$ operátorov X^2 a $(X.L)^2$.
Sústavy rovníc (4.86), (4.91) a naprogramovanie ich riešenia tvorí hlavný výsledok tejto práce.

4.4 Program a jeho časová zložitosť

Ako sme videli v doterajšom postupe, stav $|\mathcal{L}>$ nemáme analyticky vyjadrený, pretože koeficienty $k_{l_1 l_2}$ v jeho rozvoji sú riešeniami systému rovníc, ktoré nemáme analyticky spočítané. Na ich výpočet som naprogramoval program, ktorý je ku práci pridaný ako príloha.
Program v podstate kopíruje postup z predošlých kapitol. Začína procedúrou na počítanie Clebsch-Gordanových koeficientov. Nasledujú funkcie na počítanie všetkých definovaných koeficientov až po výsledne koeficienty $K, Q_{\gamma\delta}, E_i$. Do tohto okamžiku je program v podstate priamočiary, akurát pri jeho vytváraní bolo potrebné venovať zvýšenú pozornosť posúvaniu indexov súm ktoré vedú k definovaniu koeficientov $L_{\gamma\delta}, W_\pm, U_\pm$. Ďalším technickým problémom bolo zostavenie matíc, ktoré odpovedajú systémom rovníc (4.86) a (4.91). Podobne, ako v procedúre pre Clebsch-Gordanové koeficienty, normalizačná podmienka je zahrnutá do systému rovníc tak, že sa jedna z premmených nastaví na jednotku a všetky premmenné sa na konci výpočtu podelia normalizačným faktorom. Ďalším problémom bolo usporiadanie rovníc do matice, pretože pri neznámych $k_{l_1 l_2}$ máme dva indexy. Teda bolo potrebné urobiť pomocné procedúry, ktoré vzájomne jednoznačne priraďujú dvojici indexov l_1 a l_2 jeden index. V programe som sa snažil vystačiť si len so systémom rovníc (4.86), pretože obsahuje menej dát. To však nebolo vždy možné, pretože ako už bolo spomenuté v predošej podkapitole, systém rovníc (4.86) nemusí byť jednoznačne riešiteľný kvôli možnej degenerácii. Teda posledným problémom bolo zariadiť, aby sústava obsahovala len lineárne nezávislé riadky. To som urobil tak, že ak pomocná procedúra zistila že pri danej voľbe vlastných čísel je systém rovníc (4.86) degenerovaný, pridala sa dodatočná rovnica zo systému (4.91). Konkrétne ak sme za jednotkový položili koeficient $k_{L_1 L_2}$, potom sa zo systému (4.86) odstránila rovnica s indexom odpovedajúcim dvojici indexov $l_1 = L_2$ a $l_2 = L_1$ a nahradila sa rovnicou s rovnakým

indexom zo systému (4.91). Teda ak napríklad $k_{03} = 1$ a dvojici indexov 3 a 0 odpovedá index (napríklad) 4, potom 4. riadok v matici odpovedajúci rovnici v systéme (4.86) pre $l_1 = 3$ a $l_2 = 0$ nahradíme rovnicou zo systému (4.91) pre $l_1 = 3$ a $l_2 = 0$. Robíme to týmto spôsobom, pretože v degenerovanom prípade sú koeficienty $k_{l_1 l_2}$ symetrické alebo antisymetrické v l_1 a l_2. Preto ak položíme koeficient $k_{L_1 L_2}$ rovný jednotke, tak rovnicu pre $l_1 = L_2$ a $l_2 = L_1$ zo systému (4.86) nepotrebujeme. A ak vezmeme rovnicu s týmito indexmi zo systému (4.91), bude so všetkými ostatnými rovnicami linárne nezávislá. Výslednú sústavu riešim Gaussovou elimináciou.
Časová zložitosť porgramu je rádu $O(n^3)$, kde $n = n_1 + n_2$. Časovo najnáročnejšia procedúra je zadanie hodnôt do matice sústavy (rádu $O(n^3)$). Ak si označím zložitosť funkcie na výpočet Clebsch-Gordanových koeficientov $O(CG)$ (v mojom programe $O(CG) = O(n)$), potom sa zložitosť programu dá napísať v tvare $O(n^2).O(CG)$.

4.5 Porovnanie metód

Obidve metódy počítania vlastných stavov operátorov X^2 a $(X.L)^2$ nám dávujú stavy $|n_1, n_2, K, T, l, m >$ s rovnakými vlastnými číslami κ a λ, kde κ a λ sú určené rovnicami (3.121) a (3.122).
Metóda 9J koeficientov je elegantnejšia, pretože 9J koeficienty v podstate priamo určujú prechod z báze stavov $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m >$ do báze stavov $|n_1, n_2, K, T, l, m >$, je len potrebné si poriadne rozmyslieť, aký význam majú parametre v 9J symbole. Avšak výpočet 9J symbolu je pomerne náročný. Buď je potrebné na jeho výpočet použiť formulku (3.38), v ktorej sa sumuje cez 9 paramterov, alebo analytický vzťah. Ten je exaktný, avšak vysupujú v ňom faktoriály, teda pre praktické výpočty je neužitočný, a preto nie je v texte uvedený, záujemca ho však môže nájsť v [11].
Algebraická metóda je síce pracnejšia a zdĺhavejšia, ale na výpočet potrebných koeficientov je potrebné len zostaviť maticu a tú potom diagonalizovať, kde zostavenie matice je po znalosti Clebsch-Gordanových koeficientov priamočiare.
V jednotlivých podkapitolách o programoch som už spomínal časovú zložitosť programov pre obidve metódy. Pre algebraickú metódu to bolo $O(n^2).O(CG)$ a pre metódu 9J koeficientov $O(n^9).O(CG)$, kde $n = n_1 + n_2$ a $O(CG)$ je časová zložitosť funkcie na výpočet Clebsch-Gordanových koeficientov. Teda rozdiel rýchlosti výpočtu je 7 rádov (v limite $n \to \infty$), čo predstavuje obrovské rozdiely, pretože hodnota napríklad $n = 10$ je

ešte relatívne nízka a program počítajúci 9J koeficienty už beží pozorovateľne dlhšie.

Kapitola 5

Možnosti využitia približných symetrií

V tejto časti práce ukážem, ako je možné stavy pripravené v Kapitolách 3 a 4 použiť. Najpr pre stavy v bázi $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ zostavím tabuľku vlastných stavov operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$, kde konkrétne budeme hľadať vlastné stavy v podpriesotre $n_1 = n_2 \equiv N = 4, 7, 10$ a $l = 1$. Tieto stavy budú spočítané metódou uvedenou v článku [7]. Ku každej z troch tabuliek bude prislúchať tabuľka obsahujúca koeficienty prechodu z báze $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ do báze $|n_1, n_2, K, T, l, m>$ (samozrejme pre príslušné N), pričom pre $N > 4$ budú kvôli prehľadnosti tabuľky uvedené samostatne, zatiaľ čo pre $N = 4$ si vystačíme s jednou tabuľkou pre obidve sady čísel. Ďalej uvediem pre príslušné N tabuľku obsahujúcu kvadráty koeficientov prechodu medzi bázou vlastných stavov operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ a bázou $|n_1, n_2, K, T, l, m>$. Označme si koeficienty vlastných stavov operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ nasledovne

$$\frac{1}{|r^I - r^{II}|}|stav> = \epsilon|stav>, \tag{5.1}$$

$$|stav> = \sum_{l_1, l_2} c_{(l_1, l_2)}|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m> . \tag{5.2}$$

A označme koeficienty prechodu medzi bázou $|n_1, n_2, K, T, l, m>$ a bázou $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ nasledovne

$$|n_1, n_2, K, T, l, m> = \sum_{l_1, l_2} k_{(l_1, l_2)}|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m> . \tag{5.3}$$

Pre $n_1 = n_2 = 4$ a $l = 1$ dostávame tabuľku (5.1). Kvadráty koeficientov vlastných stavov operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ vyjadrené v bázi stavov

$|n_1, n_2, K, T, l, m >$ sú v tabuľke (5.2). Obe tabuľky sú uvedené v článku [1], ďalšie tabuľky však nie.
Podobne skonštruujeme aj tabuľky (5.3) a (5.4) pre $n_1 = n_2 = 7$ a $l = 1$. Tentokrát si opäť vyjadríme koeficienty vlastných stavov operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ v bázi stavov $|n_1, n_2, K, T, l, m >$ a do tabuľky (5.5) vypíšeme ich druhé mocniny.
Celý postup zopakujeme pre $n_1 = n_2 = 10$ a $l = 1$, pričom výsledky sú v tabuľkách (5.6), (5.7) a (5.8).
Ako vidíme v tabuľkách (5.2), (5.5) a (5.8), vlastné stavy operátorov X^2 a $(X.L)^2$ sú takmer vlastnými stavmi operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$. Ďalej vidíme, že nediagonálne príspevky rapídne klesajú so vzdialenosťou od diagonály a naviac sú takmer symetrické. To znamená , že očakávame, že operátor $\vec{r}^I - \vec{r}^{II}$ bude možné napísať v tvare:

$$\vec{r}^I - \vec{r}^{II} = \vec{X}^I - \vec{X}^{II} + [r^I p_r^I + r^{II} p_r^{II}, \vec{X}^I - \vec{X}^{II}],$$

kde komutátor $[r^I p_r^I + r^{II} p_r^{II}, \vec{X}^I - \vec{X}^{II}]$ bude mať malý vplyv a bude možné ho považovat za opravu.

Tabulka 5.1: Vlastné stavy operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ pre N=4,l=1

ϵ	$c_{(0,1)}$	$c_{(1,2)}$	$c_{(2,3)}$	(K,T)	$k_{(0,1)}$	$k_{(1,2)}$	$k_{(2,3)}$
0.0268	−0.8703	−0.4811	−0.1050	(3,0)	−0.8367	−0.5292	−0.1414
0.0370	−0.4522	0.6964	0.5573	(1,0)	−0.5000	0.6325	0.5916
0.0533	−0.1950	0.5325	−0.8236	(-1,0)	−0.2236	0.5657	−0.7937

Tabulka 5.2: Kvadráty koefcientov vlastných stavov operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ v bázi $|n_1, n_2, K, T, l, m >$ pre N=4,l=1

(K,T)	$(3,0)$	$(1,0)$	$(-1,0)$
(3,0)	0.995	0.005	0.000
(1,0)	0.005	0.992	0.003
(-1,0)	0.000	0.003	0.997

Tabulka 5.3: Vlastné stavy operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ pre N=7,l=1

ϵ	$c_{(0,1)}$	$c_{(1,2)}$	$c_{(2,3)}$	$c_{(3,4)}$	$c_{(4,5)}$	$c_{(5,6)}$
0.0081	0.7319	0.6053	0.2985	0.0926	0.0173	0.0016
0.0096	−0.5208	0.2267	0.6661	0.4587	0.1505	0.0224
0.0117	0.3487	−0.4797	−0.1010	0.6096	0.4982	0.1351
0.0144	0.2214	−0.4522	0.3546	0.1883	−0.6318	−0.4316
0.0179	−0.1326	0.3312	−0.4609	0.3704	0.0605	−0.7207
0.0230	0.0698	−0.1949	0.3447	−0.4866	0.5710	−0.5250

Tabulka 5.4: Stavy $|n_1, n_2, K, T, l, m>$ pre N=7,l=1

(K,T)	$k_{(0,1)}$	$k_{(1,2)}$	$k_{(2,3)}$	$k_{(3,4)}$	$k_{(4,5)}$	$k_{(5,6)}$
(6,0)	0.6814	0.6220	0.3591	0.1370	0.0326	0.0040
(4,0)	−0.5297	0.0967	0.6142	0.5324	0.2183	0.0409
(2,0)	0.3912	−0.4286	−0.2474	0.5112	0.5549	0.1814
(0,0)	0.2673	−0.4880	0.2817	0.2955	−0.5634	−0.4543
(-2,0)	−0.1597	0.3791	−0.4882	0.3532	0.0842	−0.6787
(-4,0)	0.0714	−0.1956	0.3388	−0.4738	0.5647	−0.5463

Tabulka 5.5: Kvadráty koefcientov vlastných stavov operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ v bázi $|n_1, n_2, K, T, l, m>$ pre N=7,l=1

(K,T)	$(6,0)$	$(4,0)$	$(2,0)$	$(0,0)$	$(-2,0)$	$(-4,0)$
(6,0)	0.991	0.009	0.000	0.000	0.000	0.000
(4,0)	0.009	0.970	0.021	0.000	0.000	0.000
(2,0)	0.000	0.021	0.960	0.019	0.001	0.000
(0,0)	0.000	0.000	0.020	0.975	0.005	0.000
(-2,0)	0.000	0.000	0.000	0.006	0.994	0.000
(-4,0)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.999

Tabulka 5.6: Vlastné stavy operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ pre N=10,l=1

ϵ	$c_{(0,1)}$	$c_{(1,2)}$	$c_{(2,3)}$	$c_{(3,4)}$	$c_{(4,5)}$	$c_{(5,6)}$	$c_{(6,7)}$	$c_{(7,8)}$	$c_{(8,9)}$
0.0039	0.64	0.62	0.41	0.19	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00
0.0043	−0.51	−0.02	0.50	0.58	0.36	0.14	0.03	0.00	0.00
0.0049	−0.39	0.29	0.39	−0.20	−0.58	−0.44	−0.18	−0.04	0.00
0.0057	0.30	−0.40	−0.05	0.45	−0.01	−0.55	−0.47	−0.18	−0.03
0.0066	−0.21	0.39	−0.22	−0.22	0.43	0.05	−0.55	−0.45	−0.12
0.0076	0.15	−0.33	0.35	−0.10	−0.27	0.43	0.00	−0.60	−0.34
0.0089	−0.11	0.26	−0.35	0.31	−0.09	−0.25	0.47	−0.23	−0.60
0.0106	−0.07	0.18	−0.30	0.37	−0.35	0.20	0.07	−0.41	0.63
0.0131	0.04	−0.11	0.20	−0.30	0.38	−0.45	0.47	−0.43	0.33

Tabulka 5.7: Stavy $|n_1, n_2, K, T, l, m >$ pre N=10,l=1

(K,T)	$k_{(0,1)}$	$k_{(1,2)}$	$k_{(2,3)}$	$k_{(3,4)}$	$k_{(4,5)}$	$k_{(5,6)}$	$k_{(6,7)}$	$k_{(7,8)}$	$k_{(8,9)}$
(9,0)	0.59	0.61	0.45	0.24	0.10	0.03	0.01	0.00	0.00
(7,0)	−0.49	−0.12	0.38	0.58	0.45	0.22	0.07	0.01	0.00
(5,0)	−0.41	0.18	0.45	0.00	−0.49	−0.52	−0.27	−0.08	−0.01
(3,0)	0.33	−0.35	−0.19	0.41	0.20	−0.42	−0.53	−0.25	−0.05
(1,0)	−0.26	0.40	−0.11	−0.34	0.34	0.23	−0.45	−0.49	−0.16
(-1,0)	0.19	−0.38	0.33	0.00	−0.36	0.37	0.11	−0.56	−0.35
(-3,0)	−0.13	0.31	−0.39	0.31	−0.05	−0.28	0.46	−0.21	−0.55
(-5,0)	−0.08	0.20	−0.32	0.39	−0.38	0.25	0.00	−0.33	0.61
(-7,0)	0.03	−0.10	0.17	−0.26	0.34	−0.41	0.46	−0.48	0.41

Tabulka 5.8: Kvadráty koefcientov vlastných stavov operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ v bázi $|n_1, n_2, K, T, l, m >$ pre N=10,l=1

(K,T)	$(9,0)$	$(7,0)$	$(5,0)$	$(3,0)$	$(1,0)$	$(-1,0)$	$(-3,0)$	$(-5,0)$	$(-7,0)$
(9,0)	0.990	0.010	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
(7,0)	0.010	0.958	0.031	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
(5,0)	0.000	0.032	0.920	0.046	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
(3,0)	0.000	0.000	0.049	0.905	0.045	0.002	0.000	0.000	0.000
(1,0)	0.000	0.000	0.000	0.049	0.922	0.028	0.002	0.000	0.000
(-1,0)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.031	0.962	0.007	0.001	0.000
(-3,0)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.008	0.991	0.001	0.000
(-5,0)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.984	0.015
(-7,0)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.015	0.985

Kapitola 6

Záver

V tejto práci sme najprv zhrnuli niektoré zo symetrií atómu vodíku. Potom sa nám podarilo nájsť vlastné stavy operátorov X^2 a $(X.L)^2$, pomocou skladania 4 vhodne zvolených momentov hybnosti a priamou diagonalizáciou týchto operátorov. Ukázali sme, že pre nízke hodnoty hlavných kvantových čísel $n_1 = n_2$ tieto stavy s veľkou presnosťou diagonalizujú operátor $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ a jednočasticové vodíkové Hamiltoniány (2.133).
Zatiaľ čo v Kapitolách 2 a 3 sú podrobne rozobrané výsledky z prác [1], [7], [2], [3] a [6], výsledky Kapitoly 4 sú originálne. Hlavným výsledkom tejto práce sú systémy rovníc (4.86) a (4.91), ktorých riešenie hľadá program popísaný v Kapitole 4. Tento program pracuje rádovo rýchlejšie ako program, ktorý funguje na princípe 9J koeficientov.
V budúcnosti bude našou snahou zjednodušenie výpočtu Coulombovej interakcie pre vysoko excitované stavy, teda stavy $|n_1, n_2, l, l_1, l_2, m>$ s vysokými hodnotami hlavných a vedľajších kvantových čísel. Taktiež sa budeme snažiť nájsť výberové pravidlá pre maticové elementy operátoru $\frac{1}{|r^I - r^{II}|}$ v bázy stavov $|n_1, n_2, l, K, T, m>$, pretože očakávame, že stavy z rôznymi hodnotami kvantových čísel K a T budú interagovať veľmi málo.

Literatura

[1] O. Sinanoğlu, D. R. Herrick: *Group theoretic prediction of configuration mixing effects due to Coulomb repulsions in atoms with applications to doubly-excited spectra*, J. Chem. Phys. **62**, 886, (1975).

[2] D. R. Herrick: *New Symmetry Properties of Atoms and Molecules*, Adv. Chem. Phys. **52**, 1, (1983)

[3] U. Fano, A. R. P. Rau: *Symmetries in Quantum Physics*, Academic Press, (1996)

[4] D. R. Herrick and O. Sinanoğlu: *Comparison of doubly-excited helium energy levels, isoelectronic series, autoionization lifetimes, and group-theoretical configuration-mixing predictions with large-configuration-interaction calculations and experimental spectra*, Phys. Rev. A **11**, 97, (1975)

[5] L. C. Biedenharn: *Wigner Coefficients for the R_4 Group and Some Applications*, Jour. Math. Phys. **2**, 433, (1961)

[6] G. Tanner, K. Richter, and J. M. Rost: *Theory of two-electron atoms*, Rev. Mod. Phys. **72**, 497, (2000)

[7] J. Zamastil, F. Vinette and M. Šimánek: *The use of commutation relations for the calculation of the atomic integrals*, Phys. Rev. A **75**, 022506, (2007)

[8] B.G. Adams and J. Čížek and J. Paldus: *Lie Algebraic Methods and Their Applications to Simple Quantum Systems*, Adv. Quantum Chem. **19**, 1, (1988)

[9] M. Bander, C Itzykson: *Group Theory and the Hydrogen Atom*, Rev. Mod. Phys. **38**, 330, (1966)

[10] I. Lindgren, J. Morrison: *Atomic Many-Body Theory*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, (1982)

[11] L. C. Biedenharn, J.D. Louck: *Angular Momentum in Quantum Physics: Theory and Application,(Encyclopedia of Mathematics and its Applications)*, Addison-Wesley Publishing Company, (1981)