

Kapitola 6

Ireducibilní tenzorové operátory, Wigner-Eckartův teorém

Přehled teorie

Ireducibilní tenzorové operátory

Ireducibilní tenzorový operátor $\hat{T}^{(k)}$ (ITO, často používaný název je také sférický tenzor) řádu k je sada $2k+1$ operátorů $\hat{T}(k, q)$, $q = k, k-1, \dots, -k$, které splňují komutační relace

$$\begin{aligned}\left[\hat{J}_3, \hat{T}(k, q)\right] &= \hbar q \hat{T}(k, q), \\ \left[\hat{J}_{\pm}, \hat{T}(k, q)\right] &= \alpha_{k,q}^{\pm} \hat{T}(k, q \pm 1).\end{aligned}\tag{6.1}$$

Místo komutačních relací s posunovacími operátory můžeme ITO definovat podle komutace se složkami momentu hybnosti

$$\left[\hat{J}_i, \hat{T}(k, q)\right] = \sum_{q'=-k}^k \left(\mathbb{J}_i^{(k)}\right)_{q',q} \hat{T}(k, q'),$$

kde $\mathbb{J}_i^{(k)}$ jsou matice momentu hybnosti velikosti k , viz. (3.1). Důvod pro název *ireducibilní* tenzor je, že při rotacích se ITO transformují podle Wignerových D-matic, které tvoří ireducibilní reprezentace Lieovy grupy $SO(3)$. Platí tedy vztah

$$\hat{T}'(k, q) = \hat{R} \hat{T}(k, q) \hat{R}^\dagger = \sum_{q'=-k}^k D_{q',q}^{(k)} \hat{T}(k, q').$$

ITO se tedy při rotacích transformují stejně jako kety $|j, m\rangle$, viz. (3.8).

Vztahy mezi sférickými a kartézskými tenzory

Skalární operátory jsou současně ITO 0. řádu. Ze složek kartézského vektoru $\hat{\vec{V}} = (\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3)$ lze vytvořit ITO 1. řádu $\hat{\mathbb{V}}^{(1)}$ se složkami

$$\hat{V}(1, 1) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 + i\hat{V}_2), \quad \hat{V}(1, 0) = \hat{V}_3, \quad \hat{V}(1, -1) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 - i\hat{V}_2), \quad (6.2)$$

viz. příklad 19.

Libovolný kartézský tenzor 2. řádu můžeme rozepsat jako součet tří členů

$$\begin{aligned} \hat{T}_{ij} &= \hat{D}_{ij} + \hat{A}_{ij} + \hat{S}_{ij}, \\ \hat{D}_{ij} &= \frac{1}{3} \text{Tr } \hat{T} \delta_{ij} = \frac{1}{3} (\hat{T}_{11} + \hat{T}_{22} + \hat{T}_{33}) \delta_{ij}, \\ \hat{A}_{ij} &= \frac{1}{2} (\hat{T}_{ij} - \hat{T}_{ji}), \\ \hat{S}_{ij} &= \frac{1}{2} (\hat{T}_{ij} + \hat{T}_{ji}) - \hat{D}_{ij}, \end{aligned} \quad (6.3)$$

kde $\hat{D}_{ij}$ je násobek jednotkového tenzoru, $\hat{A}_{ij}$ je antisymetrický tenzor a $\hat{S}_{ij}$ je symetrický tenzor s nulovou stopou. Z těchto tenzorů lze sestavit ITO 0., resp. 1., resp. 2. řádu. Připomeňme, že kartézský tenzor splňuje komutační relace s momentem hybnosti (3.11).

$\hat{D}_{ij}$ je násobek jednotkového tenzoru a je to tedy skalár, tj. ITO 0. řádu

$$\hat{\mathbb{T}}^{(0)} = \hat{T}(0, 0) = \frac{1}{3} \text{Tr } \hat{T}. \quad (6.4)$$

$\hat{A}_{ij}$ je antisymetrický tenzor, má jen tři nezávislé složky

$$\begin{aligned} \hat{A}_{23} &= \frac{1}{2} (\hat{T}_{23} - \hat{T}_{32}) \equiv \hat{V}_1, \\ \hat{A}_{31} &= \frac{1}{2} (\hat{T}_{31} - \hat{T}_{13}) \equiv \hat{V}_2, \\ \hat{A}_{12} &= \frac{1}{2} (\hat{T}_{12} - \hat{T}_{21}) \equiv \hat{V}_3. \end{aligned}$$

Pomocí komutačních relací (3.11) lze odvodit, že $\hat{V}_i$ jsou složky vektorového operátoru, tj. platí

$$[\hat{J}_k, \hat{V}_i] = i\hbar \varepsilon_{kil} \hat{V}_l.$$

Z nich už umíme sestavit ITO 1. řádu $\hat{\mathbb{T}}^{(1)}$ podle převodních vztahů (6.2)

$$\begin{aligned} \hat{T}(1, 1) &= -\frac{1}{2\sqrt{2}} (\hat{T}_{23} - \hat{T}_{32} + i\hat{T}_{31} - i\hat{T}_{13}), \\ \hat{T}(1, 0) &= \frac{1}{2} (\hat{T}_{12} - \hat{T}_{21}), \\ \hat{T}(1, -1) &= \frac{1}{2\sqrt{2}} (\hat{T}_{23} - \hat{T}_{32} - i\hat{T}_{31} + i\hat{T}_{13}). \end{aligned} \quad (6.5)$$

Podobně lze sestavit ITO 2. řádu $\hat{T}^{(2)}$ z pěti nezávislých složek symetrického tenzoru $\hat{S}_{ij}$ následujícím způsobem

$$\begin{aligned}
\hat{T}(2, 2) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\hat{S}_{11} - \hat{S}_{22} + 2i\hat{S}_{12} \right) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\hat{T}_{11} - \hat{T}_{22} + i\hat{T}_{12} + i\hat{T}_{21} \right), \\
\hat{T}(2, 1) &= -\sqrt{\frac{2}{3}} \left(\hat{S}_{31} + i\hat{S}_{32} \right) = -\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\hat{T}_{31} + \hat{T}_{13} + i\hat{T}_{32} + i\hat{T}_{23} \right), \\
\hat{T}(2, 0) &= \hat{S}_{33} = \hat{T}_{33} - \frac{1}{3} \text{Tr } \hat{T}, \\
\hat{T}(2, -1) &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\hat{S}_{31} - i\hat{S}_{32} \right) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\hat{T}_{31} + \hat{T}_{13} - i\hat{T}_{32} - i\hat{T}_{23} \right), \\
\hat{T}(2, -2) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\hat{S}_{11} - \hat{S}_{22} - 2i\hat{S}_{12} \right) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\hat{T}_{11} - \hat{T}_{22} - i\hat{T}_{12} - i\hat{T}_{21} \right). \quad (6.6)
\end{aligned}$$

Wigner-Eckartův teorém

Transformační vlastnosti ITO při rotacích zjednodušují výpočet maticových elementů

$$\langle a, j_1, m_1 | \hat{T}(k, q) | b, j_2, m_2 \rangle,$$

kde a, b představují sady kvantových čísel (může jich být i více, tj. $a = (a_1, \dots, a_n)$, $b = (b_1, \dots, b_n)$) pozorovatelných kompatibilních s momentem hybnosti. Wigner-Eckartův teorém lze formulovat vztahy

$$\begin{aligned}
\langle a, j_1, m_1 | \hat{T}(k, q) | b, j_2, m_2 \rangle &= (-1)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & k & j_2 \\ -m_1 & q & m_2 \end{pmatrix} \left(a, j_1 \left\| \hat{T}^{(k)} \right\| b, j_2 \right) \quad (6.7) \\
&= \frac{(-1)^{j_1 + k - j_2}}{\sqrt{2j_1 + 1}} (k, j_2, q, m_2 | j_1, m_1) \left(a, j_1 \left\| \hat{T}^{(k)} \right\| b, j_2 \right),
\end{aligned}$$

kde $\left(a, j_1 \left\| \hat{T}^{(k)} \right\| b, j_2 \right)$ představuje tzv. redukovaný maticový element. Ten je určený levou stranou pro jednu hodnotu q, m_1, m_2 , kdy je CG koeficient nenulový. Díky Wigner-Eckartovu teorému stačí spočítat jeden maticový element ITO, ostatních $(2j_1 + 1)(2k + 1)(2j_2 + 1)$ už lze dopočítat s využitím CG koeficientů, resp. Wignerových $3j$ -symbolů. Výběrová pravidla pro CG koeficienty (4.5) platí stejným způsobem i pro maticové elementy ITO, tj. $\langle a, j_1, m_1 | \hat{T}(k, q) | b, j_2, m_2 \rangle = 0$ pokud neplatí

$$m_1 = m_2 + q, \quad |k - j_2| \leq j_1 \leq k + j_2.$$

Speciálně tedy platí

$$\langle a, j_1, m | \hat{T}(k, q) | b, j_2, m \rangle = 0 \quad \text{pro } q \neq 0.$$

Odsud snadno vidíme, že střední hodnoty 1. a 2. složky vektorového operátoru jsou ve stavech $|a, j, m\rangle$ nulové

$$\langle a, j, m | \hat{V}_1 | a, j, m \rangle = \langle a, j, m | \hat{V}_2 | a, j, m \rangle = 0, \quad (6.8)$$

protože inverzí vztahů (6.2) dostaneme

$$\hat{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{T}(1, -1) - \hat{T}(1, 1) \right), \quad \hat{V}_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\hat{T}(1, -1) + \hat{T}(1, 1) \right),$$

a $\langle a, j, m | \hat{T}(1, \pm 1) | a, j, m \rangle = 0$.

Maticové elementy skalárů a vektorů

Pro skalární operátor $\hat{S}$ se Wigner-Eckartův teorém zjednoduší na

$$\begin{aligned} \langle a, j_1, m_1 | \hat{S} | b, j_2, m_2 \rangle &= \frac{(-1)^{j_1-j_2}}{\sqrt{2j_1+1}} \underbrace{(0, j_2, 0, m_2 | j_1, m_1)}_{\delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}} \left(a, j_1 \parallel \hat{S} \parallel b, j_2 \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \left(a, j_1 \parallel \hat{S} \parallel b, j_2 \right) \\ &= f(j_1, a, b) \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}. \end{aligned}$$

Redukovaný maticový element skalárního operátoru je tedy

$$\left(a, j_1 \parallel \hat{S} \parallel b, j_2 \right) = f(j_1, a, b) \sqrt{2j_1+1} \delta_{j_1, j_2}.$$

Pokud jsou navíc vektory $\{|a, j_1, m_1\rangle\}$ a $\{|b, j_2, m_2\rangle\}$ stejné ortonormální báze, pak platí

$$f(j_1, a, b) = g(j_1, a) \delta_{a, b}.$$

Pro vektorové operátory platí projekční teorém (pro $j \neq 0$)

$$\langle a, j, m' | \hat{V} | b, j, m \rangle = \langle a, j, m' | \frac{\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}}}{\hat{J}^2} \hat{J} | b, j, m \rangle = \frac{1}{\hbar^2 j(j+1)} \langle a, j, m' | \left(\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{V}} \right) \hat{J} | b, j, m \rangle. \quad (6.9)$$

Tenzorový součin ITO

Z dvojice ITO $\hat{\mathbf{U}}^{(k_1)}$ a $\hat{\mathbf{V}}^{(k_2)}$ lze tenzorovým součinem zkonstruovat ITO řádu k

$$\hat{\mathbf{W}}^{(k)} = \left[\hat{\mathbf{U}}^{(k_1)} \otimes \hat{\mathbf{V}}^{(k_2)} \right]^{(k)},$$

kde $|k_1 - k_2| \leq k \leq k_1 + k_2$. Tenzorový součin je definován po složkách vztahem

$$\left[\hat{\mathbf{U}}^{(k_1)} \otimes \hat{\mathbf{V}}^{(k_2)} \right] (k, q) = \hat{W}(k, q) = \sum_{q_1, q_2} (k_1, k_2, q_1, q_2 | k, q) \hat{U}(k_1, q_1) \hat{V}(k_2, q_2). \quad (6.10)$$

Speciálně pro $k_1 = k_2$ a $k = 0$ dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{W}(0,0) &= \sum_{q_1} \underbrace{(k_1, k_1, q_1, -q_1 | 0, 0)}_{\frac{(-1)^{k_1+q_1}}{\sqrt{2k_1+1}}} \hat{U}(k_1, q_1) \hat{V}(k_1, -q_1) \\ &= \frac{(-1)^{k_1}}{\sqrt{2k_1+1}} \sum_{q_1} (-1)^{q_1} \hat{U}(k_1, q_1) \hat{V}(k_1, -q_1).\end{aligned}$$

Na základě tohoto vztahu se definuje skalární součin ITO stejného řádu

$$\hat{\mathcal{U}}^{(k_1)} \cdot \hat{\mathcal{V}}^{(k_1)} \equiv (-1)^{k_1} \sqrt{2k_1+1} \hat{W}(0,0) = \sum_{q_1} (-1)^{q_1} \hat{U}(k_1, q_1) \hat{V}(k_1, -q_1). \quad (6.11)$$

Pro maticové elementy skalárního součinu dvou ITO platí vztah

$$\begin{aligned}\langle a, j_1, m_1 | \hat{\mathcal{U}}^{(k)} \cdot \hat{\mathcal{V}}^{(k)} | b, j_2, m_2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \left(a, j_1 \left\| \hat{\mathcal{U}}^{(k)} \cdot \hat{\mathcal{V}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right) \\ &= \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \frac{(-1)^{j_1}}{2j_1+1} \sum_{c,j} (-1)^j \left(a, j_1 \left\| \hat{\mathcal{U}}^{(k)} \right\| c, j \right) \times \\ &\quad \times \left(c, j \left\| \hat{\mathcal{V}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right). \quad (6.12)\end{aligned}$$

První rovnost plyne přímo z Wigner-Eckartova teorému, protože $\hat{\mathcal{U}}^{(k)} \cdot \hat{\mathcal{V}}^{(k)}$ je ITO 0. řádu a pro příslušný CG koeficient platí

$$(0, j_2, 0, m_2 | j_1, m_1) = \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}.$$

Pro důkaz druhé rovnosti využijeme rozklad jednotky

$$\hat{I} = \sum_{c,j,m} |c, j, m\rangle \langle c, j, m|,$$

který vložíme mezi operátory $\hat{U}(k, q)$ a $\hat{V}(k, -q)$ ve skalárním součinu ITO, tj.

$$\begin{aligned}\langle a, j_1, m_1 | \hat{\mathcal{U}}^{(k)} \cdot \hat{\mathcal{V}}^{(k)} | b, j_2, m_2 \rangle &= \langle a, j_1, m_1 | \sum_q (-1)^q \hat{U}(k, q) \hat{V}(k, -q) | b, j_2, m_2 \rangle \\ &= \sum_{q,c,j,m} (-1)^q \langle a, j_1, m_1 | \hat{U}(k, q) | c, j, m \rangle \langle c, j, m | \hat{V}(k, -q) | b, j_2, m_2 \rangle \\ &= \sum_{q,c,j,m} (-1)^q (-1)^{j_1-m_1} \begin{pmatrix} j_1 & k & j \\ -m_1 & q & m \end{pmatrix} \left(a, j_1 \left\| \hat{\mathcal{U}}^{(k)} \right\| c, j \right) \times \\ &\quad \times (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j_2 \\ -m & -q & m_2 \end{pmatrix} \left(c, j \left\| \hat{\mathcal{V}}^{(k)} \right\| b, j_2 \right). \quad (6.13)\end{aligned}$$

Wignerovy $3j$ symboly upravíme s využitím symetrií (4.14) a (4.15) do tvaru

$$\begin{pmatrix} j_1 & k & j \\ -m_1 & q & m \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+k+j} \begin{pmatrix} j & k & j_1 \\ m & q & -m_1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} j & k & j_2 \\ -m & -q & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{j+k+j_2} \begin{pmatrix} j & k & j_2 \\ m & q & -m_2 \end{pmatrix}.$$

Suma přes q, m je potom rovna (pro fázové faktory platí $(-1)^{2n} = 1$)

$$\begin{aligned} \sum_{q,m} (-1)^{q+j_1+j-m_1-m} (-1)^{j_1+k+j} \begin{pmatrix} j & k & j_1 \\ m & q & -m_1 \end{pmatrix} (-1)^{j+k+j_2} \begin{pmatrix} j & k & j_2 \\ m & q & -m_2 \end{pmatrix} = \\ = \sum_{q,m} (-1)^{q+j_2+j-m_1-m} \frac{(-1)^{j-k+m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} (j, k, m, q | j_1, m_1) \frac{(-1)^{j-k+m_2}}{\sqrt{2j_2+1}} (j, k, m, q | j_2, m_2) \\ = \frac{(-1)^{j_2+j}}{\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)}} \underbrace{\sum_{q,m} (j, k, m, q | j_1, m_1) (j, k, m, q | j_2, m_2)}_{\delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}} \\ = \frac{(-1)^{j_1+j}}{2j_1+1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \end{aligned} \quad (6.14)$$

kde ve druhém řádku využijeme toho, že CG koeficienty jsou nenulové jen pro $m+q=m_1=m_2$, a poslední rovnost plyne z relací ortogonalit pro CG koeficienty (4.8). Dosazením (6.14) do (6.13) dostaneme hledaný vztah (6.12).

Speciálním případem vztahu (6.12) pro $k=1$ a $\hat{U}^{(1)} = \hat{J}^{(1)}$ je

$$\langle a, j', m' | \hat{J}^{(1)} \cdot \hat{V}^{(1)} | b, j, m \rangle = \hbar \sqrt{\frac{j(j+1)}{2j+1}} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \left(a, j' \left\| \hat{V}^{(1)} \right\| b, j \right)$$

kde jsme využili redukovaný maticový element momentu hybnosti (6.16) spočítaný v příkladu 21.

Příklady

Cvičení 19. Ukažte, že vztahy (6.2) definují ITO 1. řádu.

Návod: Musíme ověřit platnost vztahů (6.1). Využijeme komutačních relací vektorového operátoru s momentem hybnosti

$$[\hat{J}_i, \hat{V}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{V}_k.$$

Pro $\hat{V}(1,0) = \hat{V}_3$ ihned dostaneme

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{V}(1,0)] &= [\hat{J}_3, \hat{V}_3] = 0, \\ [\hat{J}_\pm, \hat{V}(1,0)] &= [\hat{J}_1, \hat{V}_3] \pm i [\hat{J}_2, \hat{V}_3] = \mp (\hat{V}_1 \pm i\hat{V}_2) = \sqrt{2}\hbar \hat{V}(1, \pm 1) = \alpha_{1,0}^\pm \hat{V}(1, \pm 1). \end{aligned}$$

Podobně pro $\hat{V}(1, 1) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 + i\hat{V}_2)$ nalezneme

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{V}(1, 1)] &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (i\hbar\varepsilon_{312}\hat{V}_2 + i(i\hbar\varepsilon_{321})\hat{V}_1) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} (i\hat{V}_2 + \hat{V}_1) = \hbar\hat{V}(1, 1), \\ [\hat{J}_+, \hat{V}(1, 1)] &= -\frac{1}{\sqrt{2}} ([\hat{J}_1, i\hat{V}_2] + [\hat{J}_2, \hat{V}_1]) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (-\hbar\varepsilon_{123}\hat{V}_3 - \hbar\varepsilon_{213}\hat{V}_3) = 0, \\ [\hat{J}_-, \hat{V}(1, 1)] &= -\frac{1}{\sqrt{2}} ([\hat{J}_1, i\hat{V}_2] - [\hat{J}_2, \hat{V}_1]) = \sqrt{2}\hbar\hat{V}_3 = \alpha_{1,1}^- \hat{V}(1, 0). \end{aligned}$$

Stejným způsobem pro $\hat{V}(1, -1) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 - i\hat{V}_2)$ najdeme

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{V}(1, -1)] &= \frac{1}{\sqrt{2}} (i\hbar\varepsilon_{312}\hat{V}_2 - i(i\hbar\varepsilon_{321})\hat{V}_1) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (i\hat{V}_2 - \hat{V}_1) = -\hbar\hat{V}(1, -1), \\ [\hat{J}_+, \hat{V}(1, -1)] &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-[\hat{J}_1, i\hat{V}_2] + [\hat{J}_2, \hat{V}_1]) = \sqrt{2}\hbar\hat{V}_3 = \alpha_{1,-1}^+ \hat{V}(1, 0), \\ [\hat{J}_-, \hat{V}(1, -1)] &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-[\hat{J}_1, i\hat{V}_2] - [\hat{J}_2, \hat{V}_1]) = 0. \end{aligned}$$

Cvičení 20. Složky operátoru kvadrupólového momentu $\hat{Q}_{ij} = q\hat{X}_i\hat{X}_j$ ($\hat{X}_i$ jsou složky operátoru polohy) tvoří dohromady kartézský tenzor 2. řádu. Určete jeho rozklad na ITO 0., 1. a 2. řádu.

Návod: Kvadrupólový moment nejprve rozdělíme podle vztahu (6.3). Tenzor $\hat{Q}_{ij}$ je symetrický, takže dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{D}_{ij} &= \frac{1}{3} \text{Tr } \hat{Q} \delta_{ij} = \frac{q}{3} \hat{X}^2 \delta_{ij} \\ \hat{A}_{ij} &= 0, \\ \hat{S}_{ij} &= \hat{Q}_{ij} - \hat{D}_{ij} = q\hat{X}_i\hat{X}_j - \frac{q}{3} \hat{X}^2 \delta_{ij}. \end{aligned}$$

ITO 0. řádu je tedy

$$\hat{Q}^{(0)} = \frac{q}{3} \hat{X}^2.$$

ITO 1. řádu je pro kvadrupólový moment nulový. Složky operátoru $\hat{Q}^{(2)}$ určíme z (6.6), můžeme je upravit do tvaru

$$\begin{aligned} \hat{Q}(2, 2) &= \frac{q}{\sqrt{6}} (\hat{X}_1 + i\hat{X}_2)^2, \\ \hat{Q}(2, 1) &= -q\sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}_3 (\hat{X}_1 + i\hat{X}_2), \\ \hat{T}(2, 0) &= \frac{q}{3} (2\hat{X}_3^2 - \hat{X}_1^2 - \hat{X}_2^2), \\ \hat{T}(2, -1) &= q\sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}_3 (\hat{X}_1 - i\hat{X}_2), \\ \hat{Q}(2, -2) &= \frac{q}{\sqrt{6}} (\hat{X}_1 - i\hat{X}_2)^2. \end{aligned}$$

Cvičení 21. Určete redukovaný maticový element $\left(a', j' \left\| \hat{\mathbb{J}}^{(1)} \right\| a, j\right)$, kde a, a' jsou sady kvantových čísel příslušející stejným pozorovatelným kompatibilním s momentem hybnosti.

Návod: Zvolíme složku $\hat{\mathbb{J}}(1, 0) = \hat{J}_3$, z Wigner-Eckartova teorému pak plyne

$$\langle a', j', m' | \hat{J}_3 | a, j, m \rangle = m \hbar \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \delta_{a,a'} = \frac{(-1)^{j'-j+1}}{\sqrt{2j'+1}} (1, j, 0, m | j', m') \left(a', j' \left\| \hat{\mathbb{J}}^{(1)} \right\| a, j\right).$$

Pro $m = m' = j$ pak s využitím CG koeficientu z přílohy A dostaneme rovnost

$$\begin{aligned} j \hbar \delta_{j,j'} \delta_{a,a'} &= -\frac{1}{\sqrt{2j+1}} \underbrace{(1, j, 0, j | j, j)}_{-\frac{j}{\sqrt{j(j+1)}}} \left(a', j' \left\| \hat{\mathbb{J}}^{(1)} \right\| a, j\right) \\ &= \frac{j}{\sqrt{j(j+1)(2j+1)}} \left(a', j' \left\| \hat{\mathbb{J}}^{(1)} \right\| a, j\right), \end{aligned} \quad (6.15)$$

takže platí

$$\left(j' \left\| \hat{\mathbb{J}}^{(1)} \right\| j\right) = \hbar \sqrt{j(j+1)(2j+1)} \delta_{j,j'} \delta_{a,a'}. \quad (6.16)$$

Cvičení 22. Uvažujme složený moment hybnosti $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)}$ a jeho vlastní stavy $|j_1, j_2, j, m\rangle$. Čemu je rovna střední hodnota $\hat{J}_3^{(1)}$ v tomto stavu?

Návod: Pro $j \neq 0$ využijeme projekční teorém (6.9)

$$\langle \hat{J}_3^{(1)} \rangle_{j,m} \equiv \langle j_1, j_2, j, m | \hat{J}_3^{(1)} | j_1, j_2, j, m \rangle = \frac{m}{\hbar j(j+1)} \langle j_1, j_2, j, m | \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{J}}^{(1)} | j_1, j_2, j, m \rangle.$$

Skalární součin vyjádříme pomocí kvadrátů momentů hybnosti

$$\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{J}}^{(1)} = \hat{J}^{(1)2} + \hat{\vec{J}}^{(2)} \cdot \hat{\vec{J}}^{(1)} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 + \hat{J}^{(1)2} - \hat{J}^{(2)2} \right)$$

kde jsme využili vztah (4.1). Pro střední hodnotu $\hat{J}_3^{(1)}$ tak dostaneme

$$\langle \hat{J}_3^{(1)} \rangle_{j,m} = \frac{m \hbar}{2j(j+1)} (j(j+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)).$$

Případ $j = 0 = m$ je možný jen když $j_1 = j_2$. Jediné nenulové CG koeficienty jsou (4.16), takže platí

$$|j_1, j_2, 0, 0\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \frac{(-1)^{j_1+m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} |j_1, m_1\rangle \otimes |j_1, -m_1\rangle.$$

Střední hodnota $\hat{J}_3^{(1)}$ je v tomto stavu nulová

$$\langle \hat{J}_3^{(1)} \rangle_{0,0} = \frac{(-1)^{j_1}}{\sqrt{2j_1+1}} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} (-1)^{m_1} m_1 \hbar = 0.$$

Cvičení 23. Operátor celkového magnetického momentu elektronu v atomu je roven součtu orbitálního a vlastního magnetického momentu

$$\hat{\vec{\mu}} = \hat{\vec{\mu}}_L + \hat{\vec{\mu}}_S = -\frac{\mu_0}{\hbar} \left(g_L \hat{\vec{L}} + g_S \hat{\vec{S}} \right), \quad g_L \approx 1, \quad g_S \approx 2, \quad (6.17)$$

kde μ_0 je Bohrov magneton. Určete diagonální maticové elementy $\langle l, s, j, m | \hat{\vec{\mu}} | l, s, j, m \rangle$.

Návod: První dvě složky mají střední hodnoty nulové díky (6.8). Pro třetí složku využijeme projekční teorém (6.9)

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mu}_3 \rangle_{j,m} &\equiv \langle l, s, j, m | \hat{\mu}_3 | l, s, j, m \rangle = -\frac{m\mu_0}{\hbar^2 j(j+1)} \langle l, s, j, m | \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{\mu}} | l, s, j, m \rangle \\ &= -\frac{m\mu_0}{\hbar^2 j(j+1)} \langle l, s, j, m | g_L \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{L}} + g_S \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{S}} | l, s, j, m \rangle. \end{aligned}$$

Skalární součiny vyjádříme stejným způsobem jako ve cvičení 22

$$\hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{L}} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 + \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right), \quad \hat{\vec{J}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2 \right).$$

Pro střední hodnoty $\hat{\mu}_3$ pak nalezneme

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mu}_3 \rangle_{j,m} &= -\frac{m\mu_0}{2\hbar^2 j(j+1)} \langle l, s, j, m | \hat{J}^2 (g_L + g_S) + \left(\hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right) (g_L - g_S) | l, s, j, m \rangle \\ &= -\frac{m\mu_0}{2j(j+1)} \left((g_L + g_S)j(j+1) + (g_L - g_S)(l(l+1) - s(s+1)) \right). \end{aligned}$$

Výsledek můžeme přepsat ve tvaru

$$\langle \hat{\mu}_3 \rangle_{j,m} = -g_j m \mu_0, \quad (6.18)$$

kde g_j je tzv. Landého g -faktor

$$g_j = \frac{g_L + g_S}{2} + \frac{l(l+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} (g_L - g_S).$$

Pro elektron je $s = \frac{1}{2}$ a v přiblížení $g_L = 1$ a $g_S = 2$ dostaneme

$$g_j = \frac{3}{2} + \frac{\frac{3}{4} - l(l+1)}{2j(j+1)} = \begin{cases} 1 \pm \frac{1}{2l+1}, & j = l \pm \frac{1}{2}, \quad l > 0 \\ 2, & l = 0 \end{cases}. \quad (6.19)$$

Střední hodnota s maximální projekcí $m = j$ se nazývá magnetický moment částice

$$\mu = \langle \mu_3 \rangle_{jj} = -g_j j \mu_0.$$

Cvičení 24. Definujme operátory $\hat{Y}(k, q)$ jako operátory násobení kulovou funkcí $Y_{kq}(\theta, \varphi)$. Ukažte, že $\hat{Y}(k, q)$ tvoří složky ireducibilního tenzoru řádu k $\hat{\mathbf{Y}}^{(k)}$. Nalezněte redukované maticové elementy $\langle l' \| \hat{\mathbf{Y}}^{(k)} \| l \rangle$. Určete maticové elementy $\langle N', l', m' | \hat{X}_i | N, l, m \rangle$.

Návod: Nejprve musíme ověřit platnost komutačních relací (6.1). Komutátory necháme působit na kulovou funkci Y_{lm}

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_3, \hat{Y}_{kq}\right] Y_{lm} &= \hat{L}_3(Y_{kq}Y_{lm}) - Y_{kq}\hat{L}_3Y_{lm} = \hbar q Y_{kq}Y_{lm} + Y_{kq}\hbar m Y_{lm} - Y_{kq}\hbar m Y_{lm} \\
&= \hbar q \hat{Y}_{kq}Y_{lm}, \\
\left[\hat{L}_\pm, \hat{Y}_{kq}\right] Y_{lm} &= \hat{L}_\pm(Y_{kq}Y_{lm}) - Y_{kq}\hat{L}_\pm Y_{lm} \\
&= \alpha_{kq}^\pm Y_{kq\pm 1}Y_{lm} + Y_{kq}\alpha_{lm}^\pm Y_{lm\pm 1} - Y_{kq}\alpha_{lm}^\pm Y_{lm\pm 1} \\
&= \alpha_{kq}^\pm \hat{Y}_{kq\pm 1}Y_{lm},
\end{aligned}$$

a protože kulové funkce tvoří ON bázi tak vztahy (6.1) platí. Pro redukovaný maticový element z Wigner-Eckartova teorému dostaneme

$$\langle l', m' | \hat{Y}(k, q) | l, m \rangle = \frac{(-1)^{l'+k-l}}{\sqrt{2l'+1}} (k, l, q, m | l', m') \left(l' \parallel \hat{\mathbf{Y}}^{(k)} \parallel l \right).$$

Levou stranu může vyjádřit přímo pomocí (4.37)

$$\begin{aligned}
\langle l', m' | \hat{Y}(k, q) | l, m \rangle &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \bar{Y}_{l'm'}(\theta, \varphi) Y_{kq}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\
&= \sqrt{\frac{(2k+1)(2l+1)}{4\pi(2l'+1)}} (k, l, 0, 0 | l', 0) (k, l, q, m | l', m').
\end{aligned}$$

Redukovaný maticový element $\hat{\mathbf{Y}}^{(k)}$ je tedy roven

$$\left(l' \parallel \hat{\mathbf{Y}}^{(k)} \parallel l \right) = (-1)^{l'+k-l} \sqrt{\frac{(2k+1)(2l+1)}{4\pi}} (k, l, 0, 0 | l', 0).$$

Pro výpočet maticových elementů operátoru polohy nejdříve napíšeme složky x_i ve sférických souřadnicích, využijeme převodních vztahů (6.2) a najdeme příslušný ITO 1. řádu $\hat{\mathbf{X}}^{(1)}$, který má složky

$$\begin{aligned}
\hat{X}(1, 1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + ix_2) = -\frac{1}{\sqrt{2}} r \sin\theta e^{i\varphi}, \\
\hat{X}(1, 0) &= x_3 = r \cos\theta, \\
\hat{X}(1, -1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 - ix_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} r \sin\theta e^{-i\varphi}.
\end{aligned}$$

Výsledek je možné přepsat pomocí kulových funkcí s $l = 1$ v kompaktním tvaru

$$\hat{X}(1, q) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1q}(\theta, \varphi),$$

tj. platí $\hat{X}^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \hat{Y}^{(k)}$. Pro maticové elementy $\hat{X}(1, q)$ nalezneme

$$\begin{aligned} \langle N', l', m' | \hat{X}(1, q) | N, l, m \rangle &= \langle N', l', m' | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \hat{Y}(1, q) | N, l, m \rangle \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{2l'+1}} (1, l, 0, 0 | l', 0) (1, l, q, m | l', m') \langle N', l' | r | N, l \rangle, \end{aligned} \quad (6.20)$$

kde jsme označili

$$\langle N', l' | r | N, l \rangle = \int_0^\infty r^3 \bar{R}_{N'l'}(r) R_{Nl}(r) dr. \quad (6.21)$$

Zde $R_{Nl}(r)$ představuje radiální část vlnové funkce stavu $|N, l, m\rangle$, tj.

$$\psi_{N,l,m}(r, \theta, \varphi) = \langle r, \theta, \varphi | N, l, m \rangle = R_{Nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Díky výběrovým pravidlům pro CG koeficienty vidíme, že maticový element (6.20) je nenulový jen pokud

$$\begin{aligned} \Delta m &= m' - m = q = 1, 0, -1, \\ \Delta l &= l' - l = 1, 0, -1. \end{aligned}$$

Ze symetrie Wignerových $3j$ symbolů vůči záměně znamének m_i (4.15) navíc plyne, že $(1, l, 0, 0 | l, 0) = 0$, protože

$$\begin{aligned} (1, l, 0, 0 | l, 0) &= (-1)^{l-1} \sqrt{2l+1} \begin{pmatrix} 1 & l & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{l-1} \sqrt{2l+1} (-1)^{2l+1} \begin{pmatrix} 1 & l & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= -(1, l, 0, 0 | l, 0) = 0. \end{aligned} \quad (6.22)$$

Maticové elementy jsou tedy nenulové jen pro $\Delta m = \pm 1, 0$ a $\Delta l = \pm 1$.

Cvičení 25. Uvažujte dva vektorové operátory $\hat{A}, \hat{B}$ a k nim přidružené ITO 1. řádu $\hat{A}^{(1)}, \hat{B}^{(1)}$. Ukažte, že platí

$$\hat{A}^{(1)} \cdot \hat{B}^{(1)} = \hat{A} \cdot \hat{B}, \quad (6.23)$$

$$\left[\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(1)} \right] (1, q) = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\hat{A} \times \hat{B} \right) (1, q). \quad (6.24)$$

Návod: Ve vztahu (6.23) využijeme definici skalárního součinu ITO (6.11) a převodních vztahů (6.2). Postupně nalezneme

$$\begin{aligned} \hat{A}^{(1)} \cdot \hat{B}^{(1)} &= \sum_{q=-1}^1 (-1)^q \hat{A}(1, q) \hat{B}(1, -q) = \hat{A}(1, 0) \hat{B}(1, 0) - \hat{A}(1, 1) \hat{B}(1, -1) - \hat{A}(1, -1) \hat{B}(1, 1) \\ &= \hat{A}_3 \hat{B}_3 + \frac{1}{2} \left(\hat{A}_1 + i \hat{A}_2 \right) \left(\hat{B}_1 - i \hat{B}_2 \right) + \frac{1}{2} \left(\hat{A}_1 - i \hat{A}_2 \right) \left(\hat{B}_1 + i \hat{B}_2 \right) \\ &= \hat{A}_i \hat{B}_i = \hat{A} \cdot \hat{B}. \end{aligned}$$

Pro důkaz (6.24) vyjádříme nejprve pravou stranu, kde opět využijeme převodní vztahy (6.2)

$$\begin{aligned}\left(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}}\right)(1,1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{A}_i\hat{B}_j(\varepsilon_{ij1} + i\varepsilon_{ij2}), \\ \left(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}}\right)(1,0) &= \hat{A}_i\hat{B}_j\varepsilon_{ij3}, \\ \left(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}}\right)(1,-1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{A}_i\hat{B}_j(\varepsilon_{ij1} - i\varepsilon_{ij2}).\end{aligned}$$

Levou stranu vyjádříme z definice tenzorového součinu (6.10) a použijeme CG koeficienty z tabulky v příloze A. Pro složku $q = 1$ najdeme

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{A}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{B}}^{(1)}\right](1,1) &= \underbrace{(1,1,1,0|1,1)}_{\frac{1}{\sqrt{2}}}\hat{A}(1,1)\hat{B}(1,0) + \underbrace{(1,1,0,1|1,1)}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}\hat{A}(1,0)\hat{B}(1,1) \\ &= -\frac{1}{2}\left(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2\right)\hat{B}_3 + \frac{1}{2}\hat{A}_3\left(\hat{B}_1 + i\hat{B}_2\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\hat{A}_3\hat{B}_1 - \hat{A}_1\hat{B}_3 + i\hat{A}_3\hat{B}_2 - i\hat{A}_2\hat{B}_3\right) \\ &= -\frac{i}{2}\hat{A}_i\hat{B}_j(\varepsilon_{ij1} + i\varepsilon_{ij2}) = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}}\right)(1,1).\end{aligned}$$

Podobně pro $q = 0$ dostaneme

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{A}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{B}}^{(1)}\right](1,0) &= \underbrace{(1,1,1,-1|1,0)}_{\frac{1}{\sqrt{2}}}\hat{A}(1,1)\hat{B}(1,-1) + \underbrace{(1,1,-1,1|1,0)}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}\hat{A}(1,-1)\hat{B}(1,1) \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2\right)\left(\hat{B}_1 - i\hat{B}_2\right) + \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2\right)\left(\hat{B}_1 + i\hat{B}_2\right) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{A}_1\hat{B}_2 - \hat{A}_2\hat{B}_1\right) = \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{A}_i\hat{B}_j\varepsilon_{ij3} = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}}\right)(1,0).\end{aligned}$$

A konečně pro složku $q = -1$ nalezneme

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathbf{A}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{B}}^{(1)}\right](1,-1) &= \underbrace{(1,1,-1,0|1,-1)}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}\hat{A}(1,-1)\hat{B}(1,0) + \underbrace{(1,1,0,-1|1,-1)}_{\frac{1}{\sqrt{2}}}\hat{A}(1,0)\hat{B}(1,-1) \\ &= -\frac{1}{2}\left(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2\right)\hat{B}_3 + \frac{1}{2}\hat{A}_3\left(\hat{B}_1 - i\hat{B}_2\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\hat{A}_3\hat{B}_1 - \hat{A}_1\hat{B}_3 - i\hat{A}_3\hat{B}_2 + i\hat{A}_2\hat{B}_3\right) \\ &= \frac{i}{2}\hat{A}_i\hat{B}_j(\varepsilon_{ij1} - i\varepsilon_{ij2}) = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\hat{\vec{A}} \times \hat{\vec{B}}\right)(1,-1).\end{aligned}$$