Tensoroperatoren und das Wigner-Eckart-Theorem

Felix Benckwitz

09.12.2015

Inhaltsverzeichnis

1 Problemstellung

Die Bestimmung der zu einer Observablen gehörenden Matrixelemente ist eine sehr wichtige Aufgabe in der Quantenmechanik. Ist O ein Operator, so lassen sich die zum Operator gehörigen Matrixelemente typischerweise mit den Eigenzuständen $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ des zum System zugehörigen ungestörten Hamiltonians H_0 berechnen:

$$\langle\varphi| O |\psi\rangle = a_{\varphi\psi}$$

Wir betrachten im weiteren einen Hamiltonian, der invariant unter den orientierungserhaltenden Rotationen der Gruppe SO(3) ist.
Wollen wir nun Informationen über die Matrixelemente eines Operators erhalten, so ist es nützlich sich sein Transformationsverhalten anzuschauen.

2 Tensoroperatoren

2.1 Skalaroperatoren

Wir betrachten nun einen Skalaroperator S, der invariant unter den Rotationen von SO(3) ist. Damit gilt:

$$U(R)SU(R)^{-1} = S$$

Wobei U(R) hier der unitäre Operator der Rotationen R ist. Dies lässt sich mit dem Generator der Drehungen X auch in Form eines Kommutators schreiben:

$$[\mathbf{X}, S] = \sum_k [X_k, S]e_k = 0$$

Es soll nun Folgendes gezeigt werden:

$$\langle j'm'| S |jm\rangle = N_j \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

Das Matrixelement von S zwischen den Eigenzuständen des Drehimpulsoperators J verschwindet also, außer es gilt j=j' und m=m' und ist unabhängig von m, gibt also bei zwei gleichen Zuständen eine Funktion N_j, die nur von j abhängig ist. Im Weiterem verwenden wir anstelle des Drehimpulsoperators J den Operator X, welchen wir bis auf den Faktor $\hbar$ mit J identifizieren können.
Das j'=j sein muss, ist auf das Verschwinden des Kommutators [S,$\mathbf{X}^2$] zurückzuführen, denn es gilt:

$$\begin{aligned} j(j+1)\langle j'm'| S |jm\rangle &= \langle j'm'| S\mathbf{X}^2 |jm\rangle \\ &= \langle j'm'| \mathbf{X}^2 S |jm\rangle \\ &= j'(j'+1)\langle j'm'| S |jm\rangle \end{aligned}$$

Analog folgt dann m'=m, da der Kommutator $[S, X_3]$ verschwindet.

$$\begin{aligned} m\langle j'm'| S |jm\rangle &= \langle j'm'| SX_3 |jm\rangle \\ &= \langle j'm'| X_3 S |jm\rangle \\ &= m'\langle j'm'| S |jm\rangle \end{aligned}$$

Das Matrixelement von S hängt weiterhin nicht von m ab, da S mit den Auf- und Absteigeoperatoren $X_{\pm} = X_1 \pm iX_2$ kommutiert:

$$\begin{aligned}\sqrt[2]{(j-m+1)(j+m)}\,\langle jm|\,S\,|jm\rangle &= \langle jm|\,SX_+\,|jm-1\rangle \\ &= \langle jm|\,X_+S\,|jm-1\rangle \\ &= \sqrt[2]{(j+m)(j-m+1)}\,\langle jm-1|\,S\,|jm-1\rangle\end{aligned}$$

Wobei hier $(X_+^\dagger) = X_-$ verwendet wurde.
Man kann in diesem Fall die Auswahlregeln der Matrixelemente recht schnell berechnen. Für höherstufige Operatoren ist dies allerdings nicht mehr so einfach.

2.2 Vektoroperatoren

Als Vektoroperator V bezeichnen wir eine Menge aus drei Operatoren V_k, die sich unter einer Drehung U(R) analog zu Vektoren transformieren:

$$U(R)V_iU(R)^{-1} = \sum_j D_{ij}V_j$$

Eine äquivalente Definition ist dabei:

$$[X_i, V_j] = i\varepsilon_{ijk}V_k$$

Ein Beispiel für einen Vektoroperator wäre dabei $\mathbf{X}$ selber. Für diesen Vektoroperator haben wir diese Relation im letzten Vortrag bewiesen.
Man könnte nun ähnlich wie beim Skalaroperator vorgehen, um die Auswahlregeln für einen Vektoroperator zu finden. Dies wird allerdings sehr schnell sehr aufwendig, besonders, wenn man sich höherstufige Tensoroperatoren anschaut.

2.3 Definition: Tensoroperatoren

Eine Verallgemeinerung von Operatoren sind hierbei die Tensoroperatoren T_q^k. Ein irreduzibler Tensoroperator T_q^k ist ein Operator vom Rang k mit 2k+1 sphärischen Komponenten q=-k,-(k-1),..,(k-1),k, der sich unter Drehungen auf SO(3) wie folgt transformiert:

$$U(R)T_q^k U(R)^{-1} = \sum_{q=-k}^{k} D_{q'q}^k(R)T_{q'}^k$$

Diese Transformation kann man mit der Wirkung des unitären Operators der Drehungen U(R) auf die quantenmechanischen Zustände $|jm\rangle$ vergleichen:

$$U(R)\,|jm\rangle = \sum_{m=-j}^{j} D_{m'm}^j\,|jm'\rangle$$

Irreduzible Tensoroperatoren transformieren sich also mit der Darstellung U(R) wie die Basis von Eigenzuständen $|jm\rangle$ des Drehimpulsoperators J. Anders gesagt bildet also ein irreduzibler Tensoroperator T_q^k mit seinem gesamten Satz sphärischer Komponenten eine Basis zu der Darstellung U(R).
Bemerkung: Der Skalaroperator S ist der triviale Fall eines Tensoroperators T_0^0. Ein Vektoroperator V hat nun weitere sphärische Koordinaten T_q^1, mit q=-1,0,+1 (k=1).

Um das Ganze etwas zu verdeutlichen, betrachten wir nun die Transformation von $X_{+1} = (-1/\sqrt[2]{2})(X_1 + iX_2)$ unter $R = R_3(\theta)$:

$$\begin{aligned} e^{-iX_3\theta}X_{+1}e^{iX_3\theta} &= (-1/\sqrt[2]{2})[X_1cos(\theta) + X_2sin(\theta) + i(X_2cos(\theta) - X_1sin(\theta))] \\ &= X_{+1}(cos(\theta) - isin(\theta)) \\ &= X_{+1}e^{-i\theta} \\ &= D_{11}^1(R_3(\theta))X_{+1} \end{aligned}$$

Hierbei wurden zuerst X_1undX_2 um die z-Achse n=(0,0,1) gedreht. Die Identifikation $e^{-i\theta} = D_{11}^1(R_3(\theta))$ folgt mit:

$$\begin{aligned} D_{m'm}^j &= \langle j,m'|\,U(R_3(\theta))\,|j,m\rangle \\ &= \langle j,m'|\,e^{i\theta X_3}\,|j,m\rangle \\ &= e^{i\theta m}\delta_{m'm} \end{aligned}$$

In diesem Fall sieht man also die Transformation einer Komponente eines Tensoroperators.

3 Wigner-Eckart Theorem

Um die Matrixelemente $\langle j'm'| T_q^k |jm\rangle$ eines höherrangigen Tensoroperators zu berechnen, bedarf es eines effektiveren Methode, als die, die wir beim Skalaroperator gesehen haben. Diese ist durch das Wigner-Eckart-Theorem gegeben. Das Theorem zeigt, dass die m-Abhängigkeit der Matrixelemente durch einen geeigneten Clebsch-Gordan-Koeffizienten ausgedrückt werden kann. Das Problem wird somit auf die j-Abhängigkeit der Matrixelemente reduziert.

3.1 Vorbereitung: Clebsch-Gordan Koeffizienten

Für den Beweis werden die Clebsch-Gordan Koeffizienten benötigt. Diese resultieren aus dem Basiswechsel zwischen ungekoppelten und gekoppelten Drehimpulsen $j_1 \otimes j_2 \to j$, oder anders formuliert aus der Ausreduktion eines Produktraums nach irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe. Dies funktioniert für Vektoren analog zu der Clebsch-Gordan-Reihe für das direkte Produkt zweier irreduzibler Darstellungen aus dem letztem Vortrag.

$$|j,m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_2} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2| \, |j,m\rangle \, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

Dies ist äquivalent zu:

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_{j,m} \langle j_1, j_2; m_1, m_2| \, |j,m\rangle \, |j,m\rangle$$

Dabei wird j von $|j_1 - j_2|$ bis $|j_1 + j_2|$ und $m = m_1 + m_2$ von -j bis j summiert. Der Faktor $\langle j_1, j_2; m_1, m_2| \, |j,m\rangle$ heißt Clebsch-Gordan Koeffizient und wird nun im Weiteren als $C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m)$ geschrieben.

Bemerkung: Für Hin- und Rücktransformation ergeben sich dieselben Clebsch-Gordan Koeffizienten. Es gilt weiterhin mit $m = m_1 + m_2$ die Erhaltung der m-Quantenzahl, wobei $|m| \leq j$, und $|j_1 - j_2| \leq j \leq |j_1 + j_2|$.

Weiterhin sind die Clebsch-Gordan Koeffizienten im Falle von SO(3) bei einer passenden Phasenkonvention reell. Interpretiert man die Koeffizienten mit den Indexpaaren $(m_1 m_2)$ bzw. (jm) als Matrix, so sind diese im Falle von SO(3) auch orthogonal:

$$\sum_{m_1, m_2} C(j_1 j_2 j'; m_1 m_2 m') C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

Oder:

$$\sum_{j,m} C(j_1 j_2 j; m_1' m_2' m) C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m) = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}$$

3.2 Das Wigner-Eckart-Theorem

Das Wigner-Eckart Theorem besagt, dass für die Matrixelemente eines Tensoroperators bezüglich der Eigenzustände des Drehimpulses gilt:

$$\langle j'm'| T_q^k |jm\rangle = C(kjj';qmm') \langle j'| |T^k| |j\rangle$$

Die Hauptaussage ist damit, dass die Matrixelemente des Tensoroperators nur durch entsprechende Clebsch-Gordan-Koeffizienten von der m-Quantenzahl abhängen. Der Faktor $\langle j'| |T^k| |j\rangle$ wird als reduziertes Matrixelement bezeichnet. Berechnet wird dieses, indem man für ein m das Matrixelement standardmäßig auswertet und das Theorem nach dem reduzierten Matrixelement umstellt. Man kann also die m-Abhängigkeiten der Matrixelemente allgemein berechnen, ohne weitere Informationen über die Eigenzustände und den Tensoroperator zu kennen.

3.3 Beweis: Wigner-Eckart-Theorem

Wir schauen uns nun den Zustand $(T_M^J |jm\rangle)$ an und betrachten sein Transformationsverhalten unter Drehungen:

$$U(R)(T_q^k |jm\rangle) = U(R)T_q^k U(R)^{-1} U(R) |jm\rangle$$

Mit dem zuvor eingeführten Transformationsverhalten von Tensoroperatoren und Zuständen $|jm\rangle$ lässt sich das wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} U(R)(T_q^k |jm\rangle) &= \sum_{q'=-k}^{k} D_{q'q}^k(U(R)) T_{q'}^k U(R) |jm\rangle \\ &= \sum_{q'=-k}^{k} \sum_{m'=-j}^{j} D_{q'q}^k D_{m'm}^j (T_{q'}^k |jm'\rangle) \end{aligned}$$

Es ist nun ersichtlich, dass sich der Zustand $(T_q^k |jm\rangle)$ wie beim direkten Produkt $D^{(J)} \otimes D^{(j)}$ mit der selben Matrix $D_{q'q}^k D_{m'm}^j$ transformiert. Also spannen die Vektoren $|k,q\rangle \otimes |j,m\rangle$ und $(T_q^k |jm\rangle)$ den selben isomorphen Produktdarstellungsraum der SO(3)-Gruppe auf.
Dazu betrachtet man die Mengen $A_k = [T_q^k| -k \leq q \leq k]$ und $B_j = [|jm\rangle \, | -j \leq m \leq j]$. Das Tensorprodukt dieser beiden Mengen lässt sich dann in eine orthogonale Summe von 2J+1 irreduziblen Teilräumen $F_J = [\left|T^k(j)JM\right\rangle | - J \leq M \leq J]$ ausreduzieren.

$$A_k \otimes B_j = \bigoplus_{J=|k-j|}^{k+j} F_J$$

Deshalb lässt sich der Produktraum mit den Basisvektoren $\left|T^k(j)JM\right\rangle$ des Raums F_J mit den zugehörigen Clebsch-Gordan Koeffizienten konstruieren. Für einen Basisvektor des Produktraums haben wird dann:

$$T_q^k \left|jm\right\rangle = \sum_{JM} C(kjJ;qmM) \left|T^k(j)JM\right\rangle$$

Zum Vergleich haben wir für einen Produktzustand, der ein ähnliches Transformationsverhalten aufweist:

$$\left|kq\right\rangle \left|jm\right\rangle = \sum_{JM} C(kjJ;qmM) \left|JM\right\rangle$$

Bei dieser Gleichung können wir den Zustand $\left\langle j'm'\right|$ von links heranmultiplizieren. Das ergibt:

$$\left\langle j'm'\right| T_q^k \left|jm\right\rangle = \sum_{JM} C(kjJ;qmM) \left\langle j'm'\right| \left|T^k(j)JM\right\rangle$$

Die Summe über die J,M fällt dabei weg, da die folgende Relation gilt:

$$\left\langle j'm'\right| \left|T^k(j)JM\right\rangle = N_{Jjj'}\delta_{Jj'}\delta_{Mm'}$$

Das Buch verzichtet darauf diese Orthogonalität zu beweisen. Desweiteren kann das Element nicht mehr von m' abhängen, da diese in der Transformation mit den Clebsch-Gordan Koeffizienten steckt. Eine m-Abhängigkeit würde gerade diese Transformationseigenschaft zerstören. Somit ist die Funktion $N_{Jjj'}$, die beim nichtverschwinden der Deltafunktionen übrig bleibt, nur abhängig von J,j,j'.
Somit erhält man:

$$\left\langle j'm'\right| T_q^k \left|jm\right\rangle = C(kjj';qmm')N_{Jjj'}$$

Die Funktion $N_{Jjj'}$ wird dabei reduziertes Matrixelement genannt und mit $\left\langle j'\right| \left|T^J\right| \left|j\right\rangle$ bezeichnet. Das ist nun das Wigner-Eckart-Theorem:

$$\left\langle j'm'\right| T_q^k \left|jm\right\rangle = C(kjj';qmm') \left\langle j'\right| \left|T^J\right| \left|j\right\rangle$$

3.4 Ergebnis des Wigner-Eckart-Theorems

Durch das Wigner-Eckhart-Theorem vereinfachen sich die Berechnungen von Matrixelementen enorm, da die m-Abhängigkeit nur über einen Clebsch-Gordan-Koeffizienten ausgedrückt werden kann. Die j-Abhängigkeit muss jedoch auf die herkömmliche Weise berechnet werden. Interessant sind allerdings die Informationen die aus den Clebsch-Gordan-Koeffizienten gewonnen werden können. Sie erlauben es, das Verschwinden von Matrixelementen nur anhand der Symmetrie zu erkennen. Außerdem können bei Kenntnis eines Matrixelements mit bestimmten j leicht alle anderen mit dem selben j berechnet werden.

4 Beispiel: Dipolauswahlregeln

Dipolübergänge zwischen einzelnen Zuständen eines Atoms können mit dem elekrischen Dipoloperator $D = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x}$ beschrieben werden. Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand $|j'm'\rangle$ zum Zustand $|jm\rangle$ hängt dabei vom Quadrat des entsprechenden Matrixelementes $\langle j'm'| \mathbf{x} |jm\rangle$ ab. Daher sind nur Übergänge erlaubt, bei denen dieses Matrixelement nicht verschwindet. Mit dem Wigner-Eckhart-Theorem lässt sich das Matrixelement sofort umschreiben, denn x ist ein Vektoroperator mit k=1 und q=-1,0,1:

$$\langle j'm'| \mathbf{x}_q^1 |jm\rangle = C(1jj'; qmm') \langle j'| |\mathbf{x}^1| |j\rangle$$

Nun kann man schon anhand der Clebsch-Gordan-Koeffizienten zwei Auswahlregeln ablesen:
1) $\mathbf{x}$ hat als Vektoroperator den Rang k=1. Dies erlaubt nur j,j', die die Gleichung:

$$|1 - j| \leq j' \leq 1 + j$$

erfüllen, da ansonsten die Clebsch-Gordan-Koeffizienten verschwinden würden. Hieraus folgt dann, dass:

$$\Delta j = j' - j = \pm 1, 0$$

Bemerkung: $\Delta J = 0$ folgt aus den Koeffizienten, ist aber unter Betrachtung der Parität verboten ($\mathbf{x}$ ist ein ungerader Operator, also muss sich die Parität der Wellenfunktion ändern). Dies ist aber erst dann, wenn man das reduzierte Matrixelement auswertet, ersichtlich.
2) Weiterhin gilt für die Clebsch-Gordan Koeffizienten, dass die Summe der magnetischen Quantenzahlen der ungekoppelten Zustände gleich der magnetischen Quantenzahl des gekoppelten Zustands ist. Hier heißt das also:

$$q + m = m'$$

Somit folgt die zweite Auswahlregel:

$$\Delta m = m' - m = q = \pm 1, 0$$

Die magnetische Quantenzahl darf sich bei einem Dipolübergang also nur um $\Delta m = \pm 1, 0$ ändern.

5 Literatur

[1] H.F. Jones, *Groups, Representations and Physics*, Adam Hilger Ltd., 1990