Vorlesung 3

Matrixelemente von Tensoroperatoren und die Auswahlregeln

In der Quantenmechanik müssen wir ab und zu die Matrixelemente von verschiedenen Operatoren berechnen. Von spezieller Bedeutung sind für uns die Abhängigkeit solcher Matrixelemente vom Drehimpuls, d.h. wir betrachten

$$\langle j_1, m_1|\hat{O}|j_2, m_2\rangle \tag{1}$$

und wollen die Abhängigkeit von $j_{1,2}$ und $m_{1,2}$ bestimmen.

Um zu sehen, wie das funktioniert, betrachten wir einen Skalaroperator. Ein Skalaroperator $\hat{O}_s$ ändert sich unter die Drehungen nicht. Das bedeutet, dass der Kommutator zwischen $\vec{J}$ und $\hat{O}_S$ verschwinden soll, also

$$\left[\vec{J}, \hat{O}_s\right] = 0. \tag{2}$$

Es gibt viele Operatoren, wie zum Beispiel

$$\vec{r}^2, \vec{r}\cdot\vec{p}, \vec{p}^2, \tag{3}$$

welche Skalaroperatoren sind.

Wir können den Kommutator aus Gl. (2) verwenden, um Informationen über das Matrixelement $\langle j_1, m_1|\hat{O}_s|j_2, m_2\rangle$ zu bekommen. Betrachten wir

$$\begin{aligned}
0 &= \langle j_1, m_1|[J_z, \hat{O}_s]|j_2, m_2\rangle = (m_1 - m_2)\langle j_1, m_1|\hat{O}_s|j_2, m_2\rangle, \\
0 &= \langle j_1, m_1|[\vec{J}^2, \hat{O}_s]|j_2, m_2\rangle = (j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1))\langle j_1, m_1|\hat{O}_s|j_2, m_2\rangle.
\end{aligned} \tag{4}$$

D.h. wir erhalten

$$\langle j_1, m_1|\hat{O}_s|j_2, m_2\rangle = \delta_{m_1 m_2}\delta_{j_1 j_2}\, a(j_1, m_1), \tag{5}$$

wobei $a(j_1, m_1)$ eine Funktion von j und m ist.

Es ist möglich zu zeigen, dass $a(j, m)$ eigentlich von m unabhängig ist. Dazu betrachten wir das Matrixelement des Kommutators zwischen J_- und $\hat{O}_s$, der auch verschwindet, und schreiben

$$\begin{aligned}
0 &= \langle j_1, m_1|[J_-, \hat{O}_s]|j_2, m_2\rangle \\
&= \mu_+(j_1, m_1)\langle j_1, m_1+1|\hat{O}_s|j_2, m_2\rangle - \mu_-(j_2, m_2)\langle j_1, m_1|\hat{O}_s|j_2, m_2-1\rangle \\
&= \mu_+(j_1, m_1)a(j_1, m_1+1)\delta_{j_1,j_2}\delta_{m_1+1,m_2} - \mu_-(j_2, m_2)a(j_1, m_1)\delta_{j_1,j_2}\delta_{m_1,m_2-1}.
\end{aligned} \tag{6}$$

Wir benutzen[1]

$$\mu_+(j_1, m_1) = \mu_-(j_1, m_1+1) \tag{7}$$

[1] Siehe Vorlesung 1.

und erhalten

$$0 = \mu_+(j_1, m_1)\delta_{j_1,j_2}\delta_{m_1+1,m_2}\left[a(j_1, m_1+1) - a(j_1, m_1)\right]. \tag{8}$$

Das bedeutet, dass

$$a(j_1, m_1) = a(j_1, m_1+1) = a(j_1), \tag{9}$$

sodass $a(j, m)$ von m unabhängig ist. Also gilt

$$\langle j_1, m_1|\hat{O}_s|j_2, m_2\rangle = a(j_1)\delta_{j_1 j_2}\delta_{m_1 m_2}. \tag{10}$$

Als nächste Schritt betrachten wir ein Vektoroperator V. In dem Fall ist die Geschichte viel komplizierter. Ein Vektoroperator transformiert sich unter Drehungen wie z.B. ein Ortsvektor $\vec{r}$. Das entspricht folgenden Vertauschungsrelationen

$$[J_i, V_j] = i\epsilon_{ijk}V_k. \tag{11}$$

Weil $[J_z, V_z] = 0$, finden wir

$$0 = \langle j_1, m_1|[J_z, V_z]|j_2, m_2\rangle = (m_1 - m_2)\langle j_1, m_1|V_z|j_2, m_2\rangle. \tag{12}$$

Es folgt

$$\langle j_1, m_1|V_z|j_2, m_2\rangle \sim \delta_{m_1 m_2} \tag{13}$$

Wie führen zwei Operatoren $V_\pm = V_x \pm iV_y$ ein und benutzen Gl. (11) um die folgenden Vertauschungsrelationen herzuleiten

$$[J_z, V_\pm] = \pm V_\pm. \tag{14}$$

Jetzt betrachten wir

$$\langle j_1, m_1|[J_z, V_\pm]|j_2, m_2\rangle = \pm\langle j_1, m_1|V_\pm|j_2, m_2\rangle, \tag{15}$$

und finden, dass

$$(m_1 - m_2 \mp 1)\,\langle j_1, m_1|V_\pm|j_2, m_2\rangle = 0. \tag{16}$$

Das bedeutet

$$\langle j_1, m_1|V_\pm|j_2, m_2\rangle \sim \delta_{m_1, m_2\pm 1}. \tag{17}$$

Auf diese Weise können wir weitere Einschränkungen für die Matrixelemente finden, aber das ist viel komplizierter. Es ist besser, die Vorgehensweise zu ändern und alle Operatoren nach ihren Transformationseigenschaften unter Drehungen zu klassifizieren. Warum das nützlich ist, können wir am folgenden Beispiel sehen.

Angenommen wir wollen die Matrixelemente des Operators $\vec{r}$ bestimmen. Wir schreiben $\vec{r}$ in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned}\vec{r} &= r\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta e^{-i\varphi}\vec{e}_+ + \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta e^{i\varphi}\vec{e}_- + \cos\theta\vec{e}_z\right)\\ &= r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left(Y_{10}(\theta,\varphi)\vec{e}_z - Y_{11}(\theta,\varphi)\;\vec{e}_- + Y_{1,-1}(\theta,\varphi)\;\vec{e}_+\right),\end{aligned} \tag{18}$$

wobei $\vec{e}_\pm = (\vec{e}_x \pm i\vec{e}_y)/\sqrt{2}$ und $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ Kugelflächenfunktionen sind.

Die drei Vektoren $\vec{e}_\pm, \vec{e}_z$ sind orthonormal

$$\vec{e}_\pm \cdot \vec{e}_\mp = 1, \quad \vec{e}_\pm \cdot \vec{e}_\pm = 0, \quad \vec{e}_\pm \cdot \vec{e}_z = 0, \quad \vec{e}_z \cdot \vec{e}_z = 1. \tag{19}$$

Dann können wir jeden Vektor in $(\pm, z)$-Komponenten schreiben

$$\vec{a} = a_+\vec{e}_+ + a_-\vec{e}_- + a_z\vec{e}_z. \tag{20}$$

Wenn wir diese Entwicklung mit der Entwicklung von $\vec{r}$ vergleichen, finden wir

$$r_+ = r_{m=-1}, \quad r_- = -r_{m=1}, \quad , \tag{21}$$

wobei

$$r_{m=\mu} = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,\mu}(\theta,\varphi), \quad \mu = \pm 1, 0, \tag{22}$$

die Kugelkomponenten des Vektors $\vec{r}$ sind. Zu beachten sind das Vorzeichen bei $r_{m=+1}$ und die "vertauschte" Zuordnung $r_\pm \leftrightarrow m = \mp 1$. Im Folgenden verkürzen wir die Schreibweise durch Weglassen des "$m =$". Wenn wir ein Skalarprodukt von zwei Vektoren durch Kugelkomponenten schreiben, erhalten wir eine etwas ungewöhnliche Formel

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{\mu=-1}^{1} (-1)^\mu a_\mu b_{-\mu}. \tag{23}$$

Falls wir die Matrixelemente von $\vec{r}$ berechnen wollen, können wir die Schreibweise aus Gl. (18) verwenden. Dann ist klar, dass wir die Matrixelemente $\langle j_1, m_1|Y_{1m}(\theta,\varphi)|j_2, m_2\rangle$, $m = \pm 1, 0$ brauchen. Wir verallgemeinern dies und fragen, was das Matrixelement

$$\langle j_1, m_1|Y_{lm}(\theta,\varphi)|j_2, m_2\rangle \tag{24}$$

ist. Das ist aber einfach

$$\begin{aligned} &\langle j_1, m_1|Y_{lm}(\theta,\varphi)|j_2, m_2\rangle = \langle j_1, m_1|l, m; j_2, m_2\rangle \\ &= C^{j_1 m_1}_{lm, j_2, m_2} = (-1)^{-l+j_2+m_1}\sqrt{2j_1+1}\begin{pmatrix} l & j_2 & j_1 \\ m & m_2 & -m_1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{25}$$

Für das Matrixelement von $\vec{r}$ erhalten wir dann

$$\langle j_1, m_1|\vec{r}|j_2, m_2\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\langle j_1|r|j_2\rangle \left[C^{j_1 m_1}_{10, j_2 m_2}\vec{e}_z - C^{j_1 m_1}_{11, j_2 m_2}\vec{e}_- + C^{j_1 m_1}_{1-1, j_2 m_2}\vec{e}_+\right]. \tag{26}$$

D.h. die Abhängigkeit des Matrixelements von $m_{1,2}$ ist durch diese generellen Überlegungen festgelegt.

Um dieses Ergebnis zu erweitern, können wir alle Operatoren klassifizieren, indem wir ihre Transformationseigenschaften unter Drehungen betrachten. Die Operatoren, die sich wie $Y_{l\mu}(\theta, \varphi)$ transformieren, nennen wir Tensoroperatoren. Für Tensoroperatoren gilt das Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle \alpha', j', m' | \hat{O}_{l\mu} | \alpha, j, m \rangle = (-1)^{j'-m'} \begin{pmatrix} j' & l & j \\ -m' & \mu & m \end{pmatrix} \langle \alpha', j' | O_l | \alpha, j \rangle, \tag{27}$$

wobei α, α' die übrigen Quantenzahlen sind, die wir brauchen, um den Quantenzustand vollständig definieren zu können. Die Abhängigkeit des Matrixelements von m', μ und m ist auf der rechten Seite der Gleichung explizit ausgeschrieben. $\langle \alpha', j' | O_l | \alpha, j \rangle$ ist das sogenannte "reduzierte Matrixelement", das nicht mehr von μ, m und m' abhängt. Wir können es ausrechnen, indem wir die linke Seite für eine feste Wahl von μ, m und m' berechnen und durch den entsprechenden Vorfaktor teilen. Zusammen mit dem $3j$-Symbol legt das reduzierte Matrixelement dann die vollen Matrixelemente für alle anderen Werte von μ, m und m' fest.

Wie können wir diese Tensoroperatoren konstruieren? Für den Operator $\vec{r}$ haben wir gesehen, dass wir ihn in Kugelkoordinaten schreiben müssen. Das gilt natürlich für alle Vektoroperatoren. Als anderes Beispiel betrachten wir den Rang-2 Tensoroperator $T_{ij} = \vec{r}_i \vec{r}_j$. Wir schreiben ihn um zu

$$T_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{3} \vec{r}^2 + \left(r_i r_j - \frac{\delta_{ij}}{3} \vec{r}^2 \right). \tag{28}$$

Der erste Term ist die Spur, der Zweite ist ein spurloser Rang-2 Tensor. Die Spur ist proportional zu $\vec{r}^2$, was bedeutet, dass es sich um einen Skalaroperator handelt, sodass das Matrixelement

$$\langle j', m' | \delta_{ij} \vec{r}^2 | j, m \rangle \tag{29}$$

uns schon bekannt ist (siehe Gl. (10)).

Wir wollen dann das Matrixelement des spurlosen Rang-2 Tensors berechnen

$$\langle j', m' | \tilde{T}_{ij} | j, m \rangle = \langle j', m' | \left(r_i r_j - \frac{\delta_{ij}}{3} \vec{r}^2 \right) | j, m \rangle. \tag{30}$$

Um dieses Matrixelement berechnen zu können, schreiben wir den Tensor in Kugelkomponenten um. D.h., wir betrachten

$$a^i b^j \tilde{T}_{ij} = (\vec{a} \cdot \vec{r})(\vec{b} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{3} \vec{a} \cdot \vec{b}\, r^2, \tag{31}$$

wobei $\vec{a}$ und $\vec{b}$ zwei zusätzliche konstante Vektoren sind. Wir schreiben den obigen Ausdruck in Kugelkomponenten um

$$\begin{aligned} a^i b^j \tilde{T}_{ij} = {} & a_+ b_+ r_- r_- + a_- b_- r_+ r_+ + (a_- b_z + a_z b_-)\, r_+ r_z + (a_+ b_z + a_z b_+)\, r_- r_z \\ & + (a_+ b_- + a_- b_+) \left(r_+ r_- - \frac{1}{3} r^2 \right) + a_z b_z \left(r_z^2 - \frac{1}{3} r^2 \right). \end{aligned} \tag{32}$$

Wir sehen, dass es hier sechs unterschiedliche, r-abhängige Strukturen gibt. Wir wollen jetzt zeigen, dass alle diese Strukturen proportional zu $Y_{2m}(\theta,\varphi)$ sind. In der Tat gilt

$$\begin{aligned} r_\pm r_\pm &= r_{\mp 1} r_{\mp 1} \sim Y_{1,\mp 1} Y_{1,\mp 1} \sim \sin^2\theta\; e^{\mp 2i\phi} \sim Y_{2,\mp 2}(\theta,\varphi), \\ r_\pm r_z &\sim r_{\mp 1} r_0 \sim Y_{1,\mp 1} Y_{1,0} \sim \sin\theta\cos\theta\; e^{\mp i\phi} \sim Y_{2,\mp 1}(\theta,\varphi). \end{aligned} \tag{33}$$

Die zwei übrigen Strukturen sind identisch. Um das zu sehen, müssen wir r^2 durch $2r_+r_- + r_z^2$ ersetzen. Wir erhalten

$$r_+r_- - \frac{1}{3}r^2 = \frac{1}{3}\left(r_+r_- - r_z^2\right), \quad r_z r_z - \frac{1}{3}r^2 = -\frac{2}{3}\left(r_+r_- - r_z^2\right), \tag{34}$$

Das heißt, dass die einzige r-abhängige Struktur, die wir brauchen

$$r_+r_- - r_z^2 \sim -Y_{1,1}Y_{1,-1} - Y_{1,0}Y_{1,0} \sim \frac{\sin^2\theta}{2} - \cos^2\theta \sim 1 - 3\cos^2\theta \sim Y_{2,0}(\theta,\phi), \tag{35}$$

auch eine Kugelflächenfunktion ist. Wir sehen, dass alle Kugelkomponenten des symmetrischen, spurlosen Rang-2 Tensors proportional zu $Y_{2,m}$ sind; d.h., dass die Matrixelemente von Kugelkomponenten des Tensors das Wigner-Eckart-Theorem erfüllen.

Wenn wir einen allgemeinen Tensor betrachten, gibt eine kleine Änderung. Als Beispiel betrachten wir einen Rang-2 Tensoroperator $T_{ij} = \vec{r}_i \vec{p}_j$. Wir schreiben ihn um als

$$T_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{3}\vec{r}\cdot\vec{p} + \frac{1}{2}\left(r_i p_j - r_j p_i\right) + \frac{1}{2}\left(r_i p_j + r_j p_i - \frac{2}{3}\delta_{ij}\vec{r}\cdot\vec{p}\right). \tag{36}$$

Die drei Strukturen auf der rechten Seite entsprechen einem Skalaroperator $\sim \delta_{ij}\vec{r}^2$ (Spur des Tensors), einem Vektoroperator $(r_i p_j - r_j p_i) \sim \epsilon_{ijk} L_k$ (anti-symmetrische Komponente des Tesnsors) und einem symmetrischen, spurlosen Rang-2 Tensoroperator

$$r_i p_j + r_j p_i - \frac{2}{3}\delta_{ij}\vec{r}\cdot\vec{p}, \tag{37}$$

der die $L = 2$ Beiträge beschreibt.

Ein sehr wichtiges Beispiel der Verwendung des Wigner-Eckart-Theorems stellt das sogenannte “Vektormodell” dar. In diesem Fall geht es um die Berechnung von Matrixelementen der Vektoroperatoren

$$\langle \alpha j m' | \vec{V} | \alpha j m \rangle. \tag{38}$$

Wenn wir uns dieses Matrixelement klassisch vorstellen – als ein Integral über alle mögliche Orientierungen des Systems, die mit dem gegebenen Drehimpuls $\vec{J}$ kompatibel sind – können wir behaupten, dass nach der Integration das Integral proportional zu $\vec{J}$ sein muss. Um das mathematisch auszudrücken, schreiben wir

$$\vec{V} = \frac{\vec{J}\cdot\vec{V}}{\vec{J}^2}\,\vec{J} + \vec{V}_\perp, \quad \vec{V}_\perp \cdot \vec{J} = 0, \tag{39}$$

und dann

$$\langle \alpha j m' | \vec{V} | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha j m' | \vec{V} \cdot \vec{J} | \alpha j m \rangle}{j(j+1)} \langle \alpha j m' | \vec{J} | \alpha j m \rangle, \tag{40}$$

weil $\langle \alpha j m' | \vec{V}_\perp | \alpha j m \rangle = 0$ ist.

Dieses Argument ist etwas "hand-waving", aber wir können es um einiges solider machen. Ein Vektoroperator ist ein Tensoroperator mit $l = 1$ und $m_z = \mu = 1, 0, -1$. Das bedeutet

$$\langle \alpha j m' | \vec{V}_\mu | \alpha j m \rangle = (-1)^{j-m'} \begin{pmatrix} j & 1 & j \\ -m' & \mu & m \end{pmatrix} \langle \alpha j | V | \alpha j \rangle. \tag{41}$$

Wir können eine fast identische Gleichung für $\vec{V} = \vec{J}$ schreiben, weil $\vec{J}$ auch ein Vektoroperator ist

$$\langle \alpha j m' | \vec{J}_\mu | \alpha j m \rangle = (-1)^{j-m'} \begin{pmatrix} j & 1 & j \\ -m' & \mu & m \end{pmatrix} \langle \alpha j | J | \alpha j \rangle. \tag{42}$$

Wir kombinieren diese Formeln und schreiben sie um zu

$$\langle \alpha j m' | V_\mu | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha j | V | \alpha j \rangle}{\langle \alpha j | J | a j \rangle} \langle \alpha j m' | J_\mu | \alpha j m \rangle. \tag{43}$$

Jetzt betrachten wir das Matrixelement eines Skalarprodukts zwischen $\vec{J}$ und $\vec{V}$

$$\begin{aligned}
\langle \alpha j m' | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha j m \rangle &= \sum_\mu \sum_{m''} (-1)^\mu \langle \alpha j m' | \vec{J}_\mu | \alpha j m'' \rangle \langle \alpha j m'' | \vec{V}_{-\mu} | \alpha j m \rangle \\
&= \sum_{\mu, m''} (-1)^{\mu + 2j - m' - m''} \begin{pmatrix} j & 1 & j \\ -m' & \mu & m'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & j \\ -m'' & -\mu & m \end{pmatrix} \langle \alpha j | V | \alpha j \rangle \langle \alpha j | J | \alpha j \rangle \\
&= \frac{\delta_{m'm}}{2j+1} \langle \alpha j | V | \alpha j \rangle \langle \alpha j | J | \alpha j \rangle,
\end{aligned} \tag{44}$$

wobei der letzte Schritt aus der Orthogonalität der Wigner-Symbole folgt.[2]

Wir wiederholen die Rechnung mit $\vec{V} \to \vec{J}$ und erhalten

$$\langle \alpha j m' | \vec{J} \cdot \vec{J} | \alpha j m \rangle = j(j+1) \delta_{m'm} \delta_{j'j} = \frac{\delta_{m'm}}{2j+1} \langle \alpha j | J | \alpha j \rangle^2. \tag{45}$$

Das Verhältnis von Gl. (44) und Gl. (45) liefert

$$\frac{\langle \alpha j' m' | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha j m \rangle}{\langle \alpha j' m' | \vec{J} \cdot \vec{J} | \alpha j m \rangle} = \frac{\langle \alpha j | V | \alpha j \rangle}{\langle \alpha j | J | \alpha j \rangle}. \tag{46}$$

Wir setzen diesen Ausdruck in Gl. (43) ein, benutzen $\langle \alpha j m | \vec{J}^2 | \alpha j m \rangle = j(j+1)$ und erhalten so das gewünschte Ergebnis Gl. (40).

[2] Siehe Vorlesung 2.