Wigner-Eckart-Theorem

Betrachte ein $T_q^{(k)}$ einen irreduziebler Tensor $k-$ter Stufe. Dieser verhält sich wie ein Zustandsvektor bei einer Drehung. Dieser Tensor ist proportional zu einem Ket $T_q^{(k)} \sim |k,q\rangle$ (Beweis siehe). D.h wir können folgende Linearkombination

$$|JM\rangle = \sum_{m_1,m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | jm\rangle \, |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = \sum_{m_1,m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | jm\rangle \, |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \tag{1}$$

dem Tensor mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Koeffizienten als Ket-Vektor ausdrücken

$$|JM\rangle = \sum_{m,q} \langle jk; mq | JM\rangle \, |k,q\rangle \otimes |jm\rangle = \sum_{m,q} \langle jk; mq | JM\rangle \, T_q^{(k)} \, |jm\rangle \tag{2}$$

Da es noch andere Quantenzahlen vorkommen können wie Enegie multiplizieren wir die Gleichung (2) mit einem Ket $|\alpha\rangle$ der symbolisch für andere Quantenzahlen steht.

$$|\alpha\rangle \cdot |JM\rangle = |\alpha\rangle \cdot \sum_{m,q} \langle jk; mq | JM\rangle \, |k,q\rangle \otimes |jm\rangle \tag{3}$$

$$\Leftrightarrow |\alpha; JM\rangle = \sum_{m,q} \langle jk; mq | JM\rangle \, T_q^{(k)} \, |\alpha; jm\rangle \tag{4}$$

Wir möchten die Summe und Clebsch-Gordan-Koeffizienten auf die andere Seite bringen. Dazu möchten wir folgende Relation herleiten:

$$\begin{aligned}
\langle JM|JM\rangle &= \langle JM| \, \mathbb{1} \, |JM\rangle && (5)\\
&= \langle JM| \left(\sum_{mq} |jk; mq\rangle \langle jk; mq| \right) |JM\rangle && (6)\\
&= \sum_{mq} \langle JM|jk; mq\rangle \langle jk; mq|JM\rangle && (7)\\
&= \sum_{mq} | \langle jk; mq|JM\rangle |^2 && (8)\\
&\overset{!}{=} 1 && (9)
\end{aligned}$$

Die Relation lautet nun:

$$\sum_{mq} | \langle jk; mq|JM\rangle |^2 = 1 \tag{10}$$

Unter Ausnutzung der Relation (10) folgt für die Gleichung (3):

$$\mathbb{1} \, |\alpha; JM\rangle = \sum_{m,q} \langle jk; mq|JM\rangle \, T_q^{(k)} \, |\alpha; jm\rangle \tag{11}$$

$$\sum_{JM} |\alpha; JM\rangle \underbrace{\langle \alpha; JM|\alpha; JM\rangle}_{=1=\sum_{mq} |\langle jk;mq|JM\rangle|^2} = \sum_{m,q} \langle jk; mq|JM\rangle \, T_q^{(k)} \, |\alpha; jm\rangle \tag{12}$$

$$\sum_{JM} |\alpha; JM\rangle \cancel{\sum_{mq}} | \langle jk; mq|JM\rangle |^{\cancel{2}} = \cancel{\sum_{m,q} \langle jk; mq|JM\rangle} T_q^{(k)} \, |\alpha; jm\rangle \tag{13}$$

Damit erhalten wir:

$$T_q^{(k)} \, |\alpha; jm\rangle = \sum_{JM} |\alpha; JM\rangle \langle jk; mq|JM\rangle \tag{14}$$

Multiplizieren wir mit $\langle \alpha; jm|$

$$\langle \alpha; jm| \, T_q^{(k)} \, |\alpha; jm\rangle = \sum_{JM} \underbrace{\langle \alpha; jm|\alpha; JM\rangle}_{\delta_{jJ}\delta_{mM}} \langle jk; mq|JM\rangle \tag{15}$$

Wegen der Orthogonalitätsbegingung bleibt von der Summe nur ein Summand übrig, bei dem gilt $j = J$ und $m = M$. Gleichung (15) können wir nun schreiben:

$$\langle\alpha; jm|\, T_q^{(k)}\, |\alpha; jm\rangle = \underbrace{\langle\alpha; jm|\alpha; jm\rangle}_{\text{reduziertes Matrixelement}} \langle jk; mq|jm\rangle \tag{16}$$

Dabei ist das reduzierte Matrixelement unabhängig von der Quantenzahl m. Das wird im Anschluss bewiesen. Wir erhalten das Wigner-Eckart-Theorem

$$\boxed{\langle\alpha; jm|\, T_q^{(k)}\, |\alpha; jm\rangle = \langle jk; mq|jm\rangle\, \langle\alpha; j||T_k^{(q)}||\alpha; j\rangle} \tag{17}$$

Das reduzierte Matrixelement hat den Vorteil, dass man es für ein gegebene α, j nur einmal berechnen muss. Die restlichen Matrixelemente des Tensors die von m abhängig sind bekommt man von den Clebsch-Gordan-Koeffizienten, die man nachschlägt oder ebenso berechnen kann. Man findet in der Literatur das Theorem mit unterschiedlichen Vorfaktoren wie beispielsweise $\frac{1}{\sqrt{2j+1}}$, dieser ist aber Konvenstion (Tiefgründige Bedeutung ist uns nicht bekannt).

Behandlung des Tensors als Zustandsvektor

Wir wollen zeigen dass sich ein irreduziebler Tensor $k-$ter Stufe wie ein Zustandsvektor unter Rotation transformiert. Für die Transformation eines Zustandsvektors $|JM\rangle$ gilt mit $U(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z}$

$$\begin{aligned} U(R)|J,M\rangle &= \mathbb{1}\cdot U(R)|J,M\rangle \qquad U(R) \equiv U(\alpha,\beta,\gamma) \\ &= \sum_{M'=-J}^{J} |J,M'\rangle\langle J,M'|U(R)|J,M\rangle \\ &= \sum_{M'=-J}^{J} \underbrace{\langle J,M'|U(R)|J,M\rangle}_{D^{(J)}_{M'M}(R)} |J,M'\rangle \\ &= \sum_{M'=-J}^{J} D^{(J)}_{M'M}(R)|J,M'\rangle \end{aligned} \tag{18}$$

Anderrerseits gilt

$$U(R)|J,M\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2|JM\rangle\, U\, |j_1 m_1\rangle\, |j_2 m_2\rangle \tag{19}$$

Setzen wir die Gleichungen (18) und (19) gleich

$$\sum_{M'=-J}^{J} \langle J,M'|U|J,M\rangle |J,M'\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2|JM\rangle\, U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle$$

$$\sum_{M'=-J}^{J} \sum_{m_1' m_2'} \cancel{\sum_{m_1 m_2}} \langle JM'|m_2' m_1'; j_2 j_1\rangle\, \langle j_1 j_2; m_1' m_2'|\, U(R) \cancel{\langle j_1 j_2; m_1 m_2|JM\rangle}\, |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\, |J,M'\rangle$$

$$= \cancel{\sum_{m_1 m_2}} \cancel{\langle j_1 j_2; m_1 m_2|JM\rangle} U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle$$

$$\sum_{M'=-J}^{J} \sum_{m_1' m_2'} \langle JM'|m_2' m_1'; j_2 j_1\rangle\, \underbrace{\langle j_1 j_2; m_1' m_2'|\, U\,|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle}_{\langle j_1 m_1'|U(R_1)|j_1 m_1\rangle \cdot \langle j_2 m_2'|U(R_2)|j_2 m_2\rangle} |J,M'\rangle = U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle$$

$$\sum_{M'=-J}^{J} \sum_{m_1' m_2'} \langle JM'|m_2' m_1'; j_2 j_1\rangle\, \underbrace{\langle j_1 m_1'|\, U(R_1)\,|j_1 m_1\rangle}_{D^{(j_1)}_{m_1' m_1}} \cdot \underbrace{\langle j_2 m_2'|\, U(R_2)\,|j_2 m_2\rangle}_{D^{(j_2)}_{m_2' m_2}} |J,M'\rangle = U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle$$

$$\sum_{M'=-J}^{J} \sum_{m_1' m_2'} \langle JM'|m_2' m_1'; j_2 j_1\rangle\, D^{(j_1)}_{m_1' m_1} \cdot D^{(j_2)}_{m_2' m_2} |J,M'\rangle = U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle$$

$$\sum_{M'=-J}^{J} \sum_{m_1' m_2'} \langle JM'|m_2' m_1'; j_2 j_1\rangle\, D^{(j_1)}_{m_1' m_1} \cdot D^{(j_2)}_{m_2' m_2} \sum_{m_1', m_2'} \langle j_1 j_2; m_1' m_2'|JM'\rangle\, |j_1 j_2; m_1' m_2'\rangle = U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle$$

$$\sum_{M'=-J}^{J} \underbrace{\sum_{m_1' m_2'} \sum_{m_1', m_2'} \langle JM'|m_2' m_1'; j_2 j_1\rangle\, \langle j_1 j_2; m_1' m_2'|JM'\rangle}_{=1(10)} D^{(j_1)}_{m_1' m_1} \cdot D^{(j_2)}_{m_2' m_2}\, |j_1 j_2; m_1' m_2'\rangle = U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle$$

$$\sum_{M'=-J}^{J} D^{(j_1)}_{m_1' m_1} \cdot D^{(j_2)}_{m_2' m_2}\, |j_1 j_2; m_1' m_2'\rangle = U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle \tag{20}$$

Daraus folgt

$$U\,|j_1 m_1\rangle\,|j_2 m_2\rangle = \sum_{M'=-J}^{J} D^{(j_1)}_{m_1' m_1} \cdot D^{(j_2)}_{m_2' m_2}\, |j_1 m_1'\rangle\,|j_2 m_2'\rangle \tag{21}$$

Für die Rotation eines Tensors gilt

$$U^{-1}(R) T_q^{(k)} U(R) = \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)} D_{qq'}^{(k)}(R^{-1}) \tag{22}$$

Ersetze R mit R^{-1} und R^{-1} mit R

$$U^{-1}(R^{-1}) T_q^{(k)} U(R^{-1}) = \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)} D_{qq'}^{(k)}(R) \tag{23}$$

Es gilt $U(R^{-1}) = U^{-1}(R)$ somit erhalten wir

$$\begin{aligned} (U^{-1})^{-1}(R) T_q^{(k)} U^{-1}(R) &= \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)} D_{qq'}^{(k)}(R) \\ U(R) T_q^{(k)} U^{-1}(R) &= \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)} D_{qq'}^{(k)}(R) \end{aligned} \tag{24}$$

Nun wenden wir den Unitären Operator $U(R)$ auf ein Produkt-Zustand aus $T_q^{(k)}$ und $|jm\rangle$. Verkürze $U(R)$ auf U

$$
\begin{aligned}
UT_q^{(k)}|jm\rangle &= UT_q^{(k)}\mathbb{1}|jm\rangle \\
&= \underbrace{UT_q^{(k)}U^{-1}}_{=\,(24)}\underbrace{U|jm\rangle}_{(18)} \\
&= \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)} D_{qq'}^{(k)} \sum_{m'=-j}^{j} D_{m'm}^{(j)}|j,m'\rangle \\
&= \sum_{q'=-k}^{k}\sum_{m'=-j}^{j} D_{qq'}^{(k)} D_{m'm}^{(j)}\, T_{q'}^{(k)}|j,m'\rangle
\end{aligned} \tag{25}
$$

Im Vergleich zur Gleichung (21) Transformiert sich der Produkt-Zustand $T_q^{(k)}|jm\rangle$ wie ein Produkt aus zwei Zustandsvektoren $|kq\rangle|jm\rangle$.

Reduziertes Matrixelement unabhängig von m

Als nächstes wollen wir beweisen, dass das reduzierte Matrixelement von der Quantenzahl m unabhängig ist. Dies lässt sich duch Anwenden des Schiebeoperators $J_\pm$ zeigen. Zur Errinerung die Eigenwertgleichung lautet

$$
J_\pm|\alpha;jm\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\,|\alpha;jm\pm 1\rangle \tag{26}
$$

Durch einsetzen von $J_\pm$ und durch ausgleichen von einem Vorfaktor lässt sich das reduzierte Matrixelement schreiben

$$
\langle\alpha;jm|\alpha;jm\rangle = \frac{1}{\sqrt{j(j+1)-m(m\mp 1)}}\langle\alpha;jm|J_\pm|\alpha;jm\mp 1\rangle \tag{27}
$$

Lässt man nun $J_\pm$ einmal auf links wirken, dabei wird $(J_\pm)^\dagger = J_\mp$

$$
\begin{aligned}
\langle\alpha;jm|\alpha;jm\rangle &= \frac{\sqrt{j(j+1)-m(m\mp 1)}}{\sqrt{j(j+1)-m(m\mp 1)}}\langle\alpha;jm\mp 1|\alpha;jm\mp 1\rangle && (28)\\
&= \langle\alpha;jm\mp 1|\alpha;jm\mp 1\rangle && (29)
\end{aligned}
$$

Aus der Gleichung (28) sieht man dass das reduzierte Matrixelement nicht von m abhängig ist. Wir können Die Gleichung (16) schreiben

$$
\langle\alpha;jm|T_q^{(k)}|\alpha;jm\rangle = \underbrace{\langle\alpha;j|\alpha;j\rangle}_{\text{reduziertes Matrixelement}}\langle jk;mq|jm\rangle \tag{30}
$$

Referenzen

- Zettili Quanten Mehanics
- Rollnik Quantentheorie 2