Wigner-Eckart の定理の証明

国広悌二 (2018 年 10 月 21 日)

次の Wigner-Eckert の定理を証明する。

$$\langle j'm';\beta|T^{(L)}_M|jm;\alpha\rangle = (jmLM|j'm')\langle j';\beta||T^{(L)}||j;\alpha\rangle. \tag{1}$$

ここで、$\langle j';\beta||T^{(L)}||j;\alpha\rangle$ は磁気量子数 m, M, m' に依存しない定数である。これを簡約行列要素 (reduced matrix element) という。

[証明]

- $T^{(L)}_M|jm;\alpha\rangle \equiv |LM;jm:\alpha\rangle$ はテンソル積 $|LM\rangle\otimes|jm\rangle$ のように変換する。実際、

$$\begin{aligned} P_R\,|LM;jm:\alpha\rangle &= P_R\{T^{(L)}_M|jm;\alpha\rangle\}, \\ &= P_R\,T^{(L)}_M P_R^{-1}P_R|jm;\alpha\rangle \\ &= \sum_{M'm'} T^{(L)}_{M'}|jm';\alpha\rangle D^{(L)}_{M'M}D^{(j)}_{m'm}, \\ &= \sum_{M'm'} |LM';jm':\alpha\rangle D^{(L)}_{M'M}D^{(j)}_{m'm}. \end{aligned} \tag{2}$$

  これは、$|LM;jm:\alpha\rangle$ が空間回転に対してテンソル積 $|LM\rangle\otimes|jm\rangle$ のように変換することを意味する。

- 上より、次のベクトルは $|J\mu\rangle$ のように変換する；

$$|J\mu;T^{(L)},j,\alpha\rangle \equiv \sum_m (jmL\mu-m|J\mu)T^{(L)}_{\mu-m}|jm;\alpha\rangle. \tag{3}$$

- これを逆に展開して、

$$T^{(L)}_M|jm;\alpha\rangle = \sum_{J'}(jmLM|J'\,M+m)|J'\,m+M;T^{(L)},j,\alpha\rangle, \tag{4}$$

  を得る。実際、左辺に $(jmLM|JM')$ を書けて $M = M'-m$ の条件のもとで m について和を取ると、左辺 = 右辺 が示される。

- (4) と $\langle j'm';\beta|$ との内積を取ると、

  $$\langle j'm';\beta|T_M^{(L)}|jm;\alpha\rangle = \sum_{J'}(jmLM|J'm+M)\langle j'm';\beta|J'm+M;T^{(L)},j,\alpha\rangle. \quad (5)$$

  ところが、$\langle j'm';\beta|J'm+M;T^{(L)},j,\alpha\rangle \propto \delta_{j'J'}\delta_{m'\,m+M}$ だから、

  $$\langle j'm';\beta|T_M^{(L)}|jm;\alpha\rangle = (jmLM|j'\,m')\langle j'm';\beta|j'm';T^{(L)},j,\alpha\rangle. \quad (6)$$

  さらに、

- $\langle j'm';\beta|j'm';T^{(L)},j,\alpha\rangle$ は m' に依存しないことが次のように示せる。($\hat{j}_- \equiv \hat{J}_-/\hbar$)

  $$\begin{aligned}\hat{j}_-|j'\,m';T^{(L)},j,\alpha\rangle &= \sqrt{(j'+m')(j'-m'+1)}|j'\,m'-1;T^{(L)},j,\alpha\rangle, \quad (7)\\ \langle j'\,m'-1;\beta|\hat{j}_- &= \sqrt{(j'+m')(j'-m'+1)}\langle j'\,m';\beta|. \quad (8)\end{aligned}$$

  (7) に左から $\langle j'm'-1;\beta|$ を掛けると、

  $$\begin{aligned}\langle j'\,m'-1;\beta|\hat{j}_-|j'\,m';T^{(L)},j,\alpha\rangle &= \sqrt{(j'+m')(j'-m'+1)}\\ &\quad\times\langle j'\,m'-1;\beta|j'\,m'-1;T^{(L)},j,\alpha\rangle. \quad (9)\end{aligned}$$

  一方、(8) の右から $|j'\,m':T^{(L)},j,\alpha\rangle$ を掛けると、

  $$\begin{aligned}\langle j'\,m'-1;\beta|\hat{j}_-|j'\,m';T^{(L)},j,\alpha\rangle &= \sqrt{(j'+m')(j'-m'+1)}\\ &\quad\langle j'\,m';\beta|j'\,m';T^{(L)},j,\alpha\rangle. \quad (10)\end{aligned}$$

  (9) と (10) の右辺を等しいとおいて、

  $$\langle j'\,m'-1;\beta|j'\,m'-1;T^{(L)},j,\alpha\rangle = \langle j'\,m';\beta|j'\,m';T^{(L)},j,\alpha\rangle, \quad (11)$$

  を得る。これは $\langle j'm';\beta|j'm';T^{(L)},j,\alpha\rangle$ は m' に依存しないことを示している。すなわち、

  $$\langle j'm';\beta|j'm';T^{(L)},j,\alpha\rangle = \langle j';\beta||T^{(L)}||j;\alpha\rangle, \quad (12)$$

  と書ける。

- これを (6) に代入して、

  $$\langle j'm';\beta|T_M^{(L)}|jm;\alpha\rangle = (jmLM|j'm')\langle j';\beta||T^{(L)}||j;\alpha\rangle. \quad (13)$$

  を得る。これが示したい式であった。[証了]

[例]

四重極モーメント $\hat{Q}_{ij} = r_i r_j - \frac{1}{3}r^2$ は 2 階の既約テンソルである。これを球基底であらわしたものを $\hat{Q}_M$ $(M = \pm 2, \pm 1, 0)$ とする。このとき、

$$\langle j'm'; \beta | \hat{Q}_M | jm; \alpha \rangle = (jm2M|j'm') \langle j'; \beta || \hat{Q} || j; \alpha \rangle. \tag{14}$$

一方、

$$\langle j'm'; \beta | [\hat{J} \otimes \hat{J}]^{(2)}_M | jm; \alpha \rangle = (jm2M|j'm') \langle j'; \beta || [\hat{J} \otimes \hat{J}]^{(2)} || j; \alpha \rangle. \tag{15}$$

したがって、$|jm\rangle$ で張られる空間では、j と l だけに依存する係数 $a(j,l)$ を用いて

$$\hat{Q}_M = a(j,l)\, [\hat{J} \otimes \hat{J}]^{(2)}_M, \tag{16}$$

と置いてよい。直交基底では、

$$\hat{Q}_{ij} = a(j,l) \left[\frac{\hat{J}_i \hat{J}_j + \hat{J}_j \hat{J}_i}{2} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \hat{\boldsymbol{J}}^2 \right], \tag{17}$$

となる。

さらにこのとき、

$$Q \equiv \langle jj | Q_{zz} | jj \rangle = \frac{a}{3} j(2j-1), \tag{18}$$

となるので、

$$Q_{ij} = \frac{3Q}{j(2j-1)} \left[\frac{\hat{J}_i \hat{J}_j + \hat{J}_j \hat{J}_i}{2} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \hat{\boldsymbol{J}}^2 \right], \tag{19}$$

と表わすことができる。