1 Tenzorové operátory, Wigner–Eckartův teorém

Definice 1.1. Mějme ÚMP tvořenou $\hat{A}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$ a jí příslušné vlastní vektory $|a,l,m\rangle$ splňující relace

$$\begin{aligned}\hat{L}_\pm|a,l,m\rangle &= \alpha^{(\pm)}(l,m)|a,l,m\pm1\rangle,\\ \hat{L}_3|a,l,m\rangle &= \hbar m|a,l,m\rangle.\end{aligned} \tag{1.1}$$

Pak definujeme

$$\vec{L}^{(l)}_{m_1m_2} = \langle a,l,m_1|\vec{L}|a,l,m_2\rangle, \tag{1.2}$$

tedy

$$\vec{L}|a,l,m_2\rangle = \sum_{m_1}\vec{L}^{(l)}_{m_1m_2}|a,l,m_1\rangle.$$

Jedná se pouze o jiný, stručnější, zápis relací (1.1) v kartézských složkách $\vec{L}$ namísto tzv. sférických složek $\{L_+, L_-, L_3\}$; hodnoty $\vec{L}^{(l)}_{m_1m_2}$ souvisejí s $\alpha^{(\pm)}(l,m_2)$ triviálními vztahy plynoucími z převodních rovnic

$$\vec{L} = \left(\frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}, \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}, \hat{L}_3\right).$$

Důležitější je si povšimnout, že $\vec{L}^{(l)}_{m_1m_2}$ nezávisí na a, a tedy ani na volbě radiální pozorovatelné $\hat{A}$, a že aplikace $\hat{\vec{L}}$ nemění hodnotu l.

Věta 1.2. Mějme 2 posloupnosti vektorů $(|a,l_1,m_1\rangle)_{m_1=-l_1}^{l_1}$ a $(|b,l_2,m_2\rangle)_{m_2=-l_2}^{l_2}$ takových, že

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}|a,l_1,m_1\rangle &= \sum_{m'=-l_1}^{l_1}\vec{L}^{(l_1)}_{m'm_1}|a,l_1,m'\rangle,\\ \hat{\vec{L}}|b,l_2,m_2\rangle &= \sum_{m'=-l_2}^{l_2}\vec{L}^{(l_2)}_{m'm_2}|b,l_2,m'\rangle.\end{aligned}$$

Potom platí:

$$\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle = \delta_{l_1l_2}\delta_{m_1m_2}F(l_1,a,b), \tag{1.3}$$

kde F je neznámá funkce proměnných l_1, a, b (měli bychom si povšimnout především nezávislosti pravé strany rovnosti (1.3) na konkrétních hodnotách m_1, m_2).

Důkaz. Předpoklady věty, přeformulované zpět v jazyce posunovacích operátorů a L_3, je možné zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned}\hat{L}_\pm|a,l_1,m_1\rangle &= \alpha^{(\pm)}(l_1,m_1)|a,l_1,m_1\pm1\rangle,\\ \hat{L}_\pm|b,l_2,m_2\rangle &= \alpha^{(\pm)}(l_2,m_2)|b,l_2,m_2\pm1\rangle,\\ \hat{L}_3|a,l_1,m_1\rangle &= \hbar m_1|a,l_1,m_1\rangle,\\ \hat{L}_3|b,l_2,m_2\rangle &= \hbar m_2|b,l_2,m_2\rangle.\end{aligned} \tag{1.4}$$

Pomocí rozkladu (**??**) lze též odvodit, i když se předpoklady o $\hat{\vec{L}}^2$ výslovně nezmiňují,

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}^2|a,l_1,m_1\rangle &= (\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_3^2 + \hbar\hat{L}_3)|a,l_1,m_1\rangle = \\ &= \alpha^{(-)}(l_1,m+1)\alpha^{(+)}(l_1,m)|a,l_1,m_1\rangle + \hbar^2m^2|a,l_1,m_1\rangle + \hbar^2m|a,l_1,m_1\rangle = \\ &= \hbar^2 l_1(l_1+1)|a,l_1,m_1\rangle\end{aligned} \tag{1.5a}$$

a podobně

$$\hat{\vec{L}}^2|b,l_2,m_2\rangle = \hbar^2 l_2(l_2+1)|b,l_2,m_2\rangle. \tag{1.5b}$$

Zkoumejme výraz $\langle a,l_1,m_1|\hat{L}_3|b,l_2,m_2\rangle$. Operátor můžeme nechat působit na ket nebo na bra, na tom výsledek nemůže záviset. Pomocí (1.4) tak dostáváme rovnost

$$\hbar m_2\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle = \hbar m_1\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle,$$

z níž plyne, že skalární součin $\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle$ může být nenulový pouze tehdy, kdy $m_1 = m_2$.

Podobně pomocí výrazu $\langle a,l_1,m_1|\hat{\vec{L}}^2|b,l_2,m_2\rangle$ a připravených rovností (1.5) získáváme, že $\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle$ je nutně roven 0 v případech $l_1 \neq l_2$. Odsud již je skalární součin vymezen na tvar

$$\langle a,l_1,m_1|b,l_2,m_2\rangle = \delta_{l_1l_2}\delta_{m_1m_2}X, \tag{1.6}$$

kde X může záviset již jen na a, b a společných hodnotách l, m.

Pro tvrzení věty zbývá dokázat, že závislost X na $m_{1,2}$ musí být konstantní. Za tímto účelem využijeme ještě potřetí vyjádření (**??**) a, tentokrát již za předpokladů $l_1 = l_2$ a $m_1 = m_2$, vypočítáme zvlášť člen

$$\begin{aligned}\langle a,l,m|\hat{L}_-\hat{L}_+|b,l,m\rangle &= \langle a,l,m|(\hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar\hat{L}_3)|b,l,m\rangle = \\ &= \hbar^2(l(l+1) - m(m+1))\langle a,l,m|b,l,m\rangle.\end{aligned}$$

Zbývající dosud nevyzkoušená kombinace při výpočtu téhož členu je nechat působit $\hat{L}_+$ na ket a $\hat{L}_-$ na bra. Pro účinek na bra nezapomeneme, že $(\hat{L}_-)^\dagger = \hat{L}_+$, takže ve výsledku se dvakrát objeví $\alpha^{(+)}(l,m)$:

$$\begin{aligned}\langle a,l,m|\hat{L}_-\hat{L}_+|b,l,m\rangle &= \left(\hat{L}_+|a,l,m\rangle\right)^\dagger\left(\hat{L}_+|b,l,m\rangle\right) = \\ &= \left(\alpha^{(+)}(l,m)\right)^2\langle a,l,m+1|b,l,m+1\rangle = \\ &= \hbar^2(l(l+1) - m(m+1))\langle a,l,m+1|b,l,m+1\rangle.\end{aligned}$$

Porovnáním obou výsledků je zřejmé, že pro všechna m, $-l \leq m < l$

$$\langle a,l,m|b,l,m\rangle = \langle a,l,m+1|b,l,m+1\rangle$$

a tedy, že veličina X v (1.6) nezávisí na m a lze ji psát jako $F(l,a,b)$, jak tvrdí věta. □

Porozumění operátoru momentu hybnosti umožní klasifikovat tenzorové operátory. Z klasické fyziky totiž víme, že tenzorový (či skalární, vektorový) charakter veličin je dán jejich vlastnostmi při transformacích prostoru. V eukleidovských prostorech je postačující uvažovat rotace. Transformace při rotacích jsou v klasické teoretické fyzice svázány s Poissonovými závorkami se složkami momentu hybnosti, jakožto generátorů grupy rotací. Ve fyzice kvantové tedy budeme analogicky očekávat definici tenzorového operátoru založenou na komutátorech s operátory složek momentu hybnosti. Tak je motivována následující definice:

Definice 1.3. Ireducibilní tenzorový operátor k-tého řádu $\hat{\mathbb{T}}(k)$ je soubor $(2k+1)$ operátorů $(\hat{T}(k,q))_{q=-k}^{k}$ takových, že

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_3, \hat{T}(k,q)\right] &= \hbar q \hat{T}(k,q),\\ \left[\hat{L}_\pm, \hat{T}(k,q)\right] &= \alpha^{(\pm)}(k,q)\hat{T}(k,q\pm 1).\end{aligned} \tag{1.7}$$

Poznámka. Podmínky (1.7) lze ekvivalentně zapsat užitím definice 1.1

$$\left[\hat{\vec{L}}, \hat{T}(k,q)\right] = \sum_{q'=-k}^{k} \vec{L}^{(k)}_{q'q}\hat{T}(k,q'). \tag{1.8}$$

Často budeme potřebovat počítat maticový element operátoru $\hat{T}(k,q)$ v bázích $|a,l_1,m_1\rangle$, $|b,l_2,m_2\rangle$ – $\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle$ – pro různá m_1, m_2. V dalším využijeme vlastností $\hat{\vec{L}}$ ke zjednodušení výpočtů výrazů tohoto typu.

Mějme dvě ÚMP $(\hat{A},\hat{L}^2,\hat{L}_3)$, $(\hat{B},\hat{L}^2,\hat{L}_3)$ a vlastní vektory $|a,l_1,m_1\rangle$, $|b,l_2,m_2\rangle$ vyhovující podmínkám

$$\begin{aligned}\hat{A}|a,l_1,m_1\rangle &= a|a,l_1,m_1\rangle, & \hat{B}|b,l_2,m_2\rangle &= b|b,l_2,m_2\rangle,\\ \hat{L}^2|a,l_1,m_1\rangle &= \hbar^2 l_1(l_1+1)|a,l_1,m_1\rangle, & \hat{L}^2|b,l_2,m_2\rangle &= \hbar^2 l_2(l_2+1)|b,l_2,m_2\rangle,\\ \hat{L}_3|a,l_1,m_1\rangle &= \hbar m_1|a,l_1,m_1\rangle, & \hat{L}_3|b,l_2,m_2\rangle &= \hbar m_2|b,l_2,m_2\rangle.\end{aligned}$$

Uvažujme pevně zvolené a,b,l_1,l_2. Tím pádem $m_1 \in \{-l_1,\dots,l_1\}$, $m_2 \in \{-l_2,\dots,l_2\}$. Rovněž mějme definovánu složku ireducibilního tenzorového operátoru $\hat{T}(k,q)$. Upravme vektor $\hat{\vec{L}}\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle &= \left(\left[\hat{\vec{L}},\hat{T}(k,q)\right] + \hat{T}(k,q)\hat{\vec{L}}\right)|b,l_2,m_2\rangle =\\ &= \sum_{q'=-k}^{k}\vec{L}^{(k)}_{q'q}\left(\hat{T}(k,q')|b,l_2,m_2\rangle\right) + \sum_{m'=-l_2}^{l_2}\vec{L}^{(l)}_{m'm_2}\left(\hat{T}(k,q)|b,l_2,m'\rangle\right).\end{aligned} \tag{1.9}$$

Při úpravě bylo užito věty 1.2 a poznámky u definice 1.3 (rovnost (1.8)). Zavedeme-li označení[1]

$$|k,q,b,l_2,m_2\rangle = \hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle,$$

[1]Pozor, nejedná se nutně o normalizované ani o vzájemně ortogonální vektory.

potom stavy $|k,q,b,l_2,m_2\rangle$ se z hlediska komutačních relací s $\hat{\vec{L}}$ chovají stejně jako stavy $|k,q\rangle|l,m\rangle$ v úloze skládání dvou momentů hybnosti, neboť

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}|k,q\rangle|l,m\rangle &= \left(\hat{\vec{L}}_{(1)}|k,q\rangle\right)|l,m\rangle + |k,q\rangle\left(\hat{\vec{L}}_{(2)}|l,m\rangle\right) = \\ &= \sum_{q'=-k}^{k} \vec{L}^{(k)}_{q'q}|k,q'\rangle|l,m\rangle + \sum_{m'=-l}^{l} \vec{L}^{(l)}_{m'm}|k,q\rangle|l,m'\rangle,\end{aligned} \tag{1.10}$$

kde bylo rovněž použito rovnosti (1.8). Vidíme, že výrazy (1.9) a (1.10) jsou formálně stejné.

Díky této shodě můžeme zadefinovat vlastní vektory „složeného“ momentu hybnosti

$$|z(b,k,l_2);l,m\rangle := \sum_{m_2=-l_2}^{l_2}\sum_{q=-k}^{k}(k,l_2,q,m_2|l,m)\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle, \tag{1.11}$$

uvozovky proto, že na místě složeného momentu vystupuje opět $\hat{\vec{L}}$:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2|z(b,k,l_2);l,m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|z(b,k,l_2);l,m\rangle,\\ \hat{L}_3|z(b,k,l_2);l,m\rangle &= \hbar m|z(b,k,l_2);l,m\rangle.\end{aligned}$$

Veličina z je blíže neurčená, je důležité se v ní nesnažit identifikovat vlastní číslo operátorů $\hat{A}$ ani $\hat{B}$. Je však jednoznačně určena původními hodnotami b,k,l_2.

Inverzní transformace k (1.11) zní

$$\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle = \sum_{l=|k-l_2|}^{k+l_2}\sum_{m=-l}^{l}(k,l_2,q,m_2|l,m)\,|z(b,k,l_2);l,m\rangle.$$

Vraťme se zpět k maticovému elementu a dosaďme do něj z předchozí rovnosti

$$\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle = \langle a,l_1,m_1|\left(\sum_{l=|k-l_2|}^{k+l_2}\sum_{m=-l}^{l}(k,l_2,q,m_2|l,m)\,|z(b,k,l_2);l,m\rangle\right),$$

přičemž na základě ortogonality vlastních vektorů $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$ je zřejmé, že jediný nenulový člen v celém výrazu je člen pro $l=l_1$, $m=m_1$, tedy

$$\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle = (k,l_2,q,m_2|l_1,m_1)\,\langle a,l_1,m_1|z(b,k,l_2);l_1,m_1\rangle,$$

navíc na základě věty 1.2 víme, že braket na pravé straně nezávisí na hodnotě m_1 – je pouze funkcí a, l_1 a z, kde z v sobě zahrnuje b, k a l_2. Celkově tedy

$$\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle = (k,l_2,q,m_2|l_1,m_1)\,F(a,b,k,l_1,l_2). \tag{1.12}$$

Rovnost (1.12) je matematickým vyjádřením **Wigner–Eckartova teorému**, který nám usnadňuje určování maticových elementů. Známe-li totiž $\langle a,l_1,m_1|\hat{T}(k,q)|b,l_2,m_2\rangle$ pro

jednu hodnotu q, m_1, m_2, při které je CG koeficient nenulový, známe ho díky Wigner–Eckartovu teorému (1.12) i pro libovolné jiné hodnoty stejných veličin, tj. místo $(2l_1+1)(2l_2+1)(2k+1)$ výpočtů stačí provést jediný! Za povšimnutí obzvláště stojí, že současně získáme „zadarmo" maticové elementy *různých* pozorovatelných $T(k,-k),\ldots,T(k,+k)$.

Povšimněme si CG koeficientu vystupujícího na pravé straně (1.12). Odpovídá skládání momentů hybnosti (l_2, m_2) (ket levé strany) s (k, q) (operátor) za získání (l_1, m_1) (bra levé strany). Tenzorový operátor se tedy při aplikaci na vlastní stav hybnosti chová, jako kdyby k němu přičetl další moment hybnosti, kde k hraje roli vedlejšího a q magnetického kvantového čísla. Například pro nenulovost maticového elementu musí čísla l_1, l_2, k splňovat trojúhelníkovou nerovnost. Další okamžitý výsledek je, že pro $q \neq 0$ je $\langle a, l, m|\hat{T}(k,q)|b, l, m\rangle$ nutně rovno 0.

Obvyklý způsob zápisu Wigner–Eckartova teorému využívá Wignerovy $3j$-symboly, jejichž vztah k CG koeficientům popisuje rovnost (**??**). Platí

$$\begin{aligned}\langle a, l_1, m_1|\hat{T}(k,q)|b, l_2, m_2\rangle &= (-1)^{l_1-m_1}\begin{pmatrix} l_1 & k & l_2 \\ -m_1 & q & m_2\end{pmatrix}(a, l_1 \left\|\hat{\mathbb{T}}(k)\right\| b, l_2) = \\ &= (-1)^{l_1+k-l_2}\frac{(k, l_2, q, m_2|l_1, m_1)}{(2l_1+1)^{1/2}}(a, l_1 \left\|\hat{\mathbb{T}}(k)\right\| b, l_2), \qquad (1.13)\end{aligned}$$

kde $(a, l_1 \left\|\hat{\mathbb{T}}(k)\right\| b, l_2)$ se nazývá **redukovaný maticový element** a je určen levou stranou pro jednu hodnotu q, m_1, m_2 takovou, že $\begin{pmatrix} l_1 & k & l_2 \\ -m_1 & q & m_2\end{pmatrix} \neq 0$. Redukovaný maticový element nemá přímý fyzikální význam.

Podívejme se nyní na nejjednodušší příklady tenzorových operátorů.

(I) **Skalární operátor**, tj. ireducibilní tenzorový operátor nultého řádu. Podle (1.7) musí skalární operátor $\hat{\mathbb{T}}(0) \equiv (\hat{T}(0,0))$ splňovat

$$\left[\hat{L}_3, \hat{T}(0,0)\right] = 0, \quad \left[\hat{L}_\pm, \hat{T}(0,0)\right] = 0,$$

tedy i $\left[\hat{L}_{1,2}, \hat{T}(0,0)\right] = 0$. Tyto podmínky jinými slovy říkají, že $T(0,0)$ je invariantní vůči rotaci. Skalární operátor má jeden nenulový maticový element pro $l_2, m_2 = \text{const}$, neboť dle (1.12) je

$$\langle a, l_1, m_1|\hat{T}(0,0)|b, l_2, m_2\rangle = (0, l_2, 0, m_2|l_1, m_1)F(a, b, l_1, l_2)$$

a CG koeficient na pravé straně je nenulový jedině v případě $l_1 = l_2, m_1 = m_2$. Maticový element $\langle a, l, m|\hat{T}(0,0)|b, l, m\rangle$ bude pouze funkcí a, b, l. V tomto ohledu je i tvrzení věty 1.2 zvláštním případem W–E teorému pro jednotkový operátor $\mathbb{1}$, který splňuje požadavky kladené na $\hat{T}(0,0)$.

(II) **Vektorový operátor**. Kartézské souřadnice vektorového operátoru $\hat{\vec{V}} = (\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3)$ vyhovují komutačním relacím

$$\left[\hat{L}_j, \hat{V}_k\right] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{V}_l \qquad (1.14)$$

a vzájemně si jednoznačně odpovídají s ireducibilním tenzorovým operátorem prvního řádu $\hat{\mathbb{T}}(1) = (\hat{T}(1,1), \hat{T}(1,0), \hat{T}(1,-1))$ transformací

$$\hat{T}(1,1) = -\frac{\hat{V}_1 + i\hat{V}_2}{\sqrt{2}}, \quad \hat{T}(1,0) = \hat{V}_3, \quad \hat{T}(1,-1) = \frac{\hat{V}_1 - i\hat{V}_2}{\sqrt{2}}. \tag{1.15}$$

Příkladem vektorového operátoru jsou nám již známé operátory $\hat{\vec{X}}, \hat{\vec{P}}, \hat{\vec{L}}$. Například $\hat{\vec{L}}$ vzájemně odpovídá ireducibilnímu tenzorovému operátoru

$$\hat{\mathbb{T}}(1) = \Big(\hat{T}(1,1), \hat{T}(1,0), \hat{T}(1,-1)\Big) = \left(\frac{-1}{\sqrt{2}}\hat{L}_+, \hat{L}_3, \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{L}_-\right),$$

neboť jsou splněny podmínky (1.7)

$$\big[\hat{L}_3, \hat{T}(1,m)\big] = m\hat{T}(1,m), \quad \big[\hat{L}_\pm, \hat{T}(1,m)\big] = \alpha^{(\pm)}(1,m)\hat{T}(1,m\pm 1),$$

pro všechna $m \in \{-1,0,1\}$.

Příklad. Mějme definován vektorový operátor $\hat{\vec{V}}$ a ireducibilní tenzorový operátor prvního řádu $\hat{\mathbb{T}}(1)$ definován dle (1.15). Pokusíme se najít střední hodnotu první a druhé složky operátoru $\hat{\vec{V}}$ ve stavu popsaném vektorem $|\beta, l, m\rangle$ (hledáme tedy hodnoty součinů $\langle\beta, l, m|\hat{V}_{1,2}|\beta, l, m\rangle$). Platí

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

Potřebujeme zjistit, jak vypadají hodnoty maticových elementů

$$\langle\beta, l, m|\hat{T}(1,\pm 1)|\beta, l, m\rangle,$$

neboť střední hodnoty $\hat{V}_1, \hat{V}_2$ jsou jejich lineární kombinací. Podle Wigner–Eckartova teorému (1.12) platí

$$\langle\beta, l, m|\hat{T}(1,\pm 1)|\beta, l, m\rangle = (1, l, \pm 1, m|l, m)\langle\beta, l, m|z(\beta, l), l, m\rangle.$$

Jelikož CG koeficienty na pravé straně jsou rovny nule (je porušeno pravidlo součtu m), jsou nulové rovněž hledané střední hodnoty operátorů $\hat{V}_1, \hat{V}_2$.

Pro další příklady bude užitečné následující tvrzení.

Věta 1.4. Mějme dánu ÚMP $(\hat{A}, \hat{L}^2, \hat{L}_3)$ a k ní příslušející bázi vlastních vektorů $(|a, l, m\rangle)$. Dále mějme dán vektorový operátor $\hat{\vec{V}}$. Potom pro $l \neq 0$ platí

$$\langle a, l, m'|\hat{\vec{V}}|a, l, m\rangle = \langle a, l, m'|\frac{\hat{\vec{L}} \cdot (\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{V}})}{\hat{L}^2}|a, l, m\rangle. \tag{1.16}$$

Důkaz. Poznamenejme, že inverze operátoru $\hat{L}^2$ se nejsnáze definuje pomocí spektrálního rozkladu: na vektor $|a,l,m\rangle$ působí dle vztahu

$$\frac{1}{\hat{L}^2}|a,l,m\rangle = \frac{1}{\hbar^2 l(l+1)}|a,l,m\rangle.$$

Podívejme se, zdali spolu nekomutují operátory $\hat{\vec{L}}$ a $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}}$

$$\left[\hat{L}_j, \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}}\right] = \hat{L}_i\left[\hat{L}_j,\hat{V}_i\right] + \left[\hat{L}_j,\hat{L}_i\right]\hat{V}_i.$$

Výraz upravíme dále užitím komutačních relací vektorových operátorů (1.14)

$$\hat{L}_i\left[\hat{L}_j,\hat{V}_i\right] + \left[\hat{L}_j,\hat{L}_i\right]\hat{V}_i = \hat{L}_i i\hbar\epsilon_{jik}\hat{V}_k + i\hbar\epsilon_{jik}\hat{L}_k\hat{V}_i = i\hbar\epsilon_{jik}(\hat{L}_i\hat{V}_k + \hat{L}_k\hat{V}_i) = 0.$$

Odsud plyne, že $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}}$ je skalární operátor, totéž platí i pro $\hat{L}^2$ a potažmo jeho inverzi. Z vlastností komutátorů na součinu (**??**) pak rychle plyne, že $\frac{\hat{\vec{L}}\cdot(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}})}{\hat{L}^2}$ je vektorový operátor. Na základě Wigner–Eckartova teorému (1.12) stačí rovnost (1.16) dokázat pro konkrétní složku $\hat{\vec{V}}$ a pro konkrétní hodnoty m', m, pro něž CG koeficient $(1,l,q,m|l,m') \neq 0$. Zvolíme $q=0$, $m=m'=l$. Díky volbě $q=0$ víme, že na místě $\hat{\vec{V}}$ na levé straně rovnosti (1.16) můžeme očekávat $\hat{V}_3$. Začneme s úpravou pravé strany. Nejprve využijeme dokázané komutační relace

$$\langle a,l,l|\frac{\hat{L}_3\cdot(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}})}{\hat{L}^2}|a,l,l\rangle = \frac{\hbar l}{\hbar^2 l(l+1)}\langle a,l,l|(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}})|a,l,l\rangle,$$

kde dále skalární součin operátorů $(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{V}})$ roznásobíme a komponenty impulsmomentu vyjádříme pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_\pm$

$$\frac{1}{\hbar(l+1)}\langle a,l,l|\left(\hat{L}_3\hat{V}_3 + \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)\hat{V}_1 + \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)\hat{V}_2\right)|a,l,l\rangle.$$

Operátor $\hat{L}_-$ necháme působit na bra $\langle a,l,l|$ (což dá nulu). Využijeme komutace operátorů $\left[\hat{L}_3,\hat{V}_3\right]$, operátor $\hat{L}_3$ necháme působit a celý výraz roztrhneme na dvě části

$$\frac{l}{l+1}\langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle + \frac{1}{2\hbar(l+1)}\langle a,l,l|\hat{L}_+(\hat{V}_1 - i\hat{V}_2)|a,l,l\rangle$$

a výraz $\hat{V}_1 - i\hat{V}_2$ převedeme na složky tenzorového operátoru užitím (1.15): $\hat{V}_1 - i\hat{V}_2 = \sqrt{2}\hat{V}(1,-1)$. Zpětným dosazením potom dostáváme

$$\frac{l}{l+1}\langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}\hbar(l+1)}\langle a,l,l|\hat{L}_+\hat{V}(1,-1)|a,l,l\rangle =$$

$$= \frac{l}{l+1}\langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}\hbar(l+1)}\langle a,l,l|\left[\hat{L}_+,\hat{V}(1,-1)\right] + \hat{V}(1,-1)\hat{L}_+|a,l,l\rangle.$$

Působení $\hat{L}_+$ na pravou stranu braketu dává nulu, zatímco komutátor $\left[\hat{L}_+,\hat{V}(1,-1)\right]$ je dle (1.7) roven

$$\left[\hat{L}_+,\hat{V}(1,-1)\right] = \alpha^{(+)}(1,-1)\hat{V}(1,0) = \sqrt{2}\hbar\hat{V}_3.$$

Dosazením pak dostáváme

$$\left(\frac{l}{l+1}+\frac{1}{l+1}\right)\langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle = \langle a,l,l|\hat{V}_3|a,l,l\rangle,$$

což bylo dokázati. Pomocí Wigner–Eckartova teorému můžeme odůvodnit platnost rovnosti pro všechny složky. □

Příklad. Uvažujme systém složený ze dvou podsystémů. Máme určit střední hodnotu výsledku měření třetí komponenty impulsmomentu prvního podsystému provedených ve společném vlastním stavu kvadrátů impulsmomentů obou podsystémů, třetí komponenty impulsmomentu celého systému a kvadrátu impulsmomentu celého systému.

Střední hodnota 3. složky impulsmomentu 1. částice je dána maticovým elementem

$$\langle l_1,l_2;l,m|\hat{L}_{(1)3}|l_1,l_2;l,m\rangle,$$

který užitím věty 1.4 přechází na

$$\langle l_1,l_2;l,m|\frac{\hat{L}_3\cdot(\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)})}{\hat{L}^2}|l_1,l_2;l,m\rangle = \frac{m}{\hbar l(l+1)}\langle l_1,l_2;l,m|\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)}|l_1,l_2;l,m\rangle,$$

kde vyjádřením součinu operátorů $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)}$ ve tvaru[2]

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

dostáváme hledaný výsledek

$$\langle l_1,l_2;l,m|\hat{L}_{(1)3}|l_1,l_2;l,m\rangle = \frac{\hbar m}{2l(l+1)}\left(l_1(l_1+1)+l(l+1)-l_2(l_2+1)\right).$$

Věta 1.4 nám nedá odpověď pro $l=0$ (získaný výsledek na $l=0$ nelze ani rozšířit), ale tím zbývá jediná neznámá

$$\langle l_1,l_2;0,0|\hat{L}_{(1)3}|l_1,l_2;0,0\rangle,$$

a to ještě jedině v případě $l_1=l_2$, protože jinak by hodnota $l=0$ nebyla dosažitelná kvůli trojúhelníkové nerovnosti. V tomto případě získáme výsledek 0 snadno na základě symetrie mezi $\hat{L}_{(1)}$ a $\hat{L}_{(2)}$ a známé střední hodnoty $\langle\hat{L}_3\rangle = \langle\hat{L}_{(1)3}+\hat{L}_{(2)3}\rangle = 0$.

[2]Operátory různých složek $\hat{\vec{L}}$ a $\hat{\vec{L}}_{(1)}$ nekomutují, ale stejných složek ano; díky tomu $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}}_{(1)} = \hat{\vec{L}}_{(1)}\cdot\hat{\vec{L}}$. Bez tohoto pozorování by použitý rozklad nefungoval.

Příklad. Užijte Wigner–Eckartova teorému k výpočtu Starkova jevu v poruchové teorii do 1. řádu pro základní a první excitovaný stav elektronu v atomu vodíku.

Starkovým jevem nazýváme rozštěpení spektrálních čar atomu vlivem homogenního vnějšího elektrostatického pole. Elektron atomu vodíku v homogenním elektrostatickém poli $\vec{E} = (0, 0, E)$ můžeme popsat hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\hat{\vec{X}}|} + eE\hat{X}_3.$$

Poslední člen budeme považovat za malou opravu $\hat{H}_0$ popisující atom vodíku bez vnějšího elektrického pole. Vlastní funkce $\hat{H}_0$, které označíme $|n, l, m\rangle$, splňují

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0|n,l,m\rangle &= \frac{-R}{n^2}|n,l,m\rangle, \\
\hat{L}^2|n,l,m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|n,l,m\rangle, \quad l \in \{0,1,\dots,n-1\}, \\
\hat{L}_3|n,l,m\rangle &= \hbar m|n,l,m\rangle, \qquad\quad m \in \{-l,\dots,l\},
\end{aligned}$$

kde R značí Rydbergovu energii, která pro atom vodíku nabývá hodnoty $R \approx 13,6eV$. n nazýváme hlavní kvantové číslo ($n = 1, 2, \dots$). Při $n = 1$ mluvíme o základním stavu, $n = 2$ o 1. excitovaném atd. Je zřejmé, že mimo základní stav jsou všechny hladiny energie degenerované. Poslední člen hamiltoniánu chápeme jako poruchový člen. Z výše uvedeného plyne nutnost použít poruchové teorie pro degenerované spektrum (viz [**?**]). Dle této teorie je naším úkolem najít matici $\mathbb{B}$ s elementy tvaru

$$\mathbb{B}_{ij} = \mathbb{B}_{(L,M),(l,m)} = \langle n, L, M|eE\hat{X}_3|n, l, m\rangle, \tag{1.17}$$

jejíž vlastní hodnoty představují 1. opravy energie. V dalším budeme uvažovat maticový element bez eE.

Víme, že k vektorovému operátoru $\hat{\vec{X}}$ existuje ireducibilní tenzorový operátor 1. řádu $\hat{\mathbb{T}}(1)$ tak, že $\hat{X}_3 = \hat{T}(1, 0)$ (viz (1.15)). Tím máme vše připraveno k nasazení Wigner–Eckartova teorému, jež použijeme zapsaný ve tvaru (1.13). Věnujme se nejprve základnímu stavu. Zde máme jediný možný maticový element

$$\langle 1,0,0|\hat{T}(1,0)|1,0,0\rangle = (1,0,0,0|0,0)(-1)(1,0\,\|\hat{\mathbb{T}}(1)\|\,1,0).$$

Díky nulovosti CG koeficientu na pravé straně (porušena trojúhelníková nerovnost mezi hodnotami $1, 0, 0$) můžeme prohlásit, že ke Starkově jevu na základním stavu při poruchové teorie do prvního řádu nedochází.[3]

Přistupme k 1. excitovanému stavu. Zde musíme obdržet matici 4×4, neboť ve vlastním vektoru $|2, l, m\rangle$ musí uspořádaná dvojice (l, m) procházet množinu $\{(0, 0), (1, -1), (1, 0), (1, 1)\}$. Dále o hledané matici předem víme, že bude samosdružená, neboť

$$\langle n, L, M|\hat{X}_3|n, l, m\rangle = \langle n, l, m|\hat{X}_3|n, L, M\rangle^*.$$

[3]Poruchová teorie do druhého řádu by vedla k posunu energetické hladiny i pro základní stav.

Využijme opět Wigner–Eckartova teorému k určení maticových elementů

$$\langle 2, L, M|\hat{T}(1,0)|2, l, m\rangle = (1, l, 0, m|L, M)\frac{(-1)^{L+1-l}}{(2L+1)^{1/2}}(2, L\,\|\hat{\mathbb{T}}(1)\|\,2, l). \tag{1.18}$$

Snadno nalezneme možné hodnoty (l, m, L, M), aby CG koeficient byl triviálně nenulový. Zůstane nám pět možných kandidátů na nenulový maticový element

$$\langle 2, 1, 0|\hat{X}_3|2, 0, 0\rangle, \tag{1.19a}$$
$$\langle 2, 0, 0|\hat{X}_3|2, 1, 0\rangle, \tag{1.19b}$$
$$\langle 2, 1, -1|\hat{X}_3|2, 1, -1\rangle, \tag{1.19c}$$
$$\langle 2, 1, 1|\hat{X}_3|2, 1, 1\rangle, \tag{1.19d}$$
$$\langle 2, 1, 0|\hat{X}_3|2, 1, 0\rangle, \tag{1.19e}$$

CG koeficient vystupující na pravé straně posledního maticového elementu je rovněž nulový (již netriviálně). Zbývají nám 4 kandidáti, které již musíme napočítat přímo z tvarů vlastních vektorů. Zde jsou jejich explicitní vyjádření:

$$|2,0,0\rangle = \frac{(1-\rho/2)e^{-\rho/2}}{\sqrt{8\pi a_0^3}}, \quad |2,1,0\rangle = \frac{\rho e^{-\rho/2}\cos(\vartheta)}{\sqrt{32\pi a_0^3}}, \quad |2,1,1\rangle = \frac{\rho e^{-\rho/2}\sin(\vartheta)e^{i\varphi}}{\sqrt{64\pi a_0^3}},$$

kde a_0 představuje Bohrův poloměr, $\rho = r/a_0$. Přešli jsme ke sférickým souřadnicím $(x, y, z) \mapsto (\rho, \vartheta, \varphi)$ s jakobiánem $|\mathscr{J}| = a_0^3\rho^2\sin(\vartheta)$. Transformace ovlivnila i vyjádření operátoru $\hat{X}_3 = a_0\rho\cos(\vartheta)$.

Určeme nyní maticový element (1.19d) přímo z definice skalárního součinu. Po pečlivém dosazení a úpravě integrandu dostáváme

$$\langle 2, 1, 1|\hat{X}_3|2, 1, 1\rangle = \frac{a_0}{64\pi}\int_{\mathbb{R}^+} d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \rho^5 e^{-\rho}\sin^3(\vartheta)\cos(\vartheta) = 0.$$

To ovšem znamená, že redukovaný maticový element na pravé straně (1.18) musí být pro $l = L = 1$ nulový. Tím pádem je nulový i maticový element (1.19c). Maticový element (1.19b) určíme stejným postupem

$$\langle 2, 0, 0|\hat{X}_3|2, 1, 0\rangle = \frac{a_0}{16\pi}\int_{\mathbb{R}^+} d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \rho^4(1-\rho/2)e^{-\rho}\sin(\vartheta)\cos^2(\vartheta) = -3a_0$$

a jelikož maticový element (1.19a) je jeho komplexním sdružením, musí být

$$\langle 2, 1, 0|\hat{X}_3|2, 0, 0\rangle = -3a_0.$$

Vraťme se nyní k původní úloze (1.17) a sepišme naše výsledky do matice[4]

$$\mathbb{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -3eEa_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3eEa_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Spektrum obsahuje vlastní čísla $\sigma_{\mathbb{B}} = \{0, \pm 3eEa_0\}$. Dle poruchové teorie do 1. řádu tedy dojde k rozštěpení prvního excitovaného stavu na 3 energie: $E_0 = -R/4$ s degenerací 2 a $E_{1,2} = -R/4 \pm 3eEa_0$, každá s degenerací 1 (podle algebraické násobnosti vlastních čísel matice $\mathbb{B}$). Dospěli jsme k výsledku, který je ve shodě s výsledkem získaným odlišným postupem v [**?**].

Poznámka. Výhody Wigner–Eckartova bychom docenili až na vyšších excitovaných stavech, popř. při vyšších řádech poruchové teorie. Již při druhém excitovaném stavu by matice $\mathbb{B}$ měla rozměr 9×9.

[4] Indexaci řádkových a sloupcových prvků můžeme volit dle libosti. Musíme však zachovat stejnou indexaci v řádku a sloupci. V našem příkladě volíme výše uvedené pořadí $((0,0),(1,-1),(1,0),(1,1))$.