

Tema 2

Tensors i el teorema de Wigner-Eckart



Sumari

- ☐ Operadors tensorials
- ☐ Tensors cartessians i irreduïbles
- ☐ Tensors esfèrics i irreduïbles: definicions I i II
- ☐ Producte de tensors
- ☐ El teorema de Wigner-Eckart

□ Operadors tensorials

Una classe senzilla són els operadors vectorials

□ Vectors

- Hem parlat ja de vectors $\vec{x}$, $\vec{p}$, $\vec{S}$, $\vec{L}$.
- En general, en Cartessianes, $\vec{V} = (V_x, V_y, V_z) \equiv (V_1, V_2, V_3)$.
- Quines relacions han de complir els operadors V_x , V_y , i V_z baix de rotacions per tal que $\vec{V}$ sigui un operador vectorial?

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\longrightarrow \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle \\ \langle\alpha|V_i|\alpha\rangle &\longrightarrow \langle\alpha|\mathcal{D}^+(R) V_i \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle = \sum_j R_{ij} \langle\alpha|V_j|\alpha\rangle \end{aligned}$$

$$\mathcal{D}^+(R) V_i \mathcal{D}(R) = \sum_j R_{ij} V_j$$

En termes dels generadors infinitessimals $\mathcal{D}(R) = 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \hat{n} \epsilon$

$$V_i + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_i, \vec{J} \cdot \hat{n}] = \sum_j R_{ij} V_j$$



$$V_i + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_i, \vec{J} \cdot \hat{n}] = \sum_j R_{ij} V_j$$

$$\hat{n} = \hat{u}_z \Rightarrow R = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} V_x + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_x, J_z] = V_x - \epsilon V_y \\ V_y + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_y, J_z] = \epsilon V_x + V_y \\ V_z + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_z, J_z] = V_z \end{cases}$$

$$[V_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} V_k$$

$i, j, k = 1, 2, 3 \equiv x, y, z$

relacions que han de complir
les components d'un vector V_i

Rotacions finites, amb el lemma de Baker-Hausdorff

Exemples d'operadors vectorials:

posició $(x, y, z) \longrightarrow [x, L_z] = -i\hbar y ; \dots$

moment $(p_x, p_y, p_z) \longrightarrow [p_x, L_z] = -i\hbar p_y ; \dots$

□ Tensors cartessians i tensors irreduïbles

Tensors cartessians a física clàssica

$$T_{ijk\dots} \xrightarrow{R} \sum_{i'j'k'\dots} R_{ii'} R_{jj'} R_{kk'} \dots T_{i'j'k'\dots}$$

Exemple: tensor T amb la diàdica de dos vectors $\vec{U}$ i $\vec{V}$

$$T_{ij} \equiv U_i V_j$$

Òbviament satisfà les condicions

Quin problema hi ha?

Els tensors cartessians es poden descomposar en objectes que es transformen de manera diferent baix de rotacions.

Exemple: diàdica

$$U_i V_j = \frac{\vec{U} \cdot \vec{V}}{3} \delta_{ij} + \frac{U_i V_j - U_j V_i}{2} + \left(\frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{\vec{U} \cdot \vec{V}}{3} \delta_{ij} \right)$$

Escalar,
invariant per rotacions

Vector,
 $(\vec{U} \times \vec{V})_k$

Tensor 3×3 ,
simètric, traça nul·la

Descomposició formal

$$3 \times 3 = 1 \oplus 3 \oplus 5$$

$$3 \times 3 = 1 \oplus 3 \oplus 5$$

Però 1, 3 i 5 són les multiplicitats $(2\ell+1)$ per a $\ell = 0, 1$ i 2.

Ens apareixen les dimensions associades al moment angular.

Els tensors amb les bones propietats de moment angular s'anomenen **tensors esfèrics irreduïbles**.

No es poden descomposar.

Una recepta per fer tensors esfèrics irreduïbles:

Amb un vector $\vec{V}$ i els harmònics esfèrics $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

$$T_q^{(k)} \sim Y_{\ell=k, m=q}(\vec{V})$$

Exemple de rang 1

$$\begin{cases} Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \\ Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x \pm iy}{\sqrt{2}r} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} T_0^{(1)} = V_z \\ T_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$T_0^{(1)}, T_1^{(1)}, T_{-1}^{(1)}$: components esfèriques de $\vec{V}$

Però, com es transformen els harmònics esfèrics?

$$|\hat{n}\rangle \longrightarrow \mathcal{D}(R)|\hat{n}\rangle \equiv |\hat{n}'\rangle \qquad |\hat{n}\rangle = \mathcal{D}(R^{-1})|\hat{n}'\rangle$$

$$\mathcal{D}(R^{-1})|\ell m\rangle = \sum_{m'} |\ell m'\rangle \langle \ell m' | \mathcal{D}(R^{-1}) | \ell m \rangle = \sum_{m'} |\ell m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(\ell)}(R^{-1})$$

$$\underbrace{\langle \hat{n} | \mathcal{D}(R^{-1}) | \ell m \rangle}_{|\hat{n}'\rangle} = \sum_{m'} \langle \hat{n} | \ell m' \rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(\ell)}(R^{-1})$$

$$Y_{\ell m}(\hat{n}') = \sum_{m'} Y_{\ell m'}(\hat{n}) \underbrace{\mathcal{D}_{mm'}^{(\ell)}(R^{-1})}_{\mathcal{D}_{mm'}^{(\ell)*}(R)}$$

Per tensors demanarem

$$\mathcal{D}^+(R) Y_{\ell m}(\vec{V}) \mathcal{D}(R) = \sum_{m'} Y_{\ell m'}(\vec{V}) \mathcal{D}_{mm'}^{(\ell)*}(R)$$

□ Tensors esfèrics: definició I

Un tensor esfèric irreduïble de rang k ($k = 0, 1, 2, \dots$) és una quantitat de $2k+1$ components $T_q^{(k)}$, $q = -k, \dots, k$, que baix de rotacions es transforma com

$$\mathcal{D}^+(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{qq'}^{(k)*}(R) T_{q'}^{(k)}$$

Equivalentment,

$$\mathcal{D}(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}^+(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(R) T_{q'}^{(k)} .$$

És una definició general

Hi ha una altra definició equivalent en termes de conmutadors

□ Tensors esfèrics: definició II

$$\mathcal{D}(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}^+(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(R) T_{q'}^{(k)} .$$

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{n} \epsilon\right) T_q^{(k)} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{n} \epsilon\right) = \sum_{q'=-k}^k \langle kq' | 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{n} \epsilon | kq \rangle T_{q'}^{(k)}$$

$$\left[\vec{J} \cdot \vec{n} , T_q^{(k)} \right] = \sum_{q'=-k}^k \langle kq' | \vec{J} \cdot \vec{n} | kq \rangle T_{q'}^{(k)}$$

$$\hat{n} = \hat{z}$$

$$\hat{n} = \hat{x} \pm i\hat{y}$$

$$\left[J_z , T_q^{(k)} \right] = \hbar q T_q^{(k)}$$

$$\left[J_{\pm} , T_q^{(k)} \right] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1))} T_{q \pm 1}^{(k)}$$

Definició alternativa de tensor

□ Producte de tensors

Amb vectors tenim producte escalar i producte vectorial

Es poden entendre també com operacions amb tensors de rang 1

Es pot generalitzar amb tensors de rang arbitrari

teorema: Siguin $X_{q_1}^{(k_1)}$ i $Z_{q_2}^{(k_2)}$ dos tensors esfèrics irreduïbles. Aleshores

$$T_q^{(k)} = \sum_{q_1 q_2} C(k_1 k_2 k | q_1 q_2 q) X_{q_1}^{(k_1)} Z_{q_2}^{(k_2)}$$

és un tensor esfèric irreduïble de rang k .

demostració:

???

$$\mathcal{D}^+(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{qq'}^{(k)*}(R) T_{q'}^{(k)} .$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}^+(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) &= \sum_{q_1 q_2} C(k_1 k_2 k | q_1 q_2 q) \mathcal{D}^+ X_{q_1}^{(k_1)} \mathcal{D} \mathcal{D}^+ Z_{q_2}^{(k_2)} \mathcal{D} \\
&= \sum_{q_1 q_2 q'_1 q'_2} C(k_1 k_2 k | q_1 q_2 q) X_{q'_1}^{(k_1)} \mathcal{D}_{q'_1 q_1}^{(k_1)}(R^{-1}) Z_{q'_2}^{(k_2)} \mathcal{D}_{q'_2 q_2}^{(k_2)}(R^{-1})
\end{aligned}$$

Exercici:

$$\mathcal{D}_{q'_1 q_1}^{(k_1)} \mathcal{D}_{q'_2 q_2}^{(k_2)} = \sum_{k'' q' q''} C(k_1 k_2 k'' | q'_1 q'_2 q') C(k_1 k_2 k'' | q_1 q_2 q'') \mathcal{D}_{q' q''}^{(k'')}$$

$$\sum_{q_1 q_2} C(k_1 k_2 k | q_1 q_2 q) C(k_1 k_2 k'' | q_1 q_2 q'') = \delta_{k k''} \delta_{q q''}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}^+(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) &= \sum_{q'} \left(\sum_{q'_1 q'_2} C(k_1 k_2 k | q'_1 q'_2 q') X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)} \right) \mathcal{D}_{q' q}^{(k)}(R^{-1}) \\
&= \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \mathcal{D}_{q' q}^{(k)}(R^{-1}) = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \mathcal{D}_{q q'}^{(k)*}(R) \quad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$



Relació del producte tensorial amb operacions amb vectors

Amb el producte escalar:

$$\begin{aligned} T_0^{(0)} &= \sum_{q_1 q_2} C(110|q_1 q_2 0) X_{q_1}^{(1)} Z_{q_2}^{(1)} \\ &= \sum_{q_1 q_2} (-1)^{1-q_1} \frac{1}{\sqrt{3}} \underbrace{C(101|q_1 0 q_2)}_{\delta_{q_1, -q_2}} X_{q_1}^{(1)} Z_{q_2}^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{q_1} (-1)^{q_1} X_{q_1}^{(1)} Z_{-q_1}^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \vec{X} \cdot \vec{Z} \end{aligned}$$

Amb el producte vectorial: Exercici

$$T_q^{(1)} = \sum_{q_1 q_2} C(111|q_1 q_2 q) X_{q_1}^{(1)} Z_{q_2}^{(1)} = \dots \propto \vec{X} \times \vec{Z}$$

□ El teorema de Wigner-Eckart

Resultat clau de teoria de moment angular

Descrui l'element de matriu d'un tensor amb estats de bon moment angular

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle$$

És extremadament útil a moltes situacions físiques:
transicions radiatives, valors esperats, etc.

Aperitiu

La regla de selecció de terceres components

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle = 0 \quad \text{si} \quad m' \neq q + m$$

Demostració:

$$\begin{aligned} [J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)} \quad \Rightarrow \quad 0 &= \langle \alpha' j' m' | [J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle \\ &= \hbar (m' - m - q) \langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle \quad \text{c.v.d.} \end{aligned}$$

Teorema de Wigner-Eckart

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle = \underbrace{C(j k j' | m q m')}_{\text{CG}} \underbrace{\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle}_{\substack{\text{"element de matriu reduït"} \\ \text{Independent de terceres comp.}}}$$

Significat:

L'element de matriu separa en dues parts. El CG dona la part geomètrica que depèn de les "projeccions en els eixos de coordenades" (terceres components) . L'altre part s'anomena **element de matriu reduït**, no depèn de la geometria i dona la dinàmica del sistema físic.

L'element de matriu reduït no es calcula directament, sinó a través de l'element de matriu standard

$$\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle = \frac{\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle}{C(j k j' | m q m')}$$

Si coneixem l'element de matriu per a uns valors donats de les terceres components, podem trobar trivialment el d'altres valors

$$\frac{\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle}{C(j k j' | m q m')} = \frac{\langle \alpha' j' m'' | T_q^{(k)} | \alpha j m''' \rangle}{C(j k j' | m''' q m'')}$$

A vegades s'agafen altres convenis, que impliquen canviar la definició d'element de matriu reduït. Per exemple, al Sakurai:

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle = C(j k j' | m q m') \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle_S$$



$$\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle_S = \sqrt{2j+1} \langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle$$

La regla de terceres components i la relació triangular venen garantides pel CG

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle = C(j k j' | m q m') \langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle_S$$



$$\begin{cases} m + q = m' \\ \Delta(j k j') \leftrightarrow |j - k| \leq j' \leq j + k \end{cases}$$

Demostració (amb trampa...)

Def. de tensor $[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q\pm 1}^{(k)}$

$$\langle \alpha' j' m' | [J_{\pm}, T_q^{(k)}] | \alpha j m \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha' j' m' | T_{q\pm 1}^{(k)} | \alpha j m \rangle$$

I amb $J_{\pm} | \alpha j m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} | \alpha j m \pm 1 \rangle$

S'arriba a

$$\begin{aligned} \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle \alpha' j' m' \mp 1 | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \pm 1 \rangle \\ &+ \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha' j' m' | T_{q\pm 1}^{(k)} | \alpha j m \rangle \end{aligned}$$

Però..., aquesta és la mateixa relació dels CG

$$\begin{aligned} \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} C(j k j' | m q m' \mp 1) &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} C(j k j' | m \pm 1 q m') \\ &+ \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} C(j k j' | m q \pm 1 m') \end{aligned}$$

I per tant

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle \propto C(j k j' | m q m') \quad \text{cvd}$$

□ Exemples d'aplicació del teorema de Wigner-Eckart

Ex. 1.- Per un escalar $T_0^{(0)}$

$$\begin{aligned}\langle \alpha' j' m' | T_0^{(0)} | \alpha j m \rangle &= C(j 0 j' | m 0 m') \langle \alpha' j' || T^{(0)} || \alpha j \rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \langle \alpha' j' || T^{(0)} || \alpha j \rangle\end{aligned}$$

L'element de matriu és diagonal i independent de terceres components m, m' .

Ex. 2.- Per un tensor de rang 1 (un vector)

$$\langle \alpha' j' m' | V_q^{(1)} | \alpha j m \rangle = C(j 1 j' | m q m') \langle \alpha' j' || V^{(1)} || \alpha j \rangle$$

Regles de selecció dipolars.

$$\Delta m \equiv m' - m = 0, \pm 1 \quad \Delta j \equiv j' - j = 0, \pm 1$$

$$C(0 1 0 | 0 0 0) = 0 \Rightarrow j = 0 \not\rightarrow j' = 0$$

$$C(\ell_1 \ell_2 \ell_3 | 0 0 0) = 0 \quad \text{si} \quad \ell_1 + \ell_2 + \ell_3 \quad \text{senar} \Rightarrow (j, m = 0) \not\rightarrow (j, m' = 0)$$

