§ 107. Матричные элементы тензоров

В § 29 были получены формулы, определяющие зависимость матричных элементов векторной физической величины от значения проекции момента. Эти формулы являются в действительности частным случаем общих формул, решающих такую же задачу для неприводимого (см. стр. 260) тензора любого ранга [1]).

Совокупность $2k+1$ компонент неприводимого тензора ранга k (k — целое число) по своим трансформационным свойствам эквивалентна совокупности $2k+1$ сферических функций Y_{kq} ($q=-k, \ldots, k$) (см. примечание [2]) на стр. 260). Это значит, что путем составления соответствующих линейных комбинаций компонент тензора можно получить набор величин, преобразующихся при вращениях как функции Y_{kq}. Совокупность таких величин, которые мы будем обозначать здесь посредством f_{kq}, назовем *сферическим тензором* ранга k.

Так, вектору соответствует значение $k=1$, а величины f_{1q} связаны с компонентами вектора следующими формулами:

$$f_{10} = ia_z, \qquad f_{1,\pm 1} = \mp \frac{i}{\sqrt{2}}(a_x \pm i a_y) \tag{107,1}$$

(ср. (57,7)). Аналогичные формулы для тензора второго ранга имеют вид

$$\begin{gathered} f_{20} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\, a_{zz}, \qquad f_{2,\pm 1} = \pm (a_{xz} \pm i a_{yz}), \\ f_{2,\pm 2} = -\frac{1}{2}(a_{xx} - a_{yy} \pm 2i a_{xy}) \end{gathered} \tag{107,2}$$

причем $a_{xx}+a_{yy}+a_{zz}=0$) [2]).

Составление тензорных произведений из двух (или большего числа) сферических тензоров $f_{k_1q_1}$, $f_{k_2q_2}$ происходит в соответствии с правилами сложения моментов, причем k_1, k_2 играют формально роль «моментов», соответствующих этим тензорам. Таким образом, из двух сферических тензоров рангов k_1 и k_2 можно образовать сферические тензоры рангов $K=k_1+k_2, \ldots, |k_1-k_2|$ по формулам

$$\begin{aligned} (f_{k_1}g_{k_2})_{KQ} &= \sum_{q_1q_2} \langle q_1q_2 | KQ\rangle f_{k_1q_1} g_{k_2q_2} = \\ &= (-1)^{k_1-k_2+Q}\sqrt{2K+1}\sum_{q_1q_2}\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & K \\ q_1 & q_2 & -Q\end{pmatrix} f_{k_1q_1} g_{k_2q_2} \end{aligned} \tag{107,3}$$

---

[1]) Разработка вопросов, рассматриваемых в § 107—109, и большинство излагаемых в них результатов принадлежат *Рака* (1942—1943).

[2]) Подразумевается, что комплексность величин f_{kq} связана только с переходом к сферическим компонентам, т. е. исходные декартовы компоненты тензора вещественны.

(ср. (106,9)). Скалярное произведение двух сферических тензоров одинакового ранга k принято, однако, определять как

$$(f_k g_k)_{00} = \sum_q (-1)^{k-q} f_{kq} g_{k,-q}, \tag{107,4}$$

что отличается от определения по формуле (107,3) с $K = Q = 0$ множителем $\sqrt{2k+1}$ (ср. (106,2)) [1]. Это определение можно представить также в виде

$$(f_k g_k)_{00} = \sum_q f_{kq} g^*_{kq},$$

если заметить, что комплексное сопряжение сферического тензора производится по правилу

$$f^*_{kq} = (-1)^{k-q} f_{k,-q}$$

(ср. (28,9)) [2].

Представление физических величин в виде сферических тензоров в особенности удобно при вычислении их матричных элементов, так как позволяет воспользоваться для этой цели результатами теории сложения моментов.

По определению матричных элементов, имеем

$$f_{kq}\psi_{njm} = \sum_{n'j'm'} \langle n'j'm' | f_{kq} | njm \rangle \psi_{n'j'm'}, \tag{107,5}$$

где ψ_{njm} — волновые функции стационарных состояний системы, характеризуемых величиной ее момента j, его проекцией m и набором остальных квантовых чисел n. По своим трансформационным свойствам функции в правой и левой сторонах равенства (107,5) соответствуют функциям в правой и левой сторонах равенства (106,11). Отсюда сразу следуют правила отбора:

Матричные элементы компонент f_{kq} неприводимого тензора ранга k отличны от нуля лишь для переходов $jm \to j'm'$, удовлетворяющих «правилу сложения моментов» $\mathbf{j}' = \mathbf{j} + \mathbf{k}$; при этом числа j', j, k должны удовлетворять «правилу треугольника» (т. е. могут измерять стороны замкнутого треугольника), а $m' = m + q$. В частности, диагональные матричные элементы могут быть отличны от нуля только при условии $2j \geqslant k$.

Далее, из той же трансформационной аналогии следует, что коэффициенты в сумме (107,5) должны быть пропорциональны

---

[1] Если $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ — два вектора, соответствующих по формулам (107,1) сферическим тензорам f_{1q} и g_{1q}, то

$$(f_1 g_1)_{00} = \mathbf{AB}.$$

[2] Повторим здесь замечание, сделанное выше в связи с формулой (106,8): при таком правиле комплексное сопряжение тензоров рангов k_1 и k_2 в правой стороне равенства (107,3) приводит к такому же сопряжению тензора ранга K в его левой стороне.

коэффициентам в (106,11) (*теорема Вигнера—Эккарта*). Этим определяется зависимость коэффициентов от чисел m, m', в соответствии с чем представим матричные элементы в виде

$$\langle n'j'm'|f_{kq}|njm\rangle = i^k(-1)^{j_{\max}-m'}\begin{pmatrix} j' & k & j \\ -m' & q & m\end{pmatrix}\langle n'j'\|f_k\|nj\rangle \quad (107,6)$$

($j_{\max}$ — большее из чисел j и j'), где $\langle n'j'\|f_k\|nj\rangle$ — величины, не зависящие от m, m', q; их называют *приведенными матричными элементами*. Эта формула решает поставленный вопрос об определении зависимости матричных элементов от проекций моментов. Эта зависимость оказывается полностью связанной со свойствами симметрии по отношению к группе вращений, между тем как зависимость от остальных квантовых чисел определяется уже физической природой самих величин f_{kq} [1]).

Операторы $\hat{f}_{kq}$ связаны друг с другом соотношениями

$$\hat{f}_{kq}^{+} = (-1)^{k-q}\hat{f}_{k,-q}. \quad (107,7)$$

Поэтому для их матричных элементов имеет место равенство

$$\langle n'j'm'|f_{kq}|njm\rangle^* = (-1)^{k-q}\langle njm|f_{k,-q}|n'j'm'\rangle. \quad (107,8)$$

Подставив сюда (107,6) и воспользовавшись свойствами $3j$-символов (106,5), (106,6), получим для приведенных матричных элементов соотношение «эрмитовости» [2])

$$\langle n'j'\|f_k\|nj\rangle = \langle nj\|f_k\|n'j'\rangle^*. \quad (107,9)$$

Матричные элементы скаляра (107,4) диагональны по j и m. Согласно правилу умножения матриц имеем

$$\langle n'jm|(f_kg_k)_{00}|njm\rangle = \\ = \sum_q (-1)^{k-q}\sum_{n''j''m''}\langle n'jm|f_{kq}|n''j''m''\rangle\langle n''j''m''|g_{k,-q}|njm\rangle.$$

Подставив сюда выражения (107,6) и произведя суммирование по q и m'' с помощью соотношения ортогональности $3j$-символов (106,12), получим следующую формулу:

$$\langle n'jm|(f_kg_k)_{00}|njm\rangle = \frac{1}{2j+1}\sum_{n''j''}\langle n'j\|f_k\|n''j''\rangle\langle n''j''\|g_k\|nj\rangle. \quad (107,10)$$

[1]) Из полученных результатов, в частности, сразу получаются указанные в § 29 правила отбора для матричных элементов вектора и формулы (29,7)—(29,9) для них.

[2]) Фазовый множитель в определении (107,6) выбран именно так, чтобы обеспечить это равенство.

Аналогичным образом легко получить следующие формулы суммирования квадратов матричных элементов:

$$\sum_{qm'} |\langle n'j'm' | f_{kq} | njm \rangle|^2 = \frac{1}{2j+1} |\langle n'j' \| f_k \| nj \rangle|^2, \qquad (107,11)$$

$$\sum_{mm'} |\langle n'j'm' | f_{kq} | njm \rangle|^2 = \frac{1}{2k+1} |\langle n'j' \| f_k \| nj \rangle|^2. \qquad (107,12)$$

В первой из них суммирование производится по q и m' при заданном m, а во второй — по m и m' при заданном q (причем всегда $m' = m + q$).

Рассмотрим, со справочными целями, случай, когда величинами f_{kq} являются сами шаровые функции Y_{kq}, и дадим выражения их матричных элементов для переходов между состояниями одной частицы с целочисленными орбитальными моментами l_1 и l_2, т. е. интегралов

$$\langle l_1 m_1 | Y_{lm} | l_2 m_2 \rangle = \int Y^*_{l_1 m_1} Y_{lm} Y_{l_2 m_2}\, do. \qquad (107,13)$$

Помимо правила отбора, соответствующего правилу сложения моментов ($\mathbf{l} + \mathbf{l}_2 = \mathbf{l}_1$), для этих матричных элементов имеет место также правило, согласно которому сумма $l + l_1 + l_2$ должна быть четным числом. Оно связано с сохранением четности, в силу которого произведение четностей $(-1)^{l_1+l_2}$ обоих состояний должно совпадать с четностью $(-1)^l$ рассматриваемой физической величины (см. § 30).

Матричные элементы (107,13) являются частным случаем более общего интеграла, который будет вычислен в § 110 (см. примечание на стр. 526). Они даются формулой

$$\langle l_1 m_1 | Y_{lm} | l_2 m_2 \rangle = (-1)^{m_1} i^{-l_1+l_2+l} \begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times$$
$$\times \left[\frac{(2l+1)(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi} \right]^{1/2}. \qquad (107,14)$$

В частности, при $m_1 = m_2 = m = 0$ находим значение интеграла от произведения трех полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^{1} P_l(\mu) P_{l_1}(\mu) P_{l_2}(\mu)\, d\mu = 2 \begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2. \qquad (107,15)$$

§ 108. 6j-символы

Мы определили в § 106 3j-символы как коэффициенты в сумме (106,4), представляющей собой волновую функцию системы трех частиц с равным нулю полным моментом. С точки зрения трансформационных свойств по отношению к вращениям эта сумма