ЛЕКЦИЯ 17(5). 26.09.2001

НЕПРИВОДИМЫЕ ТЕНЗОРЫ

Возникающие естественным образом при анализе центрально-сиимметричной одночастичной задачи сферические гармоники Y_{lm} можно определить как собственные векторы оператора $\hat{l}_3$

$$\hat{l}_3 Y_{lm} \quad = \quad mY_{lm},$$

удовлетворяющие соотношениям

$$\hat{l}_\pm Y_{lm} \quad = \quad \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_{l,m\pm 1}.$$

Если $\hat{l}_\alpha$ реализуются как дифференциальные операторы, то Y_{lm} становятся функциями сферических углов, которые можно толковать как операторы умножения, а приведенные выше равенства можно представить как перестановочные соотношения

$$[\hat{l}_3, Y_{lm}] \quad = \quad mY_{lm},$$

$$[\hat{l}_\pm, Y_{lm}] \quad = \quad \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_{l,m\pm 1}.$$

Этому образцу следует определение неприводимых тензоров.

Неприводимый тензор ранга j*– это совокупность* $2j+1$ *операторов*

$$\hat{T}_{jm}, \quad -j \le m \le j,$$

удовлетворяющих перестановочным соотношениям

$$[\hat{j}_3, \hat{T}_{jm}] \quad = \quad m\hat{T}_{jm},$$

$$[\hat{j}_\pm, \hat{T}_{jm}] \quad = \quad \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hat{T}_{j,m\pm 1}.$$

Из этого определения немедленно получаются общие выражения матричных элементов неприводимых тензоров в базисе $|\gamma, j, m>$, состоящем из собственных векторов операторов $\vec{J}^2$ и $\hat{J}^3$ и других операторов $\hat{\Gamma}$, дополняющих первые до полной системы наблюдаемых.

$$1) \qquad <\gamma_1, j_1, m_1|\hat{T}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2> \quad \ne \quad 0, \quad \textit{если} \quad m_1 \ne m + m_2,$$

$$2) \qquad <\gamma_1, j_1, m_1|\hat{T}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2> \quad = \quad <\gamma_1, j_1|T_j|\gamma_2, j_2><j_2 m_2 jm|j_2 j j_1 m_1>,$$

где $<j_2 m_2 jm|j_2 j j_1 m_1>$ – коэффициенты Клебша-Гордона – скалярные произведения, реализующие разложение собственных векторов операторов ${J_1}^2$, ${J_2}^2$, J^2, J_3 по собственным векторам операторов ${J_1}^2$, J_{13}, ${J_2}^2$, J_{23}:

$$|j_1 j_2 jm> \quad = \quad \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1 j_2 m_2><j_1 m_1 j_2 m_2|j_1 j_2 jm>.$$

Эти соотношения полностью определяют зависимость матричных элементов неприводимых тензоров $\hat{T}_{jm}$ в базисе $|\gamma, j, m>$ от азимутальных квантовых чисел m при любых числах j, j_1, j_2. Их можно перефразировать так, чтобы не использовать коэффициенты Клебша–Гордона явно. Предположим, что существует такой неприводимый тензор $\hat{Q}_{jm}$, матричные элементы которого $< \gamma_1, j_1, m_1|\hat{Q}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2 >$ не равны тождественно нулю. В этом случае справедлива формула

$$< \gamma_1, j_1, m_1|\hat{T}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j_1, j_2) < \gamma_1, j_1, m_1|\hat{Q}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2 > .$$

Выделение неприводимых тензоров в особый класс величин должно упростить анализ структуры квантовых формул. Приведем несколько примеров неприводимых тензоров.

Неприводимый тензор нулевого ранга — это оператор $\hat{T}$, коммутирующий со всеми операторами момента количества движения $\hat{J}_\alpha$:

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{T}] \quad = \quad 0,$$

Это — оператор скалярной величины в нашем старом определении. Матричные элементы скаляра имеют особенно простую структуру:

$$< \gamma_1, j_1, m_1|\hat{T}|\gamma_2, j_2, m_2 > \quad = \quad \delta_{j_1 j_2} \delta m_1 m_2 < \gamma_1, j_1|T|\gamma_2, j_1 >$$

Декартовы составляющие вектора A_α удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[J_\alpha, A_\beta] \quad = \quad i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} A_\gamma.$$

Из них нетрудно получить составляющие **неприводимого тензора первого ранга**. Действительно, нетрудно проверить, что три величины

$$\hat{T}_{1,-1} \quad = \quad b(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2), \qquad \hat{T}_{1,0} \quad = \quad d\hat{A}_3, \qquad \hat{T}_{1,1} \quad = \quad c(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2)$$

удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[J_3, \hat{T}_{1m}] \quad = \quad m\hat{T}_{1m}.$$

Их можно считать составляющими неприводимого тензора первого ранга в том случае, если выполнены соотношения

$$[\hat{J}_+, \hat{T}_{1,0}] \quad = \quad -d(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2) \quad = \quad -\frac{d}{c}\hat{T}_{1,1} \quad = \quad \sqrt{(1-0)(1+0+1)}\hat{T}_{1,1},$$

$$[\hat{J}_+, \hat{T}_{1,-1}] \quad = \quad -2ib\hat{A}_3 \quad = \quad -\frac{d}{c}\hat{T}_{1,0} \quad = \quad \sqrt{(1+1)(1-1+1)}\hat{T}_{1,0}.$$

Эти равенства позволяют свести коэффициенты b и c к d:

$$\hat{T}_{1,-1} \quad = \quad \frac{d}{\sqrt{2}}(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2), \qquad \hat{T}_{1,0} \quad = \quad d\hat{A}_3, \qquad \hat{T}_{1,1} \quad = \quad -\frac{d}{\sqrt{2c}}(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2).$$

Коэффициент d удобно выбрать таким, чтобы фазы тензоров $\hat{T}_{1m}$ совпали с фазами сферических гармоник Y_{1m}. Ранее сферические гармоники были определены формулой

$$Y_{lm}(\vec{n}) \quad = \quad (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{\hat{|}m|}(cos\theta)e^{im\phi},$$

поэтому естественно выбрать определение

$$\hat{T}_{1,-1} \quad = \quad \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2), \qquad \hat{T}_{1,0} \quad = \quad i\hat{A}_3, \qquad \hat{T}_{1,1} \quad = \quad -\frac{i}{\sqrt{2c}}(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2).$$

Декартов тензор второго ранга $T_{\alpha\beta}$ удовлетворяет перестановочным соотношениям

$$[J_\alpha, \hat{T}_{\beta\gamma}] \quad = \quad i\epsilon_{\alpha\beta\nu}T_{\nu\gamma} \quad + \quad i\epsilon_{\alpha\gamma\nu}T_{\beta\gamma}.$$

Известно, что декартов тензор второго ранга можно инвариантно относительно поворотов разбить на симметричную и антисимметричную части:

$$A_{\alpha\beta} \quad = \quad \frac{1}{2}(A_{\alpha\beta} + A_{\beta\alpha}) \quad + \quad \frac{1}{2}(A_{\alpha\beta} - A_{\beta\alpha}).$$

Антисимметричная часть сводится к вектору, т.е. представляет собой неприводимый тензор первого ранга.

Симметричный тензор второго ранга можно представить в форме

$$A_{\alpha\beta} \quad = \quad \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}TrA \quad + \quad \Big(A_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}TrA\Big).$$

Поскольку след тензора не изменяется при поворотах, то первое слагаемое представляет собой скаляр, а второе – симметричный тензор второго порядка с нулевым следом – определяется пятью параметрами. Из его составляющих можно построить **неприводимый тензор второго порядка**. Нетрудно найти явные формулы, переводящие декартов симметричный тензор второго порядка $T_{\alpha\beta}$ с нулевым следом в тензор $\hat{T}_{2,m}$:

$$T_{2,0} = -\sqrt{\frac{3}{2}}T_{33}, \quad T_{2,\pm1} = \pm(T_{13} \pm iT_{23}), \quad T_{2,\pm2} = -\frac{1}{2}(T_{11} - T_{22} \pm 2iT_{12}).$$

$$T_{\alpha\beta} = T_{\beta\alpha}, \quad \sum_\alpha T_{\alpha\alpha} = 0.$$

Эти соотношения особенно удобны, если тензор $\hat{Q}_{jm}$ построен из составляющих оператора момента количества движения. Прежде чем привести явные формулы, заметим, что они справедливы лишь при $j_1 = j_2$, так как в противном случае правая часть равенства тождественно равна нулю (в силу перестановочных соотношений $[\vec{J}^2, J_\alpha] = 0$).

1) Неприводимый тензор нулевого ранга $\hat{T}$ удовлетворяет перестановочным соотношениям

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{T}] \quad = \quad 0,$$

что совпадает с принятым ранее определением скаляра.

В качестве тензора $\hat{Q}_{jm}$ можно взять единичный оператор $\hat{E}$, поэтому

$$< \gamma_1, j, m_1|\hat{T}|\gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j) < j, m_1|\hat{E}|j, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j)\delta_{m_1 m_2}.$$

Выражая неприводимые тензоры в терминах декартовых составляющих тензоров, мы показали, что величины $\hat{T}_{jm}$ действительно существуют.

Однако, при формулировке практически любой физической задачи обычно используются **декартовы тензоры** — величины $\hat{T}_{\alpha\beta\ldots}$, преобразующиеся при поворотах как прямые произведения векторов $u_\alpha \otimes v_\beta \ldots$. Чтобы аналогичные формулы для декартовых тензоров, необходимо выразить эти величины в терминах неприводимых тензоров $\hat{T}_{jm}$. Приведем некоторые явные формулы.

Скаляр $\hat{S}$ — это неприводимый тензор нулевого ранга:

$$\hat{S} \quad = \quad \hat{T}_{00}.$$

Декартовы составляющие вектора можно представить в форме

$$\hat{V}_1 \quad = \quad -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{T}_{1,-1} \quad + \quad \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{T}_{1,1},$$

$$\hat{V}_2 \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{T}_{1,-1} \quad + \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{T}_{1,1},$$

$$\hat{V}_3 \quad = \quad -i\hat{T}_{1,0}.$$

Наконец, для декарового неприводимого тензора второго порядка,

$$D_{\alpha\beta} \quad = \quad D_{\beta\alpha}, \qquad Tr\hat{D} = 0,$$

справедливы соотношения

$$\hat{D}_{11} \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{T}_{2,-1} - \hat{T}_{2,1} \quad + \quad +\sqrt{\frac{2}{3}}\hat{T}_{2,0}),$$

$$\hat{D}_{12} \quad = \quad \frac{i}{2}(\hat{T}_{2,2} - \hat{T}_{2,-2}), \qquad \hat{D}_{13} \quad = \quad \frac{1}{2}(\hat{T}_{2,2} - \hat{T}_{2,-2}),$$

$$\hat{D}_{22} \quad = \quad \frac{1}{2}(\hat{T}_{2,1} - \hat{T}_{2,1}), \qquad \hat{D}_{23} \quad = \quad \frac{i}{2}(\hat{T}_{2,1} + \hat{T}_{2,-1}), \qquad \hat{D}_{33} \quad = \quad -\sqrt{\frac{2}{3}}\hat{T}_{2,0}.$$

В общем случае неприводимый декартов тензор ранга j представить как

$$\hat{T}^{(j)}_{\alpha\beta\gamma\ldots} \quad = \quad \sum_m N^{(j)}_{\alpha\beta\gamma\ldots} \hat{T}_{jm} .$$

Поэтому справедливы формулы вида

$$< \gamma_1, j_1, m_1 | \hat{T}^{(j)}_{\alpha\beta\gamma\ldots} | \gamma_2, j_1, m_2 > \quad =$$

$$\sum_m N^{(j)}_{\alpha\beta\gamma\ldots} < \gamma_1, j_1, m_1 | \hat{T}_{jm} | \gamma_2, j_1, m_2 > \quad =$$

$$C(\gamma_1, \gamma_2, j_1, j) \sum_m N^{(j)}_{\alpha\beta\gamma\ldots} < \gamma_1, j_1, m_1 | \hat{Q}_{jm} | \gamma_2, j_1, m_2 > \quad =$$

$$C(\gamma_1, \gamma_2, j_1, j) < \gamma_1, j_1, m_1 | \hat{Q}^j_{\alpha\beta\gamma\ldots} | \gamma_2, j_1, m_2 >$$

где $\hat{Q}^{(j)}_{\alpha\beta\gamma\ldots}$ произвольный неприводимый декартов тензор. Нужно только, чтобы его матричные элементы не были тождественно равны нулю.

СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ НЕПРИВОДИМЫХ ТЕНЗОРОВ

Соотношения предыдущего раздела особенно удобны, если тензор $\hat{Q}^{(j)}_{\alpha\beta\gamma\ldots}$ построен из составляющих оператора момента количества движения. Прежде чем привести явные формулы, следует подчеркнуть, что они справедливы лишь при $j_1 = j_2$, так как в противном случае правая часть равенства тождественно равна нулю (в силу перестановочных соотношений $[\vec{J}^2, J_\alpha] = 0$).

В случае тензора нулевого ранга в качестве тензора $\hat{Q}$ можно взять единичный оператор $\hat{E}$. В результате получаются так называемые правила отбора для матричных элементов скаляра.

$$< \gamma_1, j, m_1 | \hat{S} | \gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad \delta m_1 m_2 < \gamma_1, j | S | \gamma_2, j > .$$

Матричный элемент скаляра диагонален по индексам m и не зависит от них.

В случае вектора операторы $\hat{Q}_\alpha$ можно заменить операторами момента количества движения $\hat{J}_\alpha$:

$$< \gamma_1, j, m_1 | \hat{V}_\alpha | \gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j) < j, m_1 | \hat{J}_\alpha | j, m_2 > .$$

Физический смысл этой формулы можно (не совсем точно) выразить утверждением: **среднее значение вектора направлено вдоль момента количества движения**. Нетрудно уточнить структуру коэффициента C. Воспользуемся тем, что скалярное произведение векторов — это скаляр. Поэтому

$$< \gamma_1, j, m_1 | \vec{V}\vec{J} | \gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad \delta m_1 m_2 < \gamma_1, j, m | \vec{J}\vec{V} | \gamma_2, j, m > .$$

С другой стороны, эту же величину можно представить суммой

$$< \gamma_1, j, m_1|\vec{V}\vec{J}|\gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad \sum_{\gamma, j', m'} < \gamma_1, j, m_1|\vec{V}|\gamma, j^{'}, m^{'} >< m^{'}, j^{'}, \gamma|\vec{J}|\gamma_2, j, m_2 > .$$

Поскольку

$$< m^{'}, j^{'}, \gamma|\vec{J}|\gamma_2, j, m_2 > . \quad = \quad \delta_{\gamma\gamma_2}\delta_{j'j}, < m^{'}, j|\vec{J}|j, m_2 >,$$

то суммирование по индексам γ и $j^{'}$ снимается и

$$< \gamma_1, j, m_1|\vec{V}\vec{J}|\gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad \sum_{m'} < \gamma_1, j, m_1|\vec{V}|\gamma_2, j, m^{'} >< m^{'}, j|\vec{J}|j,_2 > .$$

В последней сумме матричные элементы вектора можно представить формулой

$$< \gamma_1, j, m_1|\vec{V}|\gamma_2, j, m^{'} > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j) < j, m_1|\vec{J}|j, m^{'} > .$$

После этого сумма легко вычисляется, что приводит к результату

$$< \gamma_1, j, m_1|\vec{V}\vec{J}|\gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j) < j, m_1|\vec{J}^2|j, m_2 > \quad =$$

$$C(\gamma_1, \gamma_2, j) j(j+1)\delta_{m_1 m_2}.$$

Если j не равно нулю, то можно найти число C. Таким образом

$$< \gamma_1, j, m_1|\hat{V}_\alpha|\gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad \begin{cases} \frac{<\gamma_1, j, m|\vec{V}\vec{J}|\gamma_2, j, m>}{j(j+1)} < j, m_1|\hat{J}_\alpha|j, m_2 >, & j \neq 0 \\ 0, & j = 0 \end{cases}$$

В случае **неприводимого тензора второго порядка** соответствующий тензор $\hat{Q}_{\alpha\beta}$ можно взять в форме

$$\hat{Q}_{\alpha\beta} \quad = \quad \hat{J}_\alpha\hat{J}_\beta \quad + \quad \hat{J}_\beta\hat{J}_\alpha \quad - \quad \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta}\vec{J}^2$$

Постоянную в равенстве

$$< \gamma_1, j, m_1|\hat{T}_{\alpha\beta}|\gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j) < j, m_1|\hat{Q}_{\alpha\beta}|j, m_2 >$$

можно определить, вычисляя матричный элемент

$$< \gamma_1, j, m_1|\hat{J}_\alpha\hat{T}_{\alpha\beta}\hat{J}_\beta|\gamma_2, j, m_2 >,$$

пропорциональный $\delta_{m_1 m_2}$. Разлагая, как в предыдущем случае, произведение операторов по базису $|\gamma, j, m>$ и сопоставляя это выражение с матричным элементом

$$< j, m_1|J_\alpha\hat{Q}_{\alpha\beta}J_\beta|m_2, j > \quad = \quad \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{3}j(j+1)(2j+3)(2j-1),$$

получим

$$< \gamma_1, j, m_1|\hat{T}_{\alpha\beta}|\gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad \frac{3}{j(j+1)(2j+3)(2j-1)} < j, m_1|\hat{Q}_{\alpha\beta}|j, m_2 > .$$