ウィグナー・エッカルトの定理

角運動量演算子の期待値とクレブシュ・ゴルダン係数の関係を与えるウィグナー・エッカルトの定理を求めます。途中から演算子のハットを省いて、D 行列 $D^{(j)}_{m'm}$、$\hat{J}_\pm$ を作用させたときに出てくる係数 $C^{\pm}_{jm}$、クレブシュ・ゴルダン係数 C、球面調和関数 $Y_{l,m}$ を除いて大文字のローマ文字は演算子としています。

表記をまとめておきます。2つの角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{B}}$ があり、それぞれの z 成分の固有状態を $|j_A, m_A\rangle, |, j_B, m_B\rangle$ とします。これらと $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{A}} + \hat{\boldsymbol{B}}$ の z 成分の固有状態 $|(j_A, j_B)j, m\rangle$ は

$$\hat{A}_z|j_A, m_A\rangle = \hbar m_A|j_A, m_A\rangle \ , \ \hat{\boldsymbol{A}}^2|j_A, m_A\rangle = \hbar^2 j_A(j_A+1)|j_A, m_A\rangle \quad (-j_A \leq m_A \leq j_A)$$

$$\hat{B}_z|j_B, m_B\rangle = \hbar m_B|j_B, m_B\rangle \ , \ \hat{\boldsymbol{B}}^2|j_B, m_B\rangle = \hbar^2 j_B(j_B+1)|j_B, m_B\rangle \quad (-j_B \leq m_B \leq j_B)$$

$$\hat{J}_z|(j_A, j_B)j, m\rangle = \hbar m|(j_A, j_B)j, m\rangle \ , \ \hat{\boldsymbol{J}}^2|(j_A, j_B)j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|(j_A, j_B)j, m\rangle$$

j, m の範囲は

$$|j_A - j_B| \leq j \leq j_A + j_B \ , \ -j \leq m \leq j$$

となっています。j_A, j_B は0以上の整数か半整数です。$|j_A, m_A\rangle, |j_B, m_B\rangle$ のテンソル積から

$$|j_A, m_A; j_B, m_B\rangle = |j_A, m_A\rangle \otimes |j_B, m_B\rangle$$

として作った基底で $|(j_A, j_B); j, m\rangle$ を展開すると

$$\begin{aligned}
|(j_A, j_B)j, m\rangle &= \sum_{m_A=-j_A}^{j_A} \sum_{m_B=-j_B}^{j_B} \langle j_A, m_A; j_B, m_B|(j_A, j_B)j, m\rangle |j_A, m_A; j_B, m_B\rangle \\
&= \sum_{m_A=-j_A}^{j_A} \sum_{m_B=-j_B}^{j_B} C(j_A, j_B, j : m_A, m_B, m)|j_A, m_A; j_B, m_B\rangle
\end{aligned}$$

係数 C はクレブシュ・ゴルダン係数で、実数です。クレブシュ・ゴルダン係数は $m = m_A + m_B$ のときに0でない値を持ちます。クレブシュ・ゴルダン係数の漸化式は「クレブシュ・ゴルダン係数の符号」で求めているように

$$\begin{aligned}
&\sqrt{j(j+1) - m(m\pm1)}\langle j_A, m_A; j_B, m_B|(j_A, j_B)j, m\pm1\rangle \\
&\qquad = \sqrt{j_A(j_A+1) - m_A(m_A\mp1)}\langle j_A, m_A\mp1; j_B, m_B|(j_A, j_B)j, m\rangle \\
&\qquad\quad + \sqrt{j_B(j_B+1) - m_B(m_B\mp1)}\langle j_A, m_A; j_B, m_B\mp1|(j_A, j_B)j, m\rangle
\end{aligned} \tag{1}$$

これを後で使います。

ここでは基底として spherical basis を使うので、関係を出しておきます。$l = 1,\ m = 1, 0, -1$ での球面調和関数 $Y_{l,m}$ は

$$Y_{1,1}(\theta,\phi)=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{i\phi}\sin\theta\ ,\ Y_{1,0}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\ ,\ Y_{1,-1}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{-i\phi}\sin\theta$$

これらと極座標 (r,θ,ϕ) での

$$x=r\sin\theta\cos\phi\ ,\ y=r\sin\theta\sin\phi\ ,\ z=r\cos\theta$$

を見比べると

$$\begin{aligned}
&x=\sqrt{\frac{2\pi}{3}}r(Y_{1,-1}(\theta,\phi)-Y_{1,1}(\theta,\phi))\\
&y=i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}r(Y_{1,-1}(\theta,\phi)+Y_{1,1}(\theta,\phi))\\
&z=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{1,0}(\theta,\phi)\\
&rY_{1,1}(\theta,\phi)=-\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x+iy}{\sqrt{2}}\\
&rY_{1,0}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}z\\
&rY_{1,-1}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x-iy}{\sqrt{2}}
\end{aligned}$$

となっているのが分かります。ベクトルのように書くと

$$\begin{pmatrix} Y_{1,1} \\ Y_{1,0} \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{1}{r}\begin{pmatrix} -\dfrac{1}{\sqrt{2}}(x+iy) \\ z \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}(x-iy) \end{pmatrix} \tag{2}$$

これらから、ベクトル $\boldsymbol{r}$ の成分が

$$\begin{pmatrix} r_{+1} \\ r_0 \\ r_{-1} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -\dfrac{1}{\sqrt{2}}(x+iy) \\ z \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}(x-iy) \end{pmatrix} \tag{3}$$

となる基底が作れれば、その $\boldsymbol{r}$ の成分は球面調和関数に対応します。

(3) の形から、デカルト座標での基底 $\boldsymbol{e}_x,\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{e}_z$ を使って、新しい基底を

$$\boldsymbol{g}_{+1}=-\frac{\boldsymbol{e}_x+i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}}\ ,\ \boldsymbol{g}_0=\boldsymbol{e}_z\ ,\ \boldsymbol{g}_{-1}=\frac{\boldsymbol{e}_x-i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}}$$

と作ります。「D 行列の計算」でも出てきたように、この基底が spherical basis です。添え字が $+1,0,-1$ という紛らわしい表記になっていることに注意してください。

直交していることを示します。この基底は複素ベクトルになっており、複素共役での関係は

$$\boldsymbol{g}^*_{+1} = -\boldsymbol{g}_{-1}\ ,\ \boldsymbol{g}^*_{-1} = -\boldsymbol{g}_1\ ,\ \boldsymbol{g}^*_0 = \boldsymbol{g}_0$$

複素ベクトル空間なので、内積の左側のベクトルは複素共役を取ると定義します。その内積は $<,>$ と書くことにし、ユークリッド空間の内積は「$\cdot$」のままにします。内積は

$$\begin{aligned}
&< \boldsymbol{g}_{+1}, \boldsymbol{g}_{+1} >= \frac{\boldsymbol{e}_x - i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}}\frac{\boldsymbol{e}_x + i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y \cdot \boldsymbol{e}_y) = 1 \\
&< \boldsymbol{g}_{-1}, \boldsymbol{g}_{-1} >= \frac{\boldsymbol{e}_x + i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}}\frac{\boldsymbol{e}_x - i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{e}_x - \boldsymbol{e}_y \cdot \boldsymbol{e}_y) = 1 \\
&< \boldsymbol{g}_0, \boldsymbol{g}_0 >= \boldsymbol{e}_z \cdot \boldsymbol{e}_z = 1 \\
&< \boldsymbol{g}_{+1}, \boldsymbol{g}_{-1} >= -\frac{\boldsymbol{e}_x - i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}}\frac{\boldsymbol{e}_x - i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{e}_x - \boldsymbol{e}_y \cdot \boldsymbol{e}_y) = 0 \\
&< \boldsymbol{g}_{+1}, \boldsymbol{g}_0 >= -\frac{(\boldsymbol{e}_x - i\boldsymbol{e}_y) \cdot \boldsymbol{e}_z}{\sqrt{2}} = 0
\end{aligned}$$

添え字の q, q' を $\pm 1, 0$ として直交性は

$$\langle \boldsymbol{g}_q, \boldsymbol{g}_{q'} \rangle = \delta_{qq'}$$

と書けます。

ベクトル成分は

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{v} = v_x\boldsymbol{e}_x + v_y\boldsymbol{e}_y + v_z\boldsymbol{e}_z &= \frac{1}{2}(v_x - iv_y)(\boldsymbol{e}_x + i\boldsymbol{e}_y) + \frac{1}{2}(v_x + iv_y)(\boldsymbol{e}_x - i\boldsymbol{e}_y) + v_z\boldsymbol{e}_z \\
&= \frac{v_x + iv_y}{\sqrt{2}}\boldsymbol{g}_{-1} - \frac{v_x - iv_y}{\sqrt{2}}\boldsymbol{g}_{+1} + v_z\boldsymbol{g}_0 \\
&= -v_{+1}\boldsymbol{g}_{-1} - v_{-1}\boldsymbol{g}_{+1} + v_0\boldsymbol{g}_0 \\
&= v_{+1}\boldsymbol{g}^*_{+1} + v_{-1}\boldsymbol{g}^*_{-1} + v_0\boldsymbol{g}^*_0
\end{aligned}$$

と定義されます。位置ベクトル $\boldsymbol{r} = x\boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{e}_y + z\boldsymbol{e}_z$ では

$$r_{+1} = -\frac{x + iy}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{1,1}(\theta, \phi)\ ,\ r_0 = z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{1,0}(\theta, \phi)\ ,\ r_{-1} = \frac{x - iy}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{1,-1}(\theta, \phi) \tag{4}$$

となり、(3) に対応します。これは後で出てくるテンソル演算子の話で重要になります。

次に、ベクトル演算子を定義します。$\hat{U}$ を回転演算子として、3 成分を持つ演算子 $\hat{V}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ を回転した状態 $|\psi'\rangle$ で挟むと

$$\langle \psi' | \hat{V}_i | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{V}_i \hat{U} | \psi \rangle \qquad (|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle)$$

これが 3 次元回転行列 R_{ij} によって

$$\langle\psi'|\hat{V}_i|\psi'\rangle = \sum_{j=1}^{3} R_{ij}\langle\psi|\hat{V}_j|\psi\rangle$$

となっているとき、$\hat{V}_i$ をベクトル演算子と言います。もっと分かりやすい形にすると

$$\hat{U}^\dagger\hat{V}_i\hat{U} = \sum_{j=1}^{3} R_{ij}\hat{V}_j \tag{5}$$

となっていることで、右辺はベクトルの回転の形そのものです。また、スカラーは回転変換で変化しないことから

$$\hat{U}^\dagger\hat{S}\hat{U} = \hat{S}$$

となる演算子をスカラー演算子と言います。

ベクトル演算子と角運動量演算子の交換関係を求めます。$\hat{U}$ を単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ による回転軸での回転演算子とし、微小角度 $\Delta\theta$ なら、(5) の左辺は

$$\hat{U}^\dagger\hat{V}_i\hat{U} = (1+\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}})\hat{V}_i(1-\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}) = \hat{V}_i - \frac{i}{\hbar}\Delta\theta\hat{V}_i\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}} + \frac{i}{\hbar}\Delta\theta\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}\hat{V}_i = \hat{V}_i - \frac{i}{\hbar}\Delta\theta[\hat{V}_i, \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}]$$

右辺は通常のベクトルの微小な回転と同じで

$$\sum_{j=1}^{3} R_{ij}\hat{V}_j == \hat{V}_i + \Delta\theta\sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{ikj}n_k\hat{V}_j \quad (\boldsymbol{v}' = \boldsymbol{v} + \Delta\theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{v}))$$

なので

$$[\hat{V}_i, \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}] = i\hbar(\boldsymbol{n}\times\hat{\boldsymbol{V}})_i$$

$$\sum_{k=1}^{3} n_k[\hat{V}_i, \hat{J}_k] = i\hbar\sum_{k=1}^{3} n_k\sum_{j=1}^{3}\epsilon_{ikj}\hat{V}_j$$

$$[\hat{V}_i, \hat{J}_k] = i\hbar\sum_{j=1}^{3}\epsilon_{ikj}\hat{V}_j \tag{6}$$

成分をバラして書けば

$$[\hat{V}_1, \hat{J}_1] = [\hat{V}_2, \hat{J}_2] = [\hat{V}_3, \hat{J}_3] = 0$$

$$[\hat{V}_1, \hat{J}_2] = i\hbar\hat{V}_3\ ,\ [\hat{V}_1, \hat{J}_3] = -i\hbar\hat{V}_2$$

$$[\hat{V}_2, \hat{J}_1] = -i\hbar\hat{V}_3\ ,\ [\hat{V}_2, \hat{J}_3] = i\hbar\hat{V}_1$$

$$[\hat{V}_3, \hat{J}_1] = i\hbar\hat{V}_2\ ,\ [\hat{V}_3, \hat{J}_2] = -i\hbar\hat{V}_1$$

(6) から分かるように、$\hat{V}_i$ を角運動量演算子にすれば

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

となり、角運動量演算子の交換関係になります。なので、角運動量演算子はベクトル演算子です。

演算子にハットをつけるのが面倒だったので、ここから演算子のハットを省いて、D 行列 $D^{(j)}_{m'm}$、$J_\pm$ を作用させたときに出てくる係数 $C^\pm_{jm}$、クレブシュ・ゴルダン係数 C、球面調和関数 $Y_{l,m}$ を除いて大文字のローマ文字は演算子とします。

角運動量演算子の z 成分の固有状態 $|j,m\rangle$ で spherical basis でのベクトル演算子を挟んだときどうなるのかを見ます。まず、角運動量演算子との交換関係を求めます。デカルト座標での成分と spherical basis での成分の対応は (4) なので、spherical basis でのベクトル演算子 T_q $(q = +1, 0, -1)$ の成分は

$$T_{+1} = -\frac{V_x + iV_y}{\sqrt{2}}\ ,\ T_0 = V_z\ ,\ T_{-1} = \frac{V_x - iV_y}{\sqrt{2}}$$

このときの角運動量演算子との交換関係は

$$[J_z, V_x \pm iV_y] = [J_z, V_x] \pm i[J_z, V_y] = i\hbar V_y \pm i(-i\hbar V_x) = i\hbar V_y \pm \hbar V_x$$
$$[J_z, V_z] = 0$$

から

$$[J_z, T_{\pm 1}] = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}[J_z, V_x \pm iV_y] = \mp\frac{\hbar}{\sqrt{2}}(V_x \pm iV_y) = \pm\hbar T_{\pm 1}$$
$$[J_z, T_0] = 0$$

これらはまとめて

$$[J_z, T_q] = \hbar q T_q \qquad (q = 0, \pm 1) \tag{7}$$

と書けます。

後で使うので、$J_\pm = J_x \pm iJ_y$ との交換関係も求めます。J_+ とは

$$\begin{aligned}
[J_+, V_x + iV_y] = [J_x + iJ_y, V_x + iV_y] &= [J_x, V_x] + [J_x, iV_y] + [iJ_y, V_x] + [iJ_y, iV_y] \\
&= [J_x, V_x] + i[J_x, V_y] + i[J_y, V_x] - [J_y, V_y] \\
&= i[J_x, V_y] + i[J_y, V_x] \\
&= \ -\hbar V_z + \hbar V_z \\
&= 0
\end{aligned}$$

他も同様にして

$$[J_+, V_x - iV_y] = [J_x, V_x] - i[J_x, V_y] + i[J_y, V_x] + [J_y, V_y] = -i[J_x, V_y] + i[J_y, V_x] = 2\hbar V_z$$
$$[J_-, V_x + iV_y] = [J_x, V_x] + i[J_x, V_y] - i[J_y, V_x] + [J_y, V_y] = i[J_x, V_y] - i[J_y, V_x] = -2\hbar V_z$$
$$[J_-, V_x - iV_y] = [J_x, V_x] - i[J_x, V_y] - i[J_y, V_x] - [J_y, V_y] = -i[J_x, V_y] - i[J_y, V_x] = 0$$

となるので

$$[J_+, T_{+1}] = [J_-, T_{-1}] = 0$$
$$[J_+, T_{-1}] = \sqrt{2}\hbar T_0 \ , \ [J_-, T_{+1}] = -\sqrt{2}\hbar T_0$$

これらはまとめて

$$[J_\pm, T_q] = \hbar\sqrt{2 - q(q \pm 1)}T_{q\pm1} \tag{8}$$

と書かれます。

ベクトル演算子を spherical basis にしたときに重要なのは、$j = 1$ での $|j, m\rangle$ の $m = 0, \pm1$ と $q = 0, \pm1$ が対応しているために

$$\langle j, q'|J_z|j, q\rangle = \hbar q\delta_{q'q}$$
$$\langle j, q'|J_\pm|j, q\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - q(q \pm 1)}\delta_{q', q\pm1} = \hbar\sqrt{2 - q(q \pm 1)}\delta_{q', q\pm1}$$

と書けることです。これらを使うと交換関係 (7),(8) は

$$[J_z, T_q] = \hbar q T_q = \sum_{q'=\pm1,0} T_{q'}\langle j, q'|J_z|j, q\rangle \tag{9}$$
$$[J_\pm, T_q] = \hbar\sqrt{2 - q(q \pm 1)}T_{q\pm1} = \sum_{q'=\pm1,0} T_{q'}\langle j, q'|J_\pm|j, q\rangle \tag{10}$$

また、J_x, J_y は

$$[J_x, T_q] + i[J_y, T_q] = \sum_{q'=\pm1,0} T_{q'}\langle j, q'|J_x|j, q\rangle + i\sum_{q'=\pm1,0} T_{q'}\langle j, q'|J_y|j, q\rangle$$

から

$$J_x = \sum_{q'=\pm1,0} T_{q'}\langle j, q'|J_x|j, q\rangle \ , \ J_y = \sum_{q'=\pm1,0} T_{q'}\langle j, q'|J_y|j, q\rangle$$

となっています。これらを使うと、T_q の変換がオイラー角による回転演算子 $U(\alpha, \beta, \gamma)$ と D 行列によって

$$U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)T_qU(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_{q'=\pm1,0}T_{q'}(D_{qq'}(\alpha,\beta,\gamma))^* \tag{11}$$

となるのが分かります。これは下の補足で求めています。
　交換関係 $[J_z,T_q]$ を $|j,m\rangle$ で挟むと

$$\langle j',m'|[J_z,T_q]|j,m\rangle=\langle j',m'|(J_zT_q-T_qJ_z)|j,m\rangle=\hbar\langle j',m'|(m'T_q-T_qm)|j,m\rangle=\hbar(m'-m)\langle j',m'|T_q|j,m\rangle$$

一方で、交換関係は (9) なので

$$\begin{aligned}\langle j',m'|[J_z,T_q]|j,m\rangle&=\hbar q\langle j',m'|\hbar qT_q|j,m\rangle\\(m'-m)\langle j',m'|T_q|j,m\rangle&=q\langle j',m'|T_q|j,m\rangle\end{aligned} \tag{12}$$

このため、$m'-m\neq q$ であるなら $\langle j',m'|T_q|j,m\rangle=0$ です。
　今度は $J_\pm$ との交換関係を見ると

$$\langle j',m'|[J_\pm,T_q]|j,m\rangle=\langle j',m'|(J_\pm T_q-T_qJ_\pm)]|j,m\rangle$$

$J_\pm$ はエルミート演算子ではなく $J_\pm^\dagger=(J_x\pm iJ_y)^\dagger=J_x\mp iJ_y=J_\mp$ なので

$$J_\pm|j,m\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}|j,m\pm1\rangle=\hbar C^\pm_{jm}|j,m\pm1\rangle$$

から

$$\langle j',m'|J_\pm=(J_\pm^\dagger|j',m'\rangle)^\dagger=(J_\mp|j',m'\rangle)^\dagger=\hbar C^\mp_{j'm'}\langle j',m'\mp1|$$

表記の注意ですが、今は $\hbar$ を分離した係数を $C^\pm_{jm}$ としています。これから

$$\langle j',m'|[J_\pm,T_q]|j,m\rangle=\hbar C^\mp_{j'm'}\langle j',m'\mp1|T_q|j,m\rangle-\hbar C^\pm_{jm}\langle j',m'|T_q|j,m\pm1\rangle$$

そうすると、(10) から

$$\langle j',m'|[J_\pm,T_q]|j,m\rangle=\hbar\sqrt{2-q(q\pm1)}\langle j',m'|T_{q\pm1}|j,m\rangle$$

なので

$$\begin{aligned}&\sqrt{j'(j'+1)-m'(m'\mp1)}\langle j',m'\mp1|T_q|j,m\rangle\\&\qquad=\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\langle j',m'|T_q|j,m\pm1\rangle+\sqrt{2-q(q\pm1)}\langle j',m'|T_{q\pm1}|j,m\rangle\end{aligned} \tag{13}$$

として、T_q を $|j,m\rangle$ で挟んだときの関係式が求まります。この結果をクレブシュ・ゴルダン係数の関係と見比べます。

まず、クレブシュ・ゴルダン係数は $m=m_A+m_B$ のときに 0 でないです。これは (12) での $m'=m+q$ のときに $\langle j',m'|T_q|j,m\rangle\neq 0$ となることと対応しています。そして、(13) は漸化式のような形になっています。なので、見やすくするために (1) での $|j,m\rangle$ が左側になるように複素共役を取って $\pm$ を (13) と合うように揃えると

$$\begin{aligned}&\sqrt{j(j+1)-m(m\mp1)}\langle(j_A,j_B)j,m\mp1|j_A,m_A;j_B,m_B\rangle\\&\qquad=\sqrt{j_A(j_A+1)-m_A(m_A\pm1)}\langle(j_A,j_B)j,m|j_A,m_A\pm1;j_B,m_B\rangle\\&\qquad\quad+\sqrt{j_B(j_B+1)-m_B(m_B\pm1)}\langle(j_A,j_B)j,m|j_A,m_A;j_B,m_B\pm1\rangle\end{aligned}$$

j を j'、j_A を j、j_B を 1、m を m'、m_A を m、m_B を q とすると

$$\begin{aligned}&\sqrt{j'(j'+1)-m'(m'\mp1)}\langle(j,1);j',m'\mp1|j,m;1,q\rangle\\&\qquad=\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\langle(j,1);j',m'|j,m\pm1;1,q\rangle\\&\qquad\quad+\sqrt{2-q(q\pm1)}\langle(j,1);j',m'|j,m;1,q\pm1\rangle\end{aligned}$$

これは (13) と係数が一致しており、それぞれの項で

$$\begin{aligned}\langle j',m'\mp1|T_q|j,m\rangle\ &\Leftrightarrow\ \langle(j,1)j',m'\mp1|j,m;1,q\rangle=C(j,1,j':m,q,m'\mp1)\\\langle j',m'|T_q|j,m\pm1\rangle\ &\Leftrightarrow\ \langle(j,1)j',m'|j,m\pm1;1,q\rangle=C(j,1,j':m\pm1,q,m')\\\langle j',m'|T_{q\pm1}|j,m\rangle\ &\Leftrightarrow\ \langle(j,1)j',m'|j,m;1,q\pm1\rangle=C(j,1,j':m,q\pm1,m')\end{aligned}$$

と対応しています。簡易的な式にすれば、c_1,c_2,c_3 を定数として

$$c_1t_1+c_2t_2+c_3t_3=0\ ,\ c_1t'_1+c_2t'_2+c_3t'_3=0$$

という 2 つの式が求まったということで、このときの t_i と t'_i は定数倍しか異なりません。今の場合は m による漸化式なので、その定数は m に依存できなく、j,j' にのみ依存します。そして、クレブシュ・ゴルドン係数 $C(j,1,j':m,q,m')$ の漸化式の形に合っているので、$\langle j',m'|T_q|j,m\rangle$ は $C(j,1,j':m,q,m')$ に比例するのが分かります。

このように、spherical basis のベクトル演算子 T_q による $\langle j',m'|T_q|j,m\rangle$ がクレブシュ・ゴルダン係数に比例することをウィグナー・エッカルト (Wigner-Eckart) の定理と言います。式にすると

$$\langle j',m'|T_q|j,m\rangle=\langle j,m;1,q|(j,1);j',m'\rangle\langle j'||T||j\rangle\quad\ (C(j,1,j',m,q,m')=\langle j,m;1,q|(j,1)j',m'\rangle)$$

という書かれ方がされます ($1/\sqrt{2j+1}$ 等の係数を加えたりしている場合もある)。j,j' に依存する定数 $\langle j'||T||j\rangle$ を reduced matrix element と言い、reduced は左辺が元々の行列成分だからです。reduced matrix element をブラケットにおいて $||T||$ と書いているのは左辺との区別をつけやすくするためのようですが、ノルムのように見えたり誤植のようにも見えたりするので紛らわしいです。

この定理から左辺が 0 にならない j', m' に制限があることが分かります。右辺が 0 にならないためには、$|(j,1);j',m'\rangle$ から j' は $|j-1| \leq j' \leq j+1$、クレブシュ・ゴルダン係数の 0 でない条件 $m = m_A + m_B$ から $m' = m + q$ でなければばいけないです。

ウィグナー・エッカルトの定理から射影定理 (projection theorem) を求めます。ウィグナー・エッカルトの定理を spherical basis での角運動量演算子 J_q に使えば

$$\langle j', m'|J_q|j, m\rangle = \langle j, m; 1, q|(j,1); j', m'\rangle\langle j'||J||j\rangle$$

右辺の係数は適当なベクトル演算子 T_q と同じなので

$$\frac{\langle j', m'|T_q|j, m\rangle}{\langle j', m'|J_q|j, m\rangle} = \frac{\langle j'||T||j\rangle}{\langle j'||J||j\rangle} \tag{14}$$

と書けます。

次に、spherical basis での角運動量演算子 J_q と T_q の内積を見ます。$J_{\pm 1}$ (上昇、下降演算子でなく spherical basis での成分) は

$$J_{\pm 1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x \pm iJ_y)$$

内積は成分の複素共役を取ったものと行うので

$$< \boldsymbol{J}, \boldsymbol{T} >= J_0^* T_0 + J_{+1}^* T_{+1} + J_{-1}^* T_{-1} = J_0 T_0 - J_{-1} T_{+1} - J_{+1} T_{-1}$$

内積を $<,>$ で書くとブラケットと紛らわしいので $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}$ と表記してしまいます。$J_{\pm 1}$ の $|j, m\rangle$ への作用は

$$J_{+1}|j, m\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}J_+|j, m\rangle = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}|j, m+1\rangle$$
$$J_{-1}|j, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}J_-|j, m\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j, m-1\rangle$$

エルミート共役から

$$\langle j, m|J_{+1} = (-J_{-1}|j, m\rangle)^\dagger = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\langle j, m-1| = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}}C_{jm}^-\langle j, m-1|$$
$$\langle j, m|J_{-1} = (-J_{+1}|j, m\rangle)^\dagger = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\langle j, m+1| = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C_{jm}^+\langle j, m+1|$$

なので

$$\begin{aligned}\langle j, m|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}|j, m\rangle &= \langle j, m|J_0 T_0|j, m\rangle - \langle j, m|J_{-1} T_{+1}|j, m\rangle - \langle j, m|J_{+1} T_{-1}|j, m\rangle \\ &= \hbar m\langle j, m|T_0|j, m\rangle - \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C_{jm}^+\langle j, m+1|T_{+1}|j, m\rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C_{jm}^-\langle j, m-1|T_{-1}|j, m\rangle\end{aligned}$$

一方で、ウィグナー・エッカルトの定理から

$$\langle j,m|T_0|j,m\rangle = \langle j,m;1,0|(j,1);j,m\rangle\langle j||T||j\rangle = C(j,1,j,m,0,m)\langle j||T||j\rangle$$

$$\langle j,m|T_{+1}|j,m\rangle = \langle j,m;1,1|(j,1);j,m\rangle\langle j||T||j\rangle = C(j,1,j,m,1,m)\langle j||T||j\rangle$$

$$\langle j,m|T_{-1}|j,m\rangle = \langle j,m;1,-1|(j,1);j,m\rangle\langle j||T||j\rangle = C(j,1,j,m,-1,m)\langle j||T||j\rangle$$

なので

$$\begin{aligned}\langle j,m|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}|j,m\rangle &= \hbar m\langle j,m|T_0|j,m\rangle - \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C^+_{jm}\langle j,m+1|T_{+1}|j,m\rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C^-_{jm}\langle j,m-1|T_{-1}|j,m\rangle \\ &= (\hbar mC(j,1,j,m,0,m) - \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C(j,1,j,m,1,m) + \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C(j,1,j,m,-1,m))\langle j||T||j\rangle\end{aligned}$$

$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{J}$ なら

$$\langle j,m|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{J}|j,m\rangle = (\hbar mC(j,1,j,m,0,m) - \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C(j,1,j,m,1,m) + \frac{\hbar}{\sqrt{2}}C(j,1,j,m,-1,m))\langle j||J||j\rangle$$

これらも右辺の係数は同じなので

$$\frac{\langle j,m|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}|j,m\rangle}{\langle j,m|\boldsymbol{J}^2|j,m\rangle} = \frac{\langle j||T||j\rangle}{\langle j||J||j\rangle}$$

これは (14) から

$$\frac{\langle j,m|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}|j,m\rangle}{\langle j,m|\boldsymbol{J}^2|j,m\rangle} = \frac{\langle j',m'|T_q|j,m\rangle}{\langle j',m'|J_q|j,m\rangle}$$

そして、ノルムは基底に依存しないので

$$\boldsymbol{J}^2|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle$$

となり

$$\langle j',m'|T_q|j,m\rangle = \frac{\langle j,m|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}|j,m\rangle}{\hbar^2 j(j+1)}\langle j',m'|J_q|j,m\rangle$$

この式を射影定理と呼びます。大雑把に言えば、右辺のベクトル部分が

$$\frac{\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{T}}{|\boldsymbol{J}|^2}\boldsymbol{J} = (\boldsymbol{T}\cdot\frac{\boldsymbol{J}}{|\boldsymbol{J}|})\frac{\boldsymbol{J}}{|\boldsymbol{J}|}$$

として、$\boldsymbol{T}$ の $\boldsymbol{J}$ 方向への射影になっているからです。

最後に、テンソル演算子でのウィグナー・エッカルトの定理の話をします。ただし、数学的な部分は無視して雰囲気で見ていきます。

2 階テンソルとします。2 階テンソルは雑に言えば、その成分が 2 つの添え字で t_{ij} として書けて、それぞれの添え字に対して変換の行列が作用する量です。これをそのままベクトル演算子の定義に適用すると、演算子 $\hat{T}_{ij}$ が回転行列によって

$$\hat{U}^\dagger \hat{T}_{ij}\hat{U} = \sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3} R_{ik}R_{jl}\hat{T}_{kl}$$

と書けるなら、$\hat{T}_{ij}$ は 2 階テンソル演算子と呼ばれます。回転行列 R_{ij} との区別をはっきりさせるために演算子にハットをつけています。注意ですが、ここでは 3 次元ユークリッド空間でのテンソルに限定しています。テンソルの成分は 2 つのベクトル成分 V_i, W_i の積の形で与えられるので、テンソル演算子でも

$$\hat{T}_{ij} = \hat{V}_i\hat{W}_j \tag{15}$$

と書けます。しかし、(15) での 2 階テンソルはここでしてきた話と対応していません。このことを雑に見ていきます。

一旦、ベクトルに話を戻します。球面調和関数は J_z の固有状態で、$l=1$ では $Y_{1,m}$ が対応し、これは m による 3 成分を持ちます。そして、spherical basis での 3 次元ベクトル $\boldsymbol{r}$ は $Y_{1,m}$ が成分です。つまり、spherical basis における 3 次元ベクトルの成分は $Y_{1,m}$ や $|1,m\rangle$ と同じように変換されると言えます。

これを素直に拡張すると、spherical basis での 5 次元ベクトルの成分は $Y_{2,m}, |2,m\rangle$ と同じように変換されると言えます。さらにそのまま一般化すると、spherical basis での $2l+1$ 次元ベクトルの成分は $Y_{l,m}, |l,m\rangle$ と同じ変換をするとなります。

この話を 2 階テンソルに結びつけます (演算子にしても同じ話)。まず、2 階テンソル T_{ij} は

$$T_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij}+T_{ji}) + \frac{1}{2}(T_{ij}-T_{ji}) = S_{ij} + A_{ij} \tag{16}$$

として、添え字の入れ替えに対して対称な部分と反対称な部分に分けられます。2 階テンソルは $3\times 3 = 9$ 個の成分を持っていて、S_{ij}, A_{ij} を対称行列、反対称行列と思えば、S_{ij} の独立成分は 6 個、A_{ij} の独立成分は 3 個で $6+3=9$ となって一致します。独立成分はその成分が分かれば残りの成分も分かる成分の数のことです。対称行列では、対角成分の 3 個と非対角成分の半分が分かれば残りが分かるので、6 個です。反対称行列では対角成分は 0 にしかなれないので、非対角成分の半分である 3 個が分かれば行列成分は全て分かります。

$T_{ij} = V_iW_j$ になっているとして、A_{ij} を見ると

$$T_{12}-T_{21} = V_1W_2 - V_2W_1 = (\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{W})_3\ ,\ T_{13}-T_{31} = -(\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{W})_2\ ,\ T_{23}-T_{32} = (\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{W})_1$$

となり、ベクトル積になっているのが分かります。なので、A_{ij} は回転変換に対してベクトルとして振る舞います (ベクトル積はベクトル)。ベクトル積が出てきたので、内積も出てくるように (16) を変形して

$$T_{ij} = \frac{1}{2}(V_iW_j + V_jW_i) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W} + \frac{1}{2}(V_iW_j - V_jW_i) + \frac{1}{3}\delta_{ij}\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W}$$

内積は回転変換に対して不変なのでスカラーです。1/3 をつけているのは、S_{ij} は

$$\sum_{i=1}^{3} S_{ii} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}(V_iW_i + V_iW_i) = \boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W}$$

となっているので、行列計算と見たときトレースが

$$\mathrm{tr}[S - \frac{1}{3}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W})I] = \sum_{i=1}^{3}(\frac{1}{2}(V_iW_i + W_iV_i) - \delta_{ii}\frac{1}{3}\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W}]) = \boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W} - \boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W} = 0$$

となるようにするためです。I は単位行列です。このため

$$S'_{ij} = \frac{1}{2}(V_iW_j + V_jW_i) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{W}$$

とすれば、S'_{ij} はトレースが 0 の 3×3 対称行列です。トレースが 0 のために対角成分のうちの 2 個が分かれば残りの 1 個も決まるので、この部分の独立成分は 5 個です。減った 1 個は残っているスカラーが持ちます。

というわけで、2 階テンソルは

$$T_{ij} = S'_{ij} + A_{ij} + P_{ij}$$

と書けます。S'_{ij} はトレースが 0 の 3×3 対称行列、A_{ij} は 3×3 反対称行列、P_{ij} はスカラーで、それぞれの独立成分は 5 個、3 個、1 個です。このように 2 階テンソルの 9 成分は 5+3+1 に分解されます。そうすると、3×3 行列に見える T_{ij} は S'_{ij} の 5 個、A_{ij} の 3 個、P_{ij} の 1 個から構成される 9 次元ベクトルと考えることもできます。そして、このときの A_{ij} はベクトル、P_{ij} はスカラーとして変換されます。言い換えれば、9 次元ベクトル空間において、S'_{ij} の独立成分は 5 次元ベクトル空間、A_{ij} は 3 次元ベクトル空間、P_{ij} は 1 次元ベクトル空間として、それぞれ個別に変換を受けるということです。この結果と spherical basis での話を合わせます。

回転変換に対して、スカラーの P_{ij} は 1 次元ベクトル $|0,0\rangle$、ベクトルの A_{ij} は 3 次元ベクトル $|1,m\rangle$ が対応するように見えます。そうすると、独立成分が 5 個の S'_{ij} は 5 次元ベクトル $|2,m\rangle$ が対応すると考えられます。この 5 次元ベクトル部分を 2 階球面テンソル (spherical tensor of rank 2) と言います。なので、ベクトル成分の言い方と同じように、2 階球面テンソルは spherical basis での 2 階テンソルの成分とも言えます。

これはそのまま一般化され、$2k+1$ 個 $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ の成分を持ち、$|k,m\rangle$ と同じ変換をするとき、k 階球面テンソル $T_q^{(k)}$ $(q = 0, \pm 1, \ldots, \pm k)$ となります。$k = 1$ での $T_q^{(1)}$ が spherical basis でのベクトル成分です。これを演算子としたのが k 階球面テンソル演算子です。

この話で重要なのは 9 次元ベクトルが 5,3,1 次元ベクトルに分解され、それぞれが個別に変換を受けるという点です。もとの 2 階テンソル T_{ij} の 9 成分は一般的には 9 成分が混じるように変換されます (変換は $T'_{ij} = \Sigma\Sigma R_{ia}R_{jb}T_{ab}$)。簡単に言えば、9 次元ベクトルを 9×9 行列で変換すれば、各成分は混ざるということです。しかし、ベクトルの成分は基底に依存し、成分を変換する行列も基底によって変わります。このため、相似変換によって 9 成分が混ざらないような 9×9 行列が作れる可能性があり、今は 5×5 行列、3×3 行列、1×1 行列のブロック行列を対角的に持つ行列と 5,3,1 次元ベクトル $a^{(5)}, b^{(3)}, c^{(1)}$ によって

$$\begin{pmatrix} (5\times 5) & 0 & 0 \\ 0 & (3\times 3) & 0 \\ 0 & 0 & (1\times 1) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a^{(5)} \\ b^{(3)} \\ c^{(1)} \end{pmatrix}$$

という形の変換に書き換えられたということです ($(k\times k)$ は $k\times k$ 行列)。これを群論では $9 = 5\oplus 3\oplus 1$ と表記し、既約表現に分解したことに対応します。$\oplus$ は行列の直和の意味で見ればわかりやすいです。

ちなみに、例えば $T_q^{(2)}$ は $|2,m\rangle$ に対応し、これは $Y_{2,m}$ に対応します。なので、極座標での位置に対して

$$\begin{aligned}
r^2Y_{2,2}(\theta,\phi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}r^2\sin^2\theta e^{2i\phi}&=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}r^2\sin^2(\cos 2\phi+i\sin 2\phi)\\
&=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}((r\sin\theta\cos\phi)^2-(r\sin\theta\sin\phi)+i2r^2\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi)\\
&=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}(x^2-y^2+2ixy)\\
&=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(-x-iy)^2
\end{aligned}$$

他も同様に変形すると

$$\begin{aligned}
&r^2Y_{2,\pm2}(\theta,\phi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}r^2\sin^2\theta e^{\pm2i\phi}=\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{1}{2}(\mp x-iy)^2\\
&r^2Y_{2,\pm1}(\theta,\phi)=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}r^2\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}=\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(\mp x-iy)z\\
&r^2Y_{2,0}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)=\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sqrt{\frac{1}{6}}(2z^2-x^2-y^2)
\end{aligned}$$

これらを成分 $q=0,\pm1,\pm2$ に当てはめることで位置の成分に対応する 2 階球面テンソル $T_q^{(2)}$ になります。

ここから演算子の表記を上で設定した場合に戻します。

ウィグナー・エッカルトの定理は spherical basis でのベクトル演算子 T_q で書かれており、それは 1 階球面テンソル演算子 $T_q^{(1)}$ なので、ウィグナー・エッカルトの定理はそのまま $T_q^{(k)}$ に拡張できます。

k 階球面テンソル演算子は $Y_{k,m}$ と同じ変換をするとしているので、D 行列による変換

$$Y_{k,m}(\theta',\phi')=\sum_{m'}(D^{(k)}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma))^*Y_{k,m'}(\theta,\phi)$$

と、1 階球面テンソルであるベクトル演算子の変換 (11) から、$T_q^{(k)}$ は

$$U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)T_q^{(k)}U(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_{q'}(D^{(k)}_{qq'}(\alpha,\beta,\gamma))^*T^{(k)}_{q'}$$

と変換されます。このため、交換関係も (7),(8) と同じように

$$\begin{aligned}
&[J_z,T_q^{(k)}]=\hbar qT_q^{(k)}\\
&[J_\pm,T_q^{(k)}]=\hbar\sqrt{k(k+1)-q(q\pm1)}T^{(k)}_{q\pm1}\qquad(q=0,\pm1,\pm2,\ldots)
\end{aligned}$$

となり、後は同じことをするだけです。よって、球面テンソル演算子によるウィグナー・エッカルトの定理は

$$\langle j',m'|T_q^{(k)}|j,m\rangle=\langle j,m;k,q|(j,k);j',m'\rangle\langle j'||T^{(k)}||j\rangle$$

大きな違いは $\langle j'||T^{(k)}||j\rangle$ に k の依存性が加わることです。

・補足

(11) を求めます。D 行列はオイラー角による回転演算子 $U(\alpha,\beta,\gamma)$ から

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=\langle j,m'|U(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle$$

これの複素共役は

$$(D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma))^*=\langle j,m|U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)|j,m'\rangle$$

ベクトル演算子の定義 (**??**) の左辺をオイラー角による回転演算子として

$$U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)T_qU(\alpha,\beta,\gamma)=e^{i\gamma J_z/\hbar}e^{i\beta J_y/\hbar}e^{i\alpha J_z/\hbar}T_qe^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar}e^{-i\gamma J_z/\hbar}$$

ハウスドルフの公式（A,B は演算子、λ は定数）

$$e^{-\lambda A}Be^{\lambda A}=B-[A,B]\lambda+\frac{1}{2!}[A,[A,B]]\lambda^2-\frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]]\lambda^3+\cdots$$

を使うと

$$\begin{aligned}e^{i\alpha J_z/\hbar}T_qe^{-i\alpha J_z/\hbar}&=T_q+\frac{i\alpha}{\hbar}[J_z,T_q]+\frac{1}{2!}(\frac{i\alpha}{\hbar})^2[J_z,[J_z,T_q]]+\cdots\\&=T_q+\frac{i\alpha}{\hbar}\sum_{r=\pm1,0}T_r\langle r|J_z|q\rangle+\frac{1}{2!}(\frac{i\alpha}{\hbar})^2[J_z,\sum_{r=\pm1,0}T_r\langle r|J_z|q\rangle]+\cdots\end{aligned}$$

ごちゃごちゃするので $|j,m\rangle$ での j を省いて書いています。第 3 項は

$$\begin{aligned}[J_z,\sum_{r=\pm1,0}T_r\langle r|J_z|q\rangle]&=\sum_{r=\pm1,0}[J_z,T_r]\langle r|J_z|q\rangle\\&=\sum_{r,s=\pm1,0}T_s\langle s|J_z|r\rangle\langle r|J_z|q\rangle\\&=\sum_{s=\pm1,0}T_s\langle s|J_z^2|q\rangle\end{aligned}$$

となるので

$$
\begin{aligned}
e^{i\alpha J_z/\hbar}T_q e^{-i\alpha J_z/\hbar} &= T_q + \frac{i\alpha}{\hbar}\sum_{r=\pm1,0} T_r\langle r|J_z|q\rangle + \frac{1}{2!}(\frac{i\alpha}{\hbar})^2\sum_{r=\pm1,0} T_r\langle r|J_z^2|q\rangle + \cdots \\
&= \sum_{r=\pm1,0} T_r(\delta_{qr} + \frac{i\alpha}{\hbar}\langle r|J_z|q\rangle + \frac{1}{2!}(\frac{i\alpha}{\hbar})^2\langle r|J_z^2|q\rangle + \cdots) \\
&= \sum_{r=\pm1,0} T_r\langle r|(1 + \frac{i\alpha}{\hbar}J_z + \frac{1}{2!}(\frac{i\alpha}{\hbar})^2 J_z^2 + \cdots)|q\rangle \\
&= \sum_{r=\pm1,0} T_r\langle r|\exp[\frac{i}{\hbar}\alpha J_z]|q\rangle
\end{aligned}
$$

これに外から βJ_y の回転演算子を作用させ

$$
e^{i\beta J_y/\hbar}e^{i\alpha J_z/\hbar}T_q e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar} = \sum_{r=\pm1,0} e^{i\beta J_y/\hbar}T_r e^{-i\beta J_y/\hbar}\langle r|\exp[\frac{i}{\hbar}\alpha J_z]|q\rangle
$$

これは J_z が J_y、α が β に変わっただけなので

$$
\begin{aligned}
\sum_{r=\pm1,0} e^{i\beta J_y/\hbar}T_r e^{-i\beta J_y/\hbar}\langle r|\exp[\frac{i}{\hbar}\alpha J_z]|q\rangle &= \sum_{r,s=\pm1,0} T_s\langle s|\exp[\frac{i}{\hbar}\beta J_y]|r\rangle\langle r|\exp[\frac{i}{\hbar}\alpha J_z]|q\rangle \\
&= \sum_{s=\pm1,0} T_s\langle s|\exp[\frac{i}{\hbar}\beta J_y]\exp[\frac{i}{\hbar}\alpha J_z]|q\rangle
\end{aligned}
$$

最後に γJ_z を同様に作用させることで

$$
\begin{aligned}
U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)T_q U(\alpha,\beta,\gamma) &= \sum_{q'=\pm1,0} T_{q'}\langle j,q'|\exp[\frac{i}{\hbar}\gamma J_z]\exp[\frac{i}{\hbar}\beta J_y]\exp[\frac{i}{\hbar}\alpha J_z]|j,q\rangle \\
&= \sum_{q'=\pm1,0} T_{q'}\langle j,q'|U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)|j,q\rangle \\
&= \sum_{q'=\pm1,0} (D^{(j)}_{qq'}(\alpha,\beta,\gamma))^* T_{q'}
\end{aligned}
$$