

Министерство образования и науки РФ

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет

Квантовая физика

Том 2

Атом в центральном поле

Учебное пособие

Автор: Зелевинский В. Г.

Редактор перевода: д.ф.-м.н. Дмитриев В. Ф.

Рецензент: д.ф.-м.н., профессор Сербо В. Г.

Учебное пособие содержит современное изложение основных фундаментальных положений квантовой физики с их применением в атомной и ядерной физике. втором томе курса подробно рассматривается строение атома на примере атома водорода, обсуждаются тонкие и сверхтонкие эффекты. Вводится спин и алгебра моментов, а также её приложения к движению в центральном поле. Строится стационарная теория возмущений и обсуждается влияние внешних электрических и магнитных полей на атомные спектры. Разделы глав, наряду с теорией, включают задачи и их решения в количестве, достаточном для полноценного усвоения материала. Издание предназначено для студентов физических и физико-технических факультетов университетов.

Учебное пособие подготовлено в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ на 2009–2018 гг.

Оглавление

1	Момент импульса и сферические функции	1
1.1	Угловой момент как генератор вращений	1
1.2	Спин	3
1.3	Мультиплеты углового момента	5
1.4	Матричные элементы момента импульса	12
1.5	Реализация алгебры орбитального момента	16
1.6	Построение множества сферических функций	19
1.7	Простейшие свойства сферических	21
1.8	Скаляры и векторы	22
1.9	Тензоры второго ранга	27
1.10	Сферические функции и полиномы Лежандра	30
1.11	Угловой момент во внешнем поле	34
2	Движение в центральном поле	39
2.1	Приведение к задаче одного тела	39
2.2	Разделение угловых переменных	42
2.3	Радиальная часть уравнения Шредингера	46
2.4	Свободное движение	50
2.5	Плоская и сферическая волны	56
2.6	Сферическая потенциальная яма	58
2.7	Короткодействующий потенциал	62
2.8	Добавление второго центра	63
2.9	Трехмерный гармонический осциллятор	66
3	Атом водорода	71
3.1	Связанные состояния	71
3.2	Основное состояние	74
3.3	Дискретный спектр	76
3.4	Операторное решение	86

3.5	На пути к прецизионной спектроскопии	89
3.6	Решение в параболических координатах	90
3.7	Состояния континуума	93
4	Стационарное возмущение	99
4.1	Введение	99
4.2	Теория возмущения без вырождения	101
4.3	Сходимость	106
4.4	Случай близкорасположенных уровней	109
4.5	Адиабатическое приближение	110
4.6	Молекулярный ион водорода	115
4.7	Взаимодействия атомов на больших расстояниях	120
5	Спин 1/2	123
5.1	$SU(2)$ группа	123
5.2	Спин 1/2: алгебра	125
5.3	Спиноры	130
5.4	Магнитный резонанс	135
5.5	Преобразование обращения времени и теорема Крамера	138
5.6	Состояния сопряженные по времени	139
5.7	Спиноры как кубиты	141
6	Конечные вращения и тензорные операторы	147
6.1	Матрицы конечных вращений	147
6.2	Сферические функции как матричные элементы конечных вращений	149
6.3	Теорема сложения	153
6.4	Преобразование операторов	155
6.5	Введение в правила отбора	158
6.6	Электромагнитные мультиполи	159
7	Сложение угловых моментов	165
7.1	Две подсистемы	165
7.2	Разложение приводимых представлений	168
7.3	Две частицы спина 1/2	170
7.4	Тензорные операторы и обобщённые правила отбора	175
7.5	Приложение к электромагнитным мультиполям	177
7.6	Векторное сложение угловых моментов	179
7.7	Теорема Вигнера–Эккарта	183
7.8	Векторная модель	184

7.9	Электрический дипольный момент и анапольный момент	187
7.10	Ряды Клебша–Гордана	188
8	Тонкая и сверхтонкая структура	191
8.1	Спин-орбитальное взаимодействие	191
8.2	Спин-орбитальное расщепление	193
8.3	Тонкая структура атома водорода	198
8.4	Тонкая структура в сложных атомах	201
8.5	Магнитный момент и спин-орбитальное взаимодействие	203
8.6	Магнитная сверхтонкая структура	207
8.7	Пример: один валентный электрон	210
8.8	Квадрупольная сверхтонкая структура	213
9	Атом в статическом поле	217
9.1	Поляризуемость в постоянном электрическом поле	217
9.2	Эффект Штарка	219
9.3	Поляризуемость атома водорода	221
9.4	Эффект Штарка в атоме водорода	223
9.5	Неоднородное электрическое поле и дополнительные комментарии	225
9.6	Классический эффект Зеемана	226
9.7	Квантовая система в магнитном поле	228
9.8	Нормальный квантовый эффект Зеемана	229
9.9	Аномальный квантовый эффект Зеемана	231
9.10	Более сильное магнитное поле	232
9.11	Диамагнетизм	235
9.12	К действительно сильным магнитным полям	237
	Литература	241

Природа — это бесконечная сфера,
центр которой везде, а окружность —
нигде.

Б. Паскаль, *Мысли*

Глава 1

Момент импульса и сферические функции

1.1 Угловой момент как генератор вращений

Мы уже встречались несколько раз с оператором $\hat{\ell}$ орбитального момента (I.4.34). Коммутационные соотношения между его компонентами были получены в *Задаче I.4.5*. В разделе I.4.7 мы ввели преобразования вращения и интерпретировали оператор орбитального момента как генератор вращений. Позднее, в разделе I.7.10, мы кратко обсудили сохранение углового момента. Орбитальный момент относительно неподвижной оси появился снова в задаче двумерного осциллятора, разделе I.11.5, и мы ввели лестничные компоненты \hat{V}_{\pm} векторных операторов, уравнение (I.11.104), которые меняют проекцию орбитального момента ℓ_z на ± 1 .

Теперь нашей целью является отслеживание общих геометрических и алгебраических свойств углового момента в квантовой механике, чтобы связать их с интуитивной картиной вращения. В отсутствие внешних полей, конечный объект в покое (в системе отсчета, где полный линейный импульс равен нулю, $\mathbf{P} = 0$), можно характеризовать сохраняющимся вектором полного углового момента \mathbf{J} ; орбитальный момент $\vec{\ell}$ частицы, уравнение (I.4.34), является частным случаем.

Оператор полного углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ является *генератором*, разделе I.6.10, бесконечно малых вращений. Вращения в трехмерном пространстве требуют трех углов для их параметризации, например, полярный и азимутальный углы оси вращения по отношению к некоторой фиксированной системы координат, и угол поворота вокруг этой оси. Рассмотрим поворот на бесконечно малый угол $\delta\alpha$ вокруг оси, которая характеризуется единичным вектором \mathbf{n} . При таком вращении, волновая функция ψ меняется на величину, пропорциональную $\delta\alpha$. Это преобразование, $\hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\delta\alpha)$, генерируется посредством действия оператора $(\mathbf{J} \cdot \mathbf{n})$, который является проекцией

углового момента на ось вращения,

$$\psi \rightarrow \psi' = \left(1 - i(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n})\delta\alpha\right)\psi; \quad (1.1)$$

здесь и всегда мы будем измерять все операторы углового момента в единицах \hbar . Уравнение (1.1) есть не что иное, как *определение* оператора углового момента для данной системы; мы должны найти преобразованную волновую функцию явным образом и сравнить результат с уравнением (1.1) для того, чтобы определить оператор $\hat{\mathbf{J}}$. Хотя конкретная форма оператора углового момента различна для разных систем, его роль как генератора вращений в трехмерном пространстве приводит к *универсальной* алгебре.

Конечный поворот на угол α , сравните (I.4.49) и (I.4.52), может быть получен как предел большого числа, $N \rightarrow \infty$, последовательных малых поворотов на $\delta\alpha = \alpha/N$ вокруг одной и той же оси. Оператор конечного поворота имеет вид

$$\hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - i(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n}) \frac{\alpha}{N}\right)^N = \exp\left(-i(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n})\alpha\right). \quad (1.2)$$

Здесь мы воспользовались тем, что повороты на разные углы вокруг одной и той же оси коммутируют. Повороты сохраняют скалярные произведения между векторами состояний в гильбертовом пространстве: амплитуды не меняются при любом вращении $\hat{\mathcal{R}}$ всего пространства,

$$\langle \psi'_2 | \psi'_1 \rangle \equiv \langle \hat{\mathcal{R}}\psi_2 | \hat{\mathcal{R}}\psi_1 \rangle \equiv \langle \psi_2 | \hat{\mathcal{R}}^\dagger \hat{\mathcal{R}} \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle. \quad (1.3)$$

Поэтому оператор преобразования (1.2) должен быть *унитарным*,

$$\hat{\mathcal{R}}^\dagger \hat{\mathcal{R}} = 1 \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathcal{R}}^\dagger = \hat{\mathcal{R}}^{-1}. \quad (1.4)$$

Любой унитарный оператор \hat{U} может быть выражен, уравнение (6.112), как

$$\hat{U} = e^{i\hat{G}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\hat{G})^n}{n!}, \quad (1.5)$$

где экспонента является символическим представлением бесконечного ряда и генератор \hat{G} унитарного преобразования, $\hat{\mathbf{J}}$ в нашем случае, эрмитов.

В частном случае *орбитального момента* частицы, $\hat{\mathbf{J}} \Rightarrow \hat{\ell}$, удобно иметь дело непосредственно с координатным представлением $\psi(\mathbf{r})$ волновой функции частицы. Результат преобразования $\psi(\mathbf{r})$ при вращении известен: после

поворота, в точке \mathbf{r} значение волновой функции будет таким же, каким он был перед поворотом в точке $\hat{\mathcal{R}}^{-1}\mathbf{r}$, где $\hat{\mathcal{R}}^{-1}$ обозначает обратное вращение,

$$\psi'(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\hat{\mathcal{R}}^{-1}\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

Как показано в разделе I.4.7, это определяет орбитальный момент стандартным в механике способом (I.4.34).

Наше определение поворота (1.6) означает, что мы поворачиваем физический объект ("*активная интерпретация*"). Вращение системы координат ("*пассивная интерпретация*") эквивалентно, с точки зрения преобразований, к противоположному повороту системы. Соответствующие операторы конечного вращения были бы сопряжены к нашим операторам (1.2). Это различие подчеркивает причину появления обратного преобразования в уравнении (1.6). Координатная волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ есть, в обозначениях Дирака, проекция $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ вектора состояния $|\psi\rangle$ на локализованное состояние $|\mathbf{r}\rangle$. Нас интересует координатная волновая функция $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathcal{R}}\psi \rangle$ повернутого состояния $\hat{\mathcal{R}}|\psi\rangle$. Но для унитарного преобразования $\hat{\mathcal{R}}$ имеем

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathcal{R}}\psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{R}}^\dagger \mathbf{r} | \psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{R}}^{-1} \mathbf{r} | \psi \rangle, \quad (1.7)$$

что как раз то, что нам нужно в свете уравнения (1.6). Здесь $\hat{\mathcal{R}}\psi$ поворачивает физическую систему, тогда как $\hat{\mathcal{R}}^{-1}\mathbf{r}$ вращает точку наблюдения в противоположном направлении; эти амплитуды совпадают.

1.2 Спин

В общем случае, результат вращения не может быть сведен к явному преобразованию координат (1.6). Волновая функция может состоять из нескольких компонентов, которые подвергаются линейному преобразованию при вращении, в дополнение к преобразованию (1.6) их координатной зависимости. Такими компонентами могут описываться различные *внутренние* состояния объекта, и обычно эти компоненты называются *спиновыми* степенями свободы. Если $\hat{\mathbf{S}}$ является векторным генератором (1.1) этого преобразования, суммарный эффект вращения на волновую функцию системы описывается *полным* угловым моментом,

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}, \quad (1.8)$$

где $\hat{\mathbf{L}}$ обобщает одночастичный орбитальный момент $\vec{\ell}$, уравнение (I.4.34), на произвольную систему. Для многочастичной системы, глобальное вращение одинаково действует на все частицы, так что полный орбитальный момент

являются *аддитивной* комбинацией одночастичных моментов (полный угловой момент $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\vec{\ell}} + \hat{\mathbf{s}}$ частицы состоит из ее орбитального и спинового моментов)

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_a \hat{\mathbf{j}}_a, \quad \hat{\mathbf{L}} = \sum_a \hat{\vec{\ell}}_a, \quad \hat{\mathbf{S}} = \sum_a \hat{\mathbf{s}}_a; \quad \hat{\mathbf{j}}_a = \hat{\vec{\ell}}_a + \hat{\mathbf{s}}_a. \quad (1.9)$$

В качестве естественного примера рассмотрим *векторную функцию* $\mathbf{V}(\mathbf{r})$. В каждой точке \mathbf{r} мы имеем три функции $V_i(\mathbf{r})$, но они являются компонентами одного и того же векторного объекта. При поворотах не только каждая из этих функций должна быть преобразована так, как отмечено раньше, но, кроме этого, компоненты V_i преобразуются между собой так, как это происходит для постоянного вектора \mathbf{V} без координатной зависимости. Покажем явный вид этого сочетания преобразований.

Для произвольного вращения $\hat{\mathcal{R}}$, имеем

$$\hat{\mathcal{R}}V_x(x, y, z) = V'_x(\hat{\mathcal{R}}^{-1}x, \hat{\mathcal{R}}^{-1}y, \hat{\mathcal{R}}^{-1}z), \quad (1.10)$$

где обозначение \mathbf{V}' означает, что компоненты вектора также претерпевают трансформацию. Как мы видели в (I.4.88), для бесконечно малого вращения $\hat{\mathcal{R}}_z(\delta\alpha)$ на угол $\delta\alpha$ вокруг оси z ,

$$\hat{\mathcal{R}}^{-1}x = x + \delta\alpha y, \quad \hat{\mathcal{R}}^{-1}y = y - \delta\alpha x, \quad \hat{\mathcal{R}}^{-1}z = z. \quad (1.11)$$

Это показывает, какие аргументы должны иметь вектора, как функций координат, в правой части уравнения (1.10). С другой стороны, в дополнение к этому параллельному переносу, вектор \mathbf{V} сам поворачивается вокруг оси z на угол $\delta\alpha$ так, что его азимутальный угол φ_0 становится $\varphi_0 + \delta\alpha$ (углы с индексом θ характеризуют направление вектора \mathbf{V} , а не радиус-вектора точки \mathbf{r}). Тогда

$$V'_x = |\mathbf{V}| \sin \theta_0 \cos(\varphi_0 + \delta\alpha) \approx V_x - \delta\alpha V_y, \quad (1.12)$$

и, аналогично,

$$V'_y \approx V_y + \delta\alpha V_x, \quad V'_z = V_z. \quad (1.13)$$

Результат преобразования компонент (заметим снова, что это преобразование имеет знак, соответствующий активной интерпретации вращения и противоположный тому, который имеет преобразование аргументов волновой функции) может быть выражен как действие 3×3 матрицы \hat{S}_z на

матрицу-столбец с элементами V_i ,

$$\hat{\mathcal{R}}_z(\delta\alpha)\mathbf{V} = (1 - i\delta\alpha\hat{S}_z)\mathbf{V}, \quad \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Задача 1.1

Построить матрицы \hat{S}_x и \hat{S}_y и показать, что все матричные элементы матриц \hat{S}_j , $j = x, y, z$, можно записать в виде

$$(\hat{S}_j)_{kl} = -i\epsilon_{jkl}. \quad (1.15)$$

Итоговое бесконечно малое преобразование нашей вектор-функции имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{R}}_z(\delta\alpha)V_x(\mathbf{r}) &= V'_x(x + y\delta\alpha, y - x\delta\alpha, z) \\ &= V_x(x + y\delta\alpha, y - x\delta\alpha, z) - \delta\alpha V_y(x + y\delta\alpha, y - x\delta\alpha, z), \end{aligned} \quad (1.16)$$

или, собирая все члены первого порядка по $\delta\alpha$,

$$\hat{\mathcal{R}}_z(\delta\alpha)V_x(\mathbf{r}) = V_x(x, y, z) - \delta\alpha V_y(x, y, z) - \delta\alpha \left(x \frac{\partial V_x}{\partial y} - y \frac{\partial V_x}{\partial x} \right). \quad (1.17)$$

В операторной форме, это означает, что для векторного поля

$$\hat{\mathcal{R}}_z(\delta\alpha) = 1 - i\delta\alpha(\hat{S}_z + \hat{L}_z) = 1 - i\delta\alpha\hat{J}_z, \quad (1.18)$$

где орбитальный момент $\hat{\mathbf{L}}$, как обычно, имеет вид $-i[\mathbf{r} \times \nabla]$. Конечные повороты требуют возведения в степень полного оператора углового момента, как в (1.2). Мы должны подчеркнуть, что операторы $\hat{\mathbf{S}}$ и $\hat{\mathbf{L}}$ действуют на различные переменные, и поэтому они всегда коммутируют.

1.3 Мультиплеты углового момента

Используя только коммутационные соотношения, можно решить задачу классификации всех возможных собственных состояний углового момента. Этот вывод может служить прототипом для более сложных ситуаций.

Как ясно из элементарных геометрических соображений, результат двух последовательных поворотов вокруг *различных* осей зависит от их порядка, — соответствующие операторы вращения не коммутируют, *Задача I.4.5.*

Коммутационные соотношения углового момента являются одинаковыми, независимо от специфики системы: они отражают геометрию трехмерных вращений.

Задача 1.2

Докажите, что 3×3 спинорные матрицы \hat{S}_j вращательного преобразования компонент вектора, уравнение eq. (1.15), удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k, \quad (1.19)$$

аналогичным коммутационным соотношениям орбитального момента (I.4.37).

Решение Прямой расчет матричного элемента коммутатора матриц (1.15), с помощью уравнений (I.4.39), дает

$$\begin{aligned} [\hat{S}_j, \hat{S}_k]_{lm} &= (S_j)_{ln}(S_k)_{nm} - (S_k)_{ln}(S_j)_{nm} \\ &= -\varepsilon_{jln}\varepsilon_{knm} + \varepsilon_{kln}\varepsilon_{jnm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl} = \varepsilon_{jkn}\varepsilon_{lmn} = i\varepsilon_{jkn}(S_n)_{lm}, \end{aligned} \quad (1.20)$$

что эквивалентно (1.19).

Так как коммутационные соотношения выявляют геометрическую связь между поворотами, они должны быть одинаковыми для любого оператора углового момента $\hat{\mathbf{J}}$, спинорного или орбитального, одночастичного или многочастичного,

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k. \quad (1.21)$$

Иногда это символически записывается так

$$[\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}}] = i\hat{\mathbf{J}}. \quad (1.22)$$

Компоненты импульса \hat{p}_j коммутируют, так как эти операторы порождают сдвиги декартовых координат (I.4.52), и результат двух последовательных сдвигов не зависит от их порядка (сдвиги составляют *абелеву* группу в отличие от *неабелевой* группы вращений). Как следует из алгебры (1.21), различные компоненты $\hat{\mathbf{J}}$ не могут иметь одновременно определенные значения.

Важнейшим новым элементом, который появляется в этой алгебре, является возможность построить оператор \hat{C} , так называемый *оператор Казимира*, который коммутирует со всеми генераторами \hat{J}_k . Конечно, любая функция от \hat{C} также удовлетворяет этому условию, но более сложная

алгебра может иметь несколько *независимых* операторов Казимира. Легко видеть, что абсолютное значение квадрата момента импульса, $\hat{\mathbf{J}}^2$, играет роль оператора Казимира, вспомним *Задачу I.4.5 b*,

$$[\hat{J}_k, \hat{\mathbf{J}}^2] = [\hat{J}_k, \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2] = 0. \quad (1.23)$$

Одна из проекций углового момента, скажем \hat{J}_z , и оператор Казимира $\hat{\mathbf{J}}^2$ могут иметь определенные значения одновременно. Как мы это видели на примере орбитального момента, такая маркировка векторов состояния связана с выбором оси квантования и поэтому означает видимое нарушение вращательной симметрии. Симметрия восстанавливается потенциальной возможностью перехода в другой, повернутой системе координат.

Вместо двух эрмитовых компонент углового момента в плоскости, поперечной к оси квантования, \hat{J}_x и \hat{J}_y , введем два новых оператора, эрмитово сопряженных друг с другом, сравните с уравнением (I.11.104),

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_{+} = (\hat{J}_{-})^{\dagger}. \quad (1.24)$$

Согласно (1.21), эти операторы удовлетворяют соотношениям

$$[\hat{J}_{\mp}, \hat{J}_z] = \pm \hat{J}_{\mp}, \quad (1.25)$$

$$[\hat{J}_{-}, \hat{J}_{+}] = -2\hat{J}_z. \quad (1.26)$$

Первое соотношение (1.25) имеет *лестничный* вид (I.11.105), и оно на самом деле справедливо для \pm компонент (I.11.104) любого векторного оператора. Начиная с состояния с определенным значением M проекции \hat{J}_z , оператор \hat{J}_{-} уменьшает это собственное значение, $M \rightarrow M - 1$, в то время как \hat{J}_{+} увеличивает его, $M \rightarrow M + 1$. Пусть начальное состояние, помимо M , также имеет определенное значение $\hat{\mathbf{J}}^2$. Оператор Казимира коммутирует с \hat{J}_{\pm} , поэтому все состояния, которые составляют лестницу различных значений M , имеют одно и тот же значение $\hat{C} = \hat{\mathbf{J}}^2$. Геометрически это означает, что операторы \hat{J}_{\pm} генерируют небольшие повороты вокруг вертикальных осей, которые изменяют ориентацию (проекцию $J_z = M$) вектора углового момента относительно оси квантования но не меняют его абсолютного значения, которое инвариантно относительно вращений и характеризует лестницу в целом.

Рассмотрим *лестничное семейство* или *мультиплет*, состояний с заданным значением \mathbf{J}^2 и различными значениями M . Так как для любого состояния из лестницы

$$C = \langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle = \langle \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \rangle \geq \langle \hat{J}_z^2 \rangle = M^2, \quad (1.27)$$

лестница не может быть бесконечной, она заканчивается (в обоих направлениях) при некоторых предельных значениях M_{\max} и M_{\min} . Эти значения определяются величиной C оператора Казимира для рассматриваемого семейства. На верхней (нижней) границе мультиплета действие повышающего (понижающего) оператора должен дать нуль, подобно уравнению (I.11.112) для алгебры Гейзенберга-Вейля. Используя эквивалентные выражения для оператора Казимира, которые следуют из (1.23) и (1.26),

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2 &= \hat{J}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) \\ &= \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z = \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z,\end{aligned}\quad (1.28)$$

и имея в виду, что среднее значение C одно и то же для всей лестницы, после применения двух последних выражений (1.28) к состояниям с M_{\min} и M_{\max} соответственно, получаем

$$C = M_{\min}^2 - M_{\min} = M_{\max}^2 + M_{\max}.\quad (1.29)$$

Соответствующее решение есть $M_{\min} = -M_{\max}$. Максимально возможную проекцию M_{\max} будем обозначать через J . Обычно это число просто называется "угловым моментом" и оператор Казимира через него выражается так

$$C = J(J + 1).\quad (1.30)$$

Как отмечалось в разделе I.5.11 в связи соотношением неопределенностей, значение оператора Казимира $\hat{\mathbf{J}}^2$ в мультиплете $|JM\rangle$ больше, чем квадрат максимальной проекции $M_{\max}^2 = J^2$. В состоянии с определенными значениями $\hat{\mathbf{J}}^2$ и \hat{J}_z , некоммутирующие с \hat{J}_z поперечные компоненты $\hat{J}_{x,y}$ момента импульса не могут иметь определенные значения, что имело бы место в случае, если можно было бы направить вектор \mathbf{J} по оси z и получить $\mathbf{J}^2 = J_z^2 = M_{\max}^2$. Различие связано с квантовыми флуктуациями $J_x^2 + J_y^2$. Другими словами, невозможно построить состояние с определенным значением момента импульса и определенной ориентацией в пространстве, например, вдоль оси квантования (из классической механики мы помним, что компоненты момента импульса канонически сопряжены с угловыми координатами). Уравнения (1.21) или (1.26) приводят к соотношению неопределенностей (I.6.163), $(\Delta J_x)(\Delta J_y) \geq |\langle J_z \rangle|/2$.

Начиная с наинизшего состояния $M_{\min} = -M_{\max} = -J$ и применяя повышающий оператор \hat{J}_+ , можно построить всю лестницу. Число шагов k

от $M = -J$ до $M = +J$ всегда целое и составляет $2J$. Поэтому возможны только *целые* и *полуцелые* значения J .

Соответственно, значения проекции M по состояниям лестницы все целые или все полуцелые. Состояния в мультиплете могут быть помечены как $|JM\rangle$, т. е. общим значением J (имя мультиплета) и отдельным ярлыком M (персональное имя члена семейства), где $-J \leq M \leq +J$. Общее количество состояний в семействе (*в мультиплете*) $|JM\rangle$ равно $k + 1 = 2J + 1$.

Задача 1.3

Найти явные выражения для собственных функций χ_σ со спином $S = 1$ и с проекцией $\hat{S}_z = \sigma$.

Решение Нормированные функции имеют вид

$$\chi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Заметим, что эти три-компонентные функции (мы использовали здесь декартовый базис) можно рассматривать как комплексные *вектора* $\vec{\chi}$ с компонентами (x, y, z) записанными вертикально. Если \mathbf{e}_i — ортонормированные вектора декартовой системы, решения (1.31) можно записать в виде

$$\vec{\chi}_0 = \mathbf{e}_z, \quad \vec{\chi}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y), \quad (\vec{\chi}_\sigma^\dagger \cdot \vec{\chi}_{\sigma'}) = \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (1.32)$$

Задача 1.4

Рассмотрим некоторое состояние $|JM\rangle$ с квантовыми числами углового момента J и $J_z = M$. Найти среднее значение и среднеквадратичное отклонение проекции углового момента $(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e})$ на произвольный единичный вектор \mathbf{e} .

Решение Пусть направление \mathbf{e} характеризуется полярным углом β и азимутальным углом α в координатной системе с полярной осью вдоль оси первоначального квантования z . Нас интересует оператор

$$(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e}) = \hat{J}_x \sin \beta \cos \alpha + \hat{J}_y \sin \beta \sin \alpha + \hat{J}_z \cos \beta. \quad (1.33)$$

Поскольку поперечные компоненты $\hat{J}_{x,y}$, будучи линейными комбинациями из \hat{J}_{\pm} , имеют нулевые средние значения в состоянии $|JM\rangle$, то

$$\langle (\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e}) \rangle = \langle \hat{J}_z \rangle \cos \beta = M \cos \beta. \quad (1.34)$$

Для расчета среднеквадратичной флуктуации интересующего нас оператора, мы должны знать средние значения квадратов и перекрестных произведений его компонент (нужно следить за порядком операторов). Комбинации $\hat{J}_{x,y}\hat{J}_z + \hat{J}_z\hat{J}_{x,y}$ имеют нулевые средние значения по той же причине, что и $\hat{J}_{x,y}$. Чтобы найти другие вклады, заметим, что \hat{J}_+^2 имеет ненулевые матричные элементы только с $\Delta M = 2$. Таким образом, ее среднее значение равно нулю,

$$\langle (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)^2 \rangle = \langle \hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2 + i(\hat{J}_x\hat{J}_y + \hat{J}_y\hat{J}_x) \rangle = 0. \quad (1.35)$$

Средние значения эрмитовых операторов являются вещественными числами, так что здесь действительная и мнимая части должны исчезать по отдельности,

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \langle \hat{J}_y^2 \rangle, \quad (1.36)$$

$$\langle \hat{J}_x\hat{J}_y \rangle = -\langle \hat{J}_y\hat{J}_x \rangle. \quad (1.37)$$

Уравнение (1.36) вместе с (1.30) определяет среднее значение (I.5.91) поперечных флуктуации в соответствии с указанной выше неопределенностью,

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \langle \hat{J}_y^2 \rangle = \frac{1}{2}[J(J+1) - M^2]. \quad (1.38)$$

Коммутатор (1.21) определяет

$$\langle \hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x \rangle = iM \quad \rightsquigarrow \quad \langle \hat{J}_x\hat{J}_y \rangle = -\langle \hat{J}_y\hat{J}_x \rangle = \frac{i}{2}M. \quad (1.39)$$

Таким образом, все перекрестные члены в $\langle (\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e})^2 \rangle$ исчезают, и

$$\begin{aligned} \langle (\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e})^2 \rangle &= \langle \hat{J}_x^2 \rangle \sin^2 \beta \cos^2 \alpha + \langle \hat{J}_y^2 \rangle \sin^2 \beta \sin^2 \alpha + \langle \hat{J}_z^2 \rangle \cos^2 \beta \\ &= \frac{1}{2}[J(J+1) - M^2] \sin^2 \beta + M^2 \cos^2 \beta. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Как следствие азимутальной симметрии задачи, нет зависимости от азимутального угла α после усреднения поперечных компонент. Из (1.34) и (1.40) получаем неопределенность (дисперсию) проекции (1.33):

$$(\Delta(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e}))^2 = \frac{1}{2}[J(J+1) - M^2] \sin^2 \beta. \quad (1.41)$$

Как и должно быть, эта флуктуация обращается в нуль при $\beta = 0$ (оси z и \mathbf{e} совпадают), минимальная дисперсия соответствует состоянию с $M = J$, которое максимально выстроена вдоль z .

Задача 1.5

Пучок частиц со спином $J = 1$ подготовлен поляризатором в состоянии с $J_z = M$. Найти долю интенсивности пучка прошедшего через анализатор, который пропускает частицы с проекцией M' на ось \mathbf{e} , которая характеризуется полярным углом β и азимутальным углом α , рис. 1.1.

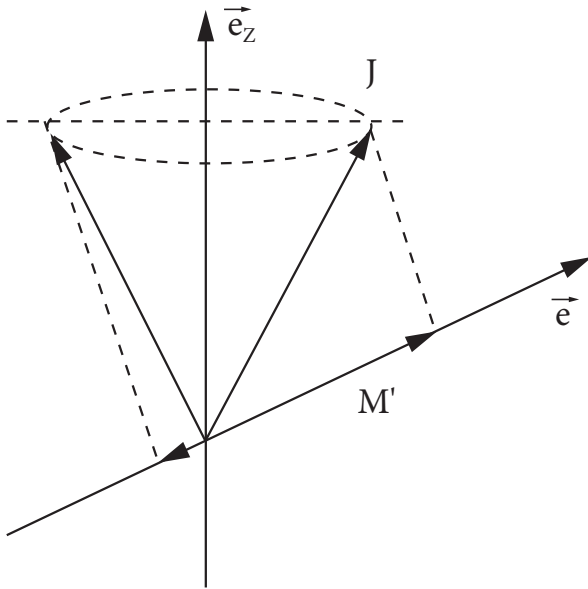


Рис. 1.1. Установка для Задачи 1.5.

Решение Классическая картина соответствует нахождению проекции различных направлений спина от конической поверхности вокруг оси \mathbf{e}_z на ось \mathbf{e} . Коэффициенты пропускания $T(M'|M)$ представляют собой вероятности нахождения частицы с проекцией $(\mathbf{J} \cdot \mathbf{e}) = M'$ в состоянии с $J_z = M$. Здесь как M , так и M' могут принимать значения 0 и ± 1 . Передаточные коэффициенты удовлетворяют очевидным уравнениям

$$\sum_{M'} T(M'|M) = 1, \quad \sum_{M'} M' T(M'|M) = \langle (\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e}) \rangle, \quad \sum_{M'} M'^2 T(M'|M) = \langle (\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e})^2 \rangle. \quad (1.42)$$

Средние значения здесь были найдены в (1.34) и (1.40). Два последних уравнения не содержат $T(0|M)$,

$$T(1|M) - T(-1|M) = M \cos \beta, \quad (1.43)$$

$$T(1|M) + T(-1|M) = M^2 \cos^2 \beta + \frac{1}{2}(2 - M^2) \sin^2 \beta, \quad (1.44)$$

и определяют

$$T(\pm 1|M) = \frac{1}{2} \left\{ \left(1 - \frac{M^2}{2} \right) \sin^2 \beta + M^2 \cos^2 \beta \pm M \cos \beta \right\}. \quad (1.45)$$

Этот результат снова не зависит от α и для $\beta \rightarrow 0$ сводится к

$$T(\pm 1|M) = \frac{1}{2}(M^2 \pm M); \quad (1.46)$$

это выражение равно единице для $M = \pm 1$ и исчезает при $M = \mp 1$ и $M = 0$ из-за ортогональности соответствующих состояний. Из первого уравнения (1.42) и уравнения (1.44) находим

$$T(0|M) = 1 - M^2 \cos^2 \beta - \frac{1}{2}(2 - M^2) \sin^2 \beta, \quad (1.47)$$

что при $\beta \rightarrow 0$ равно 1 для $M = 0$ и 0 для $M = \pm 1$.

1.4 Матричные элементы момента импульса

Теперь мы можем найти матричные элементы генераторов внутри мультиплета $|JM\rangle$. Будем действовать аналогично рассмотрению алгебры Гейзенберга-Вейля в разделе I.11.8.

Будучи собственными состояниями эрмитовых операторов $\hat{\mathbf{J}}^2$ и \hat{J}_z , состояния $|JM\rangle$ взаимно ортогональны и будем считать, что они нормированы,

$$\langle J'M'|JM\rangle = \delta_{J'J} \delta_{M'M}. \quad (1.48)$$

Операторы \hat{J}_{\pm} связывают сопредельные состояния в мультиплете,

$$\hat{J}_{\pm}|JM\rangle = \mu_{\pm}(JM)|JM \pm 1\rangle \quad (1.49)$$

где, в результате эрмитовой сопряженности \hat{J}_{-} и \hat{J}_{+} ,

$$\mu_{-}(JM) = \mu_{+}^{*}(JM - 1). \quad (1.50)$$

Вычисляя среднее значение оператора Казимира (1.28) в произвольном состоянии $|JM\rangle$, находим абсолютные значения матричных элементов $\mu_{\pm}(JM)$. Их фазы остаются произвольными, и, как это делали раньше, уравнение (I.11.119), будем считать их реальными:

$$\mu_{\pm}(JM) = \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}. \quad (1.51)$$

Таким образом, декартовы компоненты момента импульса имеют простые *правила отбора* по отношению к квантовым числам состояний в мультиплете:

$$\langle J'M'|\hat{J}_x|JM\rangle = \frac{1}{2}(\mu_+(JM)\delta_{M',M+1} + \mu_-(JM)\delta_{M',M-1})\delta_{J'J}, \quad (1.52)$$

$$\langle J'M'|\hat{J}_y|JM\rangle = \frac{1}{2i}(\mu_+(JM)\delta_{M',M+1} - \mu_-(JM)\delta_{M',M-1})\delta_{J'J}, \quad (1.53)$$

$$\langle J'M'|\hat{J}_z|JM\rangle = M\delta_{M'M}\delta_{J'J}. \quad (1.54)$$

Наконец, для всех состояний мультиплета,

$$\langle J'M'|\hat{\mathbf{J}}^2|JM\rangle = J(J+1)\delta_{MM'}\delta_{J'J}. \quad (1.55)$$

Все эти операторы действуют внутри мультиплета и не меняют ни величину J , ни любые другие (не-вращательные) квантовые числа, которые могут присутствовать, но не указаны явно в бра- и кет-векторах.

Классическая картина, рис. 5.13, соответствующая состоянию $|JM\rangle$, представляет собой *прецессию* вектора углового момента вокруг оси квантования z : тогда \mathbf{J}^2 и J_z фиксированы, средние значения $\langle \hat{J}_x \rangle$ и $\langle \hat{J}_y \rangle$ равны нулю, в то время как средние значения \hat{J}_x^2 и \hat{J}_y^2 положительны.

Задача 1.6

Покажите, что в мультиплете $|JM\rangle$, матрица $(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e})$ проекций $\hat{\mathbf{J}}$ на произвольный единичный вектор \mathbf{e} удовлетворяет полиномиальному матричному уравнению

$$\prod_{M=-J}^J \{(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e}) - M\} = 0. \quad (1.56)$$

Здесь M следует понимать как умноженное на единичную матрицу.

Задача 1.7

Построить проекционный оператор $\hat{\Lambda}_M(\mathbf{e})$, который действуя на произвольную суперпозицию состояний мультиплета, выделяет компоненту с проекцией $(\mathbf{J} \cdot \mathbf{e}) = M$.

Решение

$$\hat{\Lambda}_M(\mathbf{e}) = \prod_{M' \neq M} \frac{(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e}) - M'}{M - M'}. \quad (1.57)$$

Задача 1.8

Преобразование Гольштейна-Примакова [1]. Докажите, что операторы, определенные так

$$\hat{J}_z = -J + \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad \hat{J}_- = \hat{a} \sqrt{2J + 1 - \hat{a}^\dagger \hat{a}}, \quad \hat{J}_+ = \hat{a}^\dagger \sqrt{2J - \hat{a}^\dagger \hat{a}}, \quad (1.58)$$

где \hat{a}^\dagger и \hat{a} являются стандартными операторами рождения и уничтожения алгебры Гейзенберга-Вейля, реализуют алгебру углового момента (1.25, 1.26).

Решение Внутри мультиплета с заданным J , квантовое число M может быть замещено эквивалентным числом n — количество шагов необходимых для достижения состояния $|JM\rangle$ начиная с наинизшего состояния $|J - J\rangle$: $M = -J + n$. С этой заменой, матричные элементы (1.51) принимают вид

$$\mu_-(JM) = \sqrt{n(2J + 1 - n)}, \quad \mu_+(JM) = \sqrt{(n + 1)(2J - n)}. \quad (1.59)$$

Коэффициенты \sqrt{n} и $\sqrt{n + 1}$ в уравнении (1.59) совпадают с матричными элементами (I.11.119) операторов \hat{a} и \hat{a}^\dagger соответственно, и имеют точно такой же смысл. Каждый повышающий шаг \hat{J}_+ создает *квант отклонения спина* и постепенно меняет ориентацию вектора углового момента от $J_z = -J$ до $J_z = +J$ через все промежуточные состояния; второй множитель под квадратным корнем в формуле (1.59) завершает лестницу на требуемом конце. Число шагов n является собственным значением оператора $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$. Используя очевидные свойства этого оператора (докажите их!)

$$\hat{a} f(\hat{N}) = f(\hat{N} + 1) \hat{a}, \quad \hat{a}^\dagger f(\hat{N} + 1) = f(\hat{N}) \hat{a}^\dagger, \quad (1.60)$$

можно записать уравнение (1.58) в другой форме,

$$\hat{J}_- = \sqrt{2J - \hat{N}} \hat{a}, \quad \hat{J}_+ = \sqrt{2J + 1 - \hat{N}} \hat{a}^\dagger; \quad (1.61)$$

Сравнение (1.61) с (1.58) показывает, что это представление сохраняет нетронутыми эрмитовы свойства операторов \hat{J}_z и \hat{J}_\pm и, следовательно, является *унитарным*.

Картина спиновых отклонений очень полезна в теории макроскопического магнетизма [2]. Ферромагнетик при нулевой температуре находится в основном состоянии максимальной намагниченности с макроскопически большими значениями J и магнитного момента (в наших обозначениях это было бы в направлении, противоположном оси z , $M = -J$). Тепловое движение вызывает колебания локальной намагниченности, которые распространяются в среде, как кванты спиновых волн, *магноны* (раздел IV.10.4). Преобразование Гольштейна-Примакова хорошо подходит для описания этой ситуации. Вблизи основного состояния (низкая температура) $n/(2J+1) \ll 1$ и повышающий оператор $\hat{J}_+ \approx \hat{a}^\dagger$ является оператором рождения магнонов. Когда n возрастает, можно учесть поправки, возникающие из-за конечности доступного пространства внутри мультиплета [квадратный корень в (1.58)].

С точки зрения алгебры Гейзенберга-Вейля, все пространство состояний $|n\rangle$ разлагается здесь на две части: на *физическое* пространство ($0 \leq n \leq 2J$) и *нефизическое*, для углового момента, пространство, $n > 2J$. Физическое пространство имеет конечную размерность $2J+1$ находясь в точном соответствии с вращательным мультиплетом $|JM\rangle$. Только в этом подпространстве, где три оператора \hat{J}_k связаны между собой физическим значением $\hat{\mathbf{J}}^2$, можно выразить их в терминах двух операторов \hat{a} и \hat{a}^\dagger ; только здесь является представление унитарным. Попытка продолжить формулы преобразования за пределы мультиплета проваливается, потому что квадратные корни становятся мнимыми, \hat{J}_\pm теряют свои свойства эрмитовости и ряды, которые могут быть получены формальным разложением квадратного корня по степеням $\hat{N}/(2J+1)$, расходится на границе мультиплета.

Задача 1.9

Представление Дайсона-Малеева. Показать, что алгебра углового момента реализуется следующим преобразованием операторов рождения и уничтожения:

$$\hat{J}_z = -J + \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad \hat{J}_- = \sqrt{2J} \hat{a}, \quad \hat{J}_+ = \sqrt{2J} \hat{a}^\dagger \left(1 - \frac{\hat{a}^\dagger \hat{a}}{2J}\right). \quad (1.62)$$

Это представление является конечным (не содержит квадратных корней) и поэтому не требует никакого разложения на число квантов; оно также

завершается в правильных местах на концах мультиплета. Однако оно не является унитарным, так как разрушается условие эрмитовой сопряженности между \hat{J}_- и \hat{J}_+ .

1.5 Реализация алгебры орбитального момента

Применим общую теорию к движению бесспиновой частицы. В этом случае имеем дело только с *орбитальным* вращением, и соответствующие генераторы — это компоненты орбитального момента $\hat{\ell}$.

Как обычно, выберем *ось квантования*, назовем ее осью z , и перейдем от декартовых координат к сферическим координатам r, θ, φ , которые более подходят для описания вращений,

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta. \quad (1.63)$$

Теперь нам нужно выразить динамические переменные в сферических координатах.

Задача 1.10

Выразить декартовы компоненты $\hat{\ell}_i$ орбитального момента (I.4.28) и $\hat{\ell}^2$ в сферических координатах.

Решение Компонент $\hat{\ell}_z$ уже был найден в (I.4.68),

$$\hat{\ell}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (1.64)$$

Для поперечных к оси квантования компонент находим

$$\hat{\ell}_x = i \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (1.65)$$

$$\hat{\ell}_y = i \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (1.66)$$

В приложениях мы будем иметь дело с *лестничными* комбинациями, аналогичными (I.11.104) и (1.24),

$$\hat{\ell}_{\pm} \equiv \hat{\ell}_x \pm i \hat{\ell}_y = e^{\pm i \varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (1.67)$$

Используя (1.64-1.66), получаем

$$\hat{\ell}^2 = - \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}. \quad (1.68)$$

Оператор Лапласа в сферических координатах разлагается на радиальную и угловую части, причем последняя, по существу, и есть квадрат орбитального момента (1.68),

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \hat{\ell}^2. \quad (1.69)$$

Задача 1.11

Доказать уравнение (1.69) прямым вычислением без использования сферических координатах.

Решение Используя формализм *Задачи 1.4.5*, имеем

$$\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_i \hat{\ell}_i = -\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} x_j \nabla_k x_m \nabla_n, \quad (1.70)$$

и, с помощью (1.4.33),

$$\hat{\ell}^2 = -x_j \nabla_k x_j \nabla_k + x_j \nabla_k x_k \nabla_j. \quad (1.71)$$

Коммутаторы x_j и ∇_k дают

$$\nabla_k x_j = \delta_{jk} + x_j \nabla_k, \quad \nabla_k x_k = 3 + x_k \nabla_k, \quad (1.72)$$

и мы получаем

$$\hat{\ell}^2 = (\mathbf{r} \cdot \nabla) + (\mathbf{r} \cdot \nabla)^2 - r^2 \nabla^2. \quad (1.73)$$

Так как

$$(\mathbf{r} \cdot \nabla) = r \frac{\partial}{\partial r}, \quad (\mathbf{r} \cdot \nabla)^2 = r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} = r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2}, \quad (1.74)$$

находим

$$\hat{\ell}^2 = -r^2 \nabla^2 + 2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} = -r^2 \nabla^2 + \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}, \quad (1.75)$$

что эквивалентно (1.69).

Для приложений к проблеме движения частицы в центральном поле, Гл. 2, нам нужно найти в явном виде координатные волновые функции, которые образуют вращательные мультиплеты. В сферических координатах они зависят от углов θ и φ (радиальная координата r не меняется при поворотах). Мультиплет в целом, неприводимое представление трехмерной группы вращений, характеризуется квантовым числом ℓ , соответствующим квадрату углового момента $\hat{\ell}^2 = \ell(\ell + 1)$. Функций внутри мультиплета могут быть помечены квантовым числом m проекции ℓ_z на выбранный ось квантования. Соответствующие собственные функции являются *сферическими Функциями* $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$. Их можно рассматривать в качестве функций на сферы единичного радиуса, и мы также будем использовать обозначение $Y_{\ell m}(\mathbf{n})$, где \mathbf{n} — единичный вектор, направление которого определяется полярным углом θ и азимутальным углом φ .

Согласно (1.30), мы должны решить задачу на собственные значения

$$\hat{\ell}^2 Y(\theta, \varphi) = \ell(\ell + 1) Y(\theta, \varphi). \quad (1.76)$$

Сразу можно разделить два угла предположив

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \Theta_{\ell m}(\theta) \Phi_m(\varphi). \quad (1.77)$$

При явном виде (1.68) угловой части Оператор Лапласа, получаем

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} + \ell(\ell + 1) \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = m^2, \quad (1.78)$$

где m^2 является удобным обозначением для новой константы разделения переменных, и, следовательно, получаем еще одно квантовое число. Пара обыкновенных дифференциальных уравнений для угловых функций имеет вид

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0, \quad (1.79)$$

и показывает, что m^2 является собственным значением $\hat{\ell}_z^2$, и

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} + [\ell(\ell + 1) \sin^2 \theta - m^2] \Theta = 0. \quad (1.80)$$

Уравнение (1.79) мы обсудили для плоской задачи, Гл. I.11.5 и нашли нормированные экспоненциальные решения (I.11.82) для *целых* значений m , выделяя периодические граничные условия для азимутального угла. Так

как m является целым числом, общая теория углового момента указывает, что значение ℓ тоже должно быть *целым*. Таким образом, орбитальный момент квантуется в целых числах, и только спиновый момент, не связанный с функциями пространственных координат, может привести к полуцелому квантованию. Функция $\Theta(\theta)$ зависит от обоих квантовых чисел, m и $\ell(\ell + 1)$. Как увидим ниже, для регулярных решений при целом ℓ возможные значения m для данного ℓ ограничены неравенством $|m| \leq \ell$, как и должно быть для углового момента и его проекции.

1.6 Построение множества сферических функций

Наиболее естественный подход к сферическим функциям, как собственным функциям угловой части оператора Лапласа, восходит к электростатике. Единичный точечный заряд, расположенный в начале координат [плотность заряда $\rho_{\text{ch}} = \delta(\mathbf{r})$], создает сферически-симметричный электростатический потенциал $\varphi = 1/r$, а соответствующее *уравнение Пуассона* имеет вид

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\rho_{\text{ch}}(\mathbf{r}) = -4\pi\delta(\mathbf{r}). \quad (1.81)$$

Вне начала координат, функция $1/r$ удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = 0, \quad r \neq 0. \quad (1.82)$$

Исходя из этого фундаментального *сферически симметричного* решения, мы можем построить бесконечное множество *зависящих от угла* решений уравнения Лапласа применяя координатные производные к $1/r$.

Заметим, что

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{r} = -\frac{1}{r^2} \frac{z}{r} = -\frac{z}{r^3} = -\frac{\cos \theta}{r^2}, \quad (1.83)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{1}{r} \equiv \nabla_{\pm} \frac{1}{r} = -\frac{x \pm iy}{r^3} = -\frac{\sin \theta e^{\pm i\varphi}}{r^2}. \quad (1.84)$$

Последовательно беря производные, каждый раз добавляем функцию углов в числителе и увеличиваем степень r в знаменателе. z -производная добавляет только функций от $\cos \theta$, в то время как операторы $\nabla_{\pm} \equiv \partial/\partial x \pm i\partial/\partial y$, помимо функций от θ , также привносят множитель $e^{\pm i\varphi}$. Таким образом,

для любого множества $\{\mathbf{e}_k\}$ постоянных векторов $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_\ell$, результат ℓ -кратного дифференцирования может быть записан в виде

$$(\mathbf{e}_1 \cdot \nabla) \cdots (\mathbf{e}_\ell \cdot \nabla) \frac{1}{r} = \frac{F_\ell(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}} \quad (1.85)$$

с угловой функцией F_ℓ в числителе, который зависит от выбора векторов \mathbf{e}_k .

Очевидно, что любая функция типа (1.85) является снова решением уравнения Лапласа, так что применяя оператор Лапласа к функции $F_\ell/r^{\ell+1}$, уравнение (1.85), мы должны получить нуль. С другой стороны, явно действуя на ту же функцию оператором (1.69), получаем

$$\hat{\ell}^2 F_\ell(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1) F_\ell(\theta, \varphi). \quad (1.86)$$

Это означает, что функции $F_\ell(\theta, \varphi)$ на самом деле являются собственными функциями квадрата орбитального момента с собственными значениями $\ell(\ell+1)$, где, по построению, $\ell = 0, 1, 2, \dots$; вспомним раздел I.5.11 и уравнение (I.5.90). Так как произведение $\nabla_+ \nabla_- = \nabla_- \nabla_+ = \nabla^2 - \nabla_z^2$ не создает новых функций от φ , мы можем получить все типы возможной азимутальной зависимости функций $F_\ell(\theta, \varphi)$, выбрав среди ℓ производных определенное число ∇_+ или ∇_- . Подобным образом мы построим мультиплет из $(2\ell+1)$ различных угловых функций F , назовем их теперь $Y_{\ell m}$, которые являются *сферическими гармониками* ранга ℓ ,

$$Y_{\ell \pm m}(\theta, \varphi) = \text{const } r^{\ell+1} \nabla_\pm^m \nabla_z^{\ell-m} \frac{1}{r}. \quad (1.87)$$

Здесь $m = 0, 1, \dots, \ell$, и зависимость от φ видно из (1.84), $Y_{\ell \pm m} \propto \exp(\pm im\varphi)$, в согласии с уравнениями (1.77) и (I.11.82). В соответствии с общей теорией, мы будем маркировать все $(2\ell+1)$ сферические функции для данного ℓ положительными и отрицательными числами $m = -\ell, -\ell+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell-1, \ell$. Нормируя отдельно азимутальную часть, запишем сферические функции в виде

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \Theta_{\ell m}(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (1.88)$$

Члены мультиплета отличаются ориентацией в пространстве и, следовательно, могут быть преобразованы в друг друга путем вращений, порожденных орбитальным моментом, раздел I.4.7. Последствия мультиплетной структуры, наряду с другим способом построения сферических гармоник, будут рассмотрены позже.

1.7 Простейшие свойства сферических

Сферические функции как функции от θ являются полиномами от $\sin \theta$ и $\cos \theta$, и поэтому они регулярны на концах интервала, $\theta = 0, \pi$. Согласно общим свойствам эрмитовых операторов, сферических функций с различными квантовыми числами (ℓ, m) автоматически ортогональны, и будет всегда предполагать такую общую нормализацию [выбор нормировочной константы в (1.87)], что будем иметь

$$\int do Y_{\ell'm'}^*(\mathbf{n}) Y_{\ell m}(\mathbf{n}) \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{\ell'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm}. \quad (1.89)$$

Здесь мы использовали обозначения do для элемента телесного угла. Возможны еще произвольные фазовые множители в определении $Y_{\ell m}$. Будем предполагать, что мнимые части возникают только из за азимутальных функций $\exp(im\varphi)$, в то время как функции $\Theta_{\ell m}(\theta)$ являются реальными. Тогда $Y_{\ell m}$ и $Y_{\ell-m}^*$ пропорциональны друг другу. Общепринятый выбор дается условием

$$Y_{\ell-m}(\theta, \varphi) = (-)^m Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi). \quad (1.90)$$

Позже мы вернемся к этому вопросу в связи с инвариантностью относительно обращением времени.

Как множество собственных функций коммутирующих эрмитовых операторов $\hat{\ell}^2$ и $\hat{\ell}_z$, множество сферических функций $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ для всех ℓ и m является *полным*, так что любая регулярная функция углов может быть разложена на сферические функции $Y_{\ell m}$. Коэффициенты этого разложения могут быть легко найдены с помощью условия ортонормированности (1.89). Для произвольной функции углов $F(\mathbf{n})$, разложение имеет вид

$$F(\mathbf{n}) = \sum_{\ell m} F_{\ell m} Y_{\ell m}(\mathbf{n}). \quad (1.91)$$

Согласно (1.89),

$$F_{\ell m} = \int do Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}) F(\mathbf{n}). \quad (1.92)$$

Подставляя (1.92) обратно в разложении (1.91), получаем тождество

$$F(\mathbf{n}) = \int do' F(\mathbf{n}') \sum_{\ell m} Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}') Y_{\ell m}(\mathbf{n}). \quad (1.93)$$

Поэтому условие полноты множества сферических гармоник можно записать в виде

$$\sum_{\ell m} Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}') Y_{\ell m}(\mathbf{n}) = \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}'). \quad (1.94)$$

Как мы знаем из раздела 1.8.3, помимо вращательной инвариантности, система может иметь еще одну важную пространственную симметрию, а именно по отношению к *инверсии* координат, $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$. В декартовых координатах преобразование инверсии означает, что $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$, в то время как в сферических координатах

$$(r, \theta, \varphi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + \pi), \quad (1.95)$$

так что $\sin \theta$ не меняется, $\cos \theta$ меняет знак и Функция $e^{-im\varphi}$ приобретает множитель $(-)^m$. Повороты коммутируют с инверсией; это легко можно понять из геометрических изображений, а также проверить формально. Это означает, что если состояние принадлежащее вращательному мультиплету имеет определенную четность, это квантовое число должно быть *одинаковым* для всех членов мультиплета. Поскольку каждый оператор градиента ∇_i , также как любой компонент оператора импульса $p_i = -i\hbar\partial_i$, меняет четность функции, уравнение (1.87) показывает, что функции $Y_{\ell m}$ для всех разрешенных m имеют четность $(-)^{\ell}$,

$$\hat{P} Y_{\ell m}(\mathbf{n}) = Y_{\ell m}(-\mathbf{n}) = (-)^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{n}). \quad (1.96)$$

1.8 Скаляры и векторы

Любая функция координат может быть представлена в качестве ряда сферических гармоник с коэффициентами, зависящими только от r . Рассмотрим первые члены разложения. Слагаемое с $\ell = 0$, или s -волна, пропорциональна сферической функции

$$Y_{00} = \text{const} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad (1.97)$$

и не зависит от углов. Оно не меняется при вращении, Y_{00} является *скаляром*.

Для $\ell = 1$, p -волна, имеем три функции

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \quad (1.98)$$

Для любого вектора \mathbf{V} можно ввести вместо декартовых компонент $V_i = (V_x, V_y, V_z)$, так называемые *сферические компоненты* $V_m, m = 0, \pm 1$:

$$V_0 = V_z, \quad V_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x \pm iV_y). \quad (1.99)$$

Сферические компоненты $V_{\pm 1}$ отличаются лишь множителем $\mp 1/\sqrt{2}$ от *лестничных компонент* V_{\pm} , уравнение (I.11.104), также используемых для оператора градиента в разделе 1.6. Из (1.98) и (1.99) мы видим, что функции $Y_{1m}(\mathbf{n})$ являются по существу сферическими компонентами вектора \mathbf{n} ,

$$Y_{1m}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} n_m. \quad (1.100)$$

Используя “спиновые” комбинации единичных декартовых векторов (1.32), также можно выразить сферические компоненты векторов как скалярные произведения [с определением (I.6.32) для комплексных векторов $\vec{\chi}$, что здесь совпадает с (1.90)]

$$V_m = (-)^m (\vec{\chi}_{-m} \cdot \vec{V}) = (\vec{\chi}_m^\dagger \cdot \mathbf{V}). \quad (1.101)$$

Задача 1.12

- а. Показать, что любую угловую волновую функцию частицы с орбитальным моментом $\ell = 1$ можно записать в виде

$$\psi(\mathbf{n}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}), \quad (1.102)$$

где \mathbf{a} является постоянным *комплексным* вектором, который не зависит от направления $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$.

- б. Для волновой функции записанной в виде (1.102), найти средние значения компонентов орбитального момента $\hat{\ell}_k$.
- в. Для того же состояния, можно ли найти направление \mathbf{e} для которого среднее значение оператора $(\hat{\ell} \cdot \mathbf{e})$ (проекция орбитального момента на направление, характеризуемое единичным вектором \mathbf{e}) равно 1? Другими словами, является ли любое состояние частицы с $\ell = 1$ *поляризованным* в некотором направлении?

Решение

- а. Чтобы представить функцию (1.102) в виде суперпозиции сферических функций Y_{1m} с произвольными коэффициентами C_m и определить

вектор \mathbf{a} в терминах этих коэффициентов, возьмем вектор \mathbf{a} со сферическими компонентами

$$a_m = (-)^m C_{-m} \sqrt{\frac{3}{4\pi}}, \quad (1.103)$$

или, в декартовом виде,

$$a_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} C_0, \quad a_x = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (C_{-1} - C_{+1}), \quad a_y = -i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (C_{+1} + C_{-1}). \quad (1.104)$$

В общем случае, эти декартовы компоненты a_k должны быть комплексными.

- б. Поскольку функция ψ не предполагается нормированной, нужное среднее значение должно быть записано в виде отношения двух угловых интегралов (мы используем декартовы компоненты $\hat{\ell}_i$),

$$\langle \hat{\ell}_i \rangle = \frac{\int d\Omega (\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{n}) \hat{\ell}_i (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})}{\int d\Omega (\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{n}) (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})}. \quad (1.105)$$

Здесь важно, что \mathbf{a} в общем случае является *комплексным* вектором; оператор $\hat{\ell}$ берется в стандартном представлении как Дифференциальный оператор (I.4.34) действующий на углы единичного вектора. Начнем с нормировочного интеграла в знаменателе формулы (1.105):

$$\int d\Omega (\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{n}) (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}) = a_i^* a_k \int d\Omega n_i n_k, \quad (1.106)$$

где подразумевается суммирование по дважды повторяющимся декартовым индексам. Здесь мы сталкиваемся с типичным интегралом

$$I_{ik} = \int d\Omega n_i n_k. \quad (1.107)$$

Тензор второго ранга I_{ik} должен быть диагональным поскольку для $i \neq k$ интеграл (1.107) обращается в нуль (положительные и отрицательные вклады для каждой координаты компенсируют друг друга). Кроме того, для $i = k$ интеграл должен быть тем же самым для любого i (x, y или z), так что результат интегрирования должен быть пропорционален символу Кронекера,

$$I_{ik} = A \delta_{ik}. \quad (1.108)$$

Чтобы определить константу A , вычислим след матрицы I_{ik} :

$$\text{tr } I = I_{kk} = 3A = \int d\mathbf{o} \, \mathbf{n}^2 = \int d\mathbf{o} = 4\pi. \quad (1.109)$$

Таким образом,

$$A = \frac{4\pi}{3}, \quad (1.110)$$

и нормировочный интеграл (1.106) оказывается равным

$$\int d\mathbf{o} (\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{n})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}) = \frac{4\pi}{3} \delta_{ik} a_i^* a_k = \frac{4\pi}{3} |\mathbf{a}|^2. \quad (1.111)$$

Теперь среднее значение, которое искали, принимает вид

$$\langle \hat{\ell}_i \rangle = \frac{3}{4\pi} \frac{a_j^* a_k}{|\mathbf{a}|^2} I_{i;jk} \quad (1.112)$$

с другим интегралом того же типа, где $\hat{\ell}_i = -i\varepsilon_{ilm} x_l \nabla_m$,

$$I_{i;jk} = \int d\mathbf{o} \, n_j \hat{\ell}_i n_k = -i\varepsilon_{ilm} \int d\mathbf{o} \, n_j n_l (\delta_{km} - n_k n_m). \quad (1.113)$$

Так как $\varepsilon_{ilm} n_l n_m = 0$ (векторное произведение вектора \mathbf{n} на самого себе), мы остались с выражением

$$I_{i;jk} = -i\varepsilon_{ilk} \int d\mathbf{o} \, n_j n_l = -i\varepsilon_{ilk} I_{jl} = -i \frac{4\pi}{3} \varepsilon_{ijk}, \quad (1.114)$$

так что

$$\langle \hat{\ell}_i \rangle = -i \frac{\varepsilon_{ijk} a_j^* a_k}{|\mathbf{a}|^2}. \quad (1.115)$$

Конечный результат можно записать в векторной форме,

$$\langle \hat{\boldsymbol{\ell}} \rangle = -i \frac{[\mathbf{a}^* \times \mathbf{a}]}{|\mathbf{a}|^2}. \quad (1.116)$$

Момент импульса *аксиальный* вектор, и единственный аксиальный вектор, который может быть построен с помощью двух доступных векторов, \mathbf{a} и \mathbf{a}^* , есть их векторное произведение.

- с. Ненулевое среднее значение орбитального момента возможно только если \mathbf{a} комплексный вектор; векторное произведение в (1.116) является мнимым вектором, и среднее значение $\hat{\ell}$ действительно, как это должно быть для эрмитового оператора. Если запишем комплексный вектор \mathbf{a} в терминах двух вещественных векторов, \mathbf{b} и \mathbf{c} ,

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} + i\mathbf{c}, \quad (1.117)$$

наш ответ принимает вид

$$\langle \hat{\ell} \rangle = \frac{2[\mathbf{b} \times \mathbf{c}]}{\mathbf{b}^2 + \mathbf{c}^2}. \quad (1.118)$$

Абсолютное значение этого среднего значения не может превышать 1 для любой пары вещественных векторов \mathbf{b} и \mathbf{c} , в соответствии с тем, что собственные значения компонентов $\vec{\ell}$ есть 0 или ± 1 . Существуют два особых случая. Значение 1 появляется при $|\mathbf{b}| = |\mathbf{c}|$, и когда эти вектора перпендикулярны друг другу; это собственное состояние компоненты $\vec{\ell}$ нормальной к плоскости, образованной векторами \mathbf{b} и \mathbf{c} , с проекцией +1 на направление этой нормали, или -1 на противоположное направление. Такое описание аналогично поляризации фотонов; это особое состояние имеет круговую поляризацию (правую или левую). Случай параллельных векторов \mathbf{b} и \mathbf{c} соответствует состоянию с определенной (равной нулю) проекцией $\hat{\ell}$ на их общее направление. Такое состояние соответствовало бы продольной поляризации фотона (вдоль волнового вектора), которая запрещена для реальных фотонов. За исключением этих двух случаев, для общего состояния $\ell = 1$, нет направления, на которое проекция момента импульса имела бы определенное значение. Подобная же ситуация имеет место для любого значения углового момента $J \geq 1$. Только состояния со спином $1/2$ всегда поляризованы в некотором направлении.

Все векторы ведут себя одинаково при поворотах. Поэтому мы заключаем, что любой *векторный* оператор преобразуется как сферическая функция ранга 1. Нормированный радиус-вектор \mathbf{n} является примером *полярного* вектора, раздел I.8.4. Его компоненты, подобно сферическим функциям Y_{1m} , меняют знак при пространственной инверсии. Умножая функцию определенной четности на $Y_{\ell m}$, мы меняем ее четность всегда на одну и ту же мультипликативную величину $(-)^{\ell}$. *Аксиальные* векторы, такие как $\vec{\ell}$, не меняют знак при инверсии, и их действие на функцию не изменяет ее четность, в соответствии с тем фактом, что все члены мультиплета имеют одинаковую четность.

1.9 Тензоры второго ранга

Комбинируя два или более векторов, можно строить более сложные объекты, *тензоры*, которые ведут себя как разные сферические функции. *Скалярное произведение* двух векторов,

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \equiv a_i b_i, \quad (1.119)$$

может быть также выражено через сферические компоненты (1.98):

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = \sum_{m=0,\pm 1} (-)^m a_m b_{-m}. \quad (1.120)$$

Рассмотрим девять величин $T_{ij} = a_i b_j$, построенных из декартовых компонент векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} . Они являются *приводимыми* относительно вращений и могут быть сгруппированы в меньших *неприводимых* сообществах. Сначала отделим друг от друга две части с различными симметриями (подматрицы, которые *симметричны*, S , или *антисимметричны*, A , при перестановке индексов матрицы),

$$T_{ij} = S_{ij} + A_{ij} = \frac{1}{2}(a_i b_j + a_j b_i) + \frac{1}{2}(a_i b_j - a_j b_i). \quad (1.121)$$

Задача 1.13

Показать, что повороты сохраняют перестановочную симметрию, так что S_{ij} и A_{ij} преобразуются независимо друг от друга при поворотах.

Симметричная часть S_{ij} все еще еще приводима, так как *след* $\text{Tr } S = S_{ii} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$ является скалярной величиной и вообще не меняется при поворотах. Мы можем вычесть инвариантный скаляр с таким коэффициентом, что оставшаяся часть будет *бесследовой*,

$$S_{ij} = \frac{1}{3}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\delta_{ij} + Q_{ij}. \quad (1.122)$$

Симметричный тензор

$$Q_{ij} = \frac{1}{2}\left(a_i b_j + a_j b_i - \frac{2}{3}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\delta_{ij}\right) \quad (1.123)$$

является бесследовым, $\text{Tr } Q = Q_{ii} = 0$, и неприводимым. Он имеет *пять* независимых компонентов. Антисимметричная часть,

$$A_{ij} = \frac{1}{2}(a_i b_j - a_j b_i) = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_k, \quad (1.124)$$

имеет три независимые компоненты. Она эквивалентна (по отношению к вращениям) *вектору* $[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]$. Если оба вектора \mathbf{a} и \mathbf{b} полярные, компоненты их векторного произведения не меняют знак при инверсии пространственных координат. Такой вектор является *аксиальным*, раздел I.8.4. Подводя итоги, разложение приводимого тензора T_{ij} на неприводимые части S_{ij} , A_{ij} и Q_{ij} может быть символически представлено в виде

$$\underline{3} \otimes \underline{3} = \underline{1} + \underline{3} + \underline{5}, \quad (1.125)$$

где подчеркнутые числа обозначают размерность $2\ell + 1$ мультиплетов (неприводимых представлений группы вращений) ранга ℓ .

Чтобы понять вращательные свойства симметричного тензора (1.123), мы должны сравнить его трансформационные особенности с теми, которых имеют сферические гармоники. Так как все векторы преобразуются одинаково, достаточно рассмотреть случай $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{n}(\theta, \varphi)$. Тогда можно установить взаимно однозначное соответствие между пятью нормированными сферическими функциями второго ранга $Y_{2m}(\mathbf{n})$ и линейными комбинациями из пяти компонентов Q_{ij} ,

$$Y_{20}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (2 \cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \Rightarrow \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{1}{2} (2Q_{zz} - Q_{xx} - Q_{yy}), \quad (1.126)$$

$$Y_{2\pm 1}(\mathbf{n}) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi} \Rightarrow \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} (Q_{xz} \pm iQ_{yz}), \quad (1.127)$$

$$Y_{2\pm 2}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \Rightarrow \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{8}} (Q_{xx} \pm 2iQ_{xy} - Q_{yy}). \quad (1.128)$$

Наоборот, компоненты Q_{ij} являются линейными комбинациями $Y_{2m}(\mathbf{n})$ и, следовательно, соответствуют тензорному оператору *второго* ранга, $\ell = 2$. Пять комбинаций в правых частях уравнений (1.126 - 1.128) организованы таким образом, что они образуют сферический тензор

$$Q_{2m} \propto \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{2m}(\mathbf{n}). \quad (1.129)$$

Важным примером является тензор электростатического квадрупольного момента [3], § 41 для системы зарядов e_a ,

$$Q_{ij} = \sum_a e_a (3x_i(a)x_j(a) - r^2(a)\delta_{ij}). \quad (1.130)$$

Это симметричный бесследовый, $Q_{ii} = 0$, тензор, который имеет пять независимых компонентов и, с точки зрения его вращательных свойств, может быть установлено его взаимно однозначное соответствие (1.129) со сферическими гармониками Y_{2m} .

Вывод таков, что любой набор из девяти величин T_{ij} , которые преобразуются при поворотах как произведение двух векторов, можно разложить на скаляр, вектор (антисимметричный тензор) и симметричный тензор второго ранга. Процедура может быть расширена на тензоры более высокого порядка $T_{ijk\dots} \sim a_i b_j c_k \dots$. Мы еще вернемся к этой теме при обсуждении общих тензорных операторов.

Задача 1.14

Рассмотрим вектор-функцию

$$\vec{\Psi}(\mathbf{r}) = (\hat{\mathbf{V}} Y_{lm}(\mathbf{n})), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (1.131)$$

где \mathbf{V} является одним из трех векторных операторов $\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\vec{\ell}}$, действующих на сферическую функцию. Доказать, что $\Psi(\mathbf{r})$ является собственной функцией полного углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ с квантовыми числами $J = \ell$ и $M = m$.

Решение Определим полный угловой момент как $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\vec{\ell}} + \hat{\mathbf{S}}$, где оператор спина $\hat{\mathbf{S}}$ действует на векторные компоненты как в уравнении (1.15), $\hat{S}_i \hat{V}_k = -i\epsilon_{ikl} \hat{V}_l$. С другой стороны, для любого вектора, $[\hat{\ell}_i, \hat{V}_k] = i\epsilon_{ikl} \hat{V}_l$. Так как

$$\hat{J}_i \hat{V}_k = (\hat{\ell}_i + \hat{S}_i) \hat{V}_k = [\hat{\ell}_i, \hat{V}_k] + \hat{S}_i \hat{V}_k + \hat{V}_k \hat{\ell}_i, \quad (1.132)$$

применяя \hat{J}_i к функции (1.131) и используя (1.132), получаем

$$\hat{J}_i \hat{\mathbf{V}} Y_{lm} = \hat{\mathbf{V}} \hat{\ell}_i Y_{lm}. \quad (1.133)$$

Поэтому действие полного углового момента на всю функцию (1.131) эквивалентно действию орбитального момента только на сферическую функцию, и вращательные квантовые числа в точности такие же, как для сферической функции Y_{lm} . В частности, для $\ell = 0$, Операторы с градиентом, $\hat{\mathbf{V}} = \hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{V}} = \hat{\vec{\ell}}$, дают нуль, и остальной вектор \mathbf{r} оказывается дает *скаляр*. В самом деле, ясно, что здесь не координаты частицы, а *радиальное поле*, $\vec{\Psi} \propto \mathbf{r}$ ("ёж"), обладает вращательной симметрией и не меняется при поворотах.

1.10 Сферические функции и полиномы Лежандра

Сферические гармоники $Y_{\ell m}(\mathbf{n})$ являются общими собственными функциями коммутирующих операторов $\hat{\ell}^2$ и ℓ_z . Поперечные компоненты орбитального момента $\hat{\ell}_{\pm}$, согласно лестничного соотношения (I.11.105), что справедливо для любого векторного оператора $\hat{\mathbf{V}}$, в том числе и для самого $\hat{\ell}$, передвигают состояние вдоль лестницы изменяя m на ± 1 , но оставляя квантовое число ℓ без изменения. Как и должно быть, повышающие и понижающие операторы, явно заданные в уравнении (1.67), меняют φ -зависимость функций должным образом добавляя фактор $\exp(\pm i\varphi)$. Используя эти алгебраические свойства, укажем способ построения сферических функции, альтернативный тому, что мы использовали в разделе 1.6.

Так как по построению, максимально возможное значение m (z -проекции) в мультиплете есть ℓ ["длина" вектора орбитального момента, вспомните соотношение неопределенностей, уравнение (I.5.91)], верхнее состояние с $m = \ell$ не может иметь дальнейшего продвижения по лестнице и должно уничтожаться повышающим оператором. Поэтому мы должны иметь

$$\hat{\ell}_+ Y_{\ell\ell} = 0. \quad (1.134)$$

Это дает простое уравнение *первого* порядка для функции $\Theta_{\ell\ell}(\theta)$ определенной формулой (1.67),

$$\frac{d\Theta_{\ell\ell}}{d\theta} = \ell \cot \theta \Theta_{\ell\ell}. \quad (1.135)$$

Решение (1.135), нормированное согласно (1.89), имеет вид

$$\Theta_{\ell\ell}(\theta) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}} \frac{1}{2^\ell \ell!} \sin^\ell \theta. \quad (1.136)$$

Чем больше ℓ , тем больше эта функция сосредоточенна вблизи экватора, $\theta = \pi/2$, что характерно для полуклассической орбиты в плоскости, перпендикулярной к направлению орбитального момента.

Теперь мы можем действовать понижающим оператором $\hat{\ell}_-$, уравнение (1.67), и идти вниз по лестнице к нижележащим членам мультиплета. Таким образом получим

$$Y_{\ell\ell-1} = \frac{1}{\sqrt{2\ell}} \hat{\ell}_- Y_{\ell\ell}, \quad \dots, \quad Y_{\ell m} = \left[\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!(2\ell)!} \right]^{1/2} (\hat{\ell}_-)^{\ell-m} Y_{\ell\ell}. \quad (1.137)$$

Зная матричные элементы понижающего оператора, можно избежать громоздких повторений нормализации. Результат может быть выражен в терминах *присоединенных полиномов Лежандра* $P_{\ell m}(x)$,

$$\Theta_{\ell m}(\theta) = (-)^m \left[\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^{1/2} P_{\ell m}(\theta), \quad (1.138)$$

$$P_{\ell m}(\theta) = (-)^{\ell-m} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{\ell-m}}{(d \cos \theta)^{\ell-m}} \sin^{2\ell} \theta. \quad (1.139)$$

Обратите внимание, что определения различных авторов могут отличаться относительно фазы.

При $\theta \rightarrow 0$, регулярная функция углов, такой как $Y_{\ell m}$, не может зависеть от φ , так как азимутальный угол не определен при $\theta = 0$. Поэтому все функций $Y_{\ell m}$ обращаются в нуль при $\theta = 0$, за исключением $Y_{\ell 0}$, что не несет никакой φ -зависимости. При $m = 0$ присоединенные полиномы Лежандра (1.139) сводятся к обычным *полиномам Лежандра*,

$$P_\ell(\cos \theta) \equiv P_{\ell 0}(\theta), \quad (1.140)$$

так что

$$Y_{\ell 0}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta). \quad (1.141)$$

Легко видеть из (1.139), что все полиномы Лежандра равны 1 в направлении вперёд

$$P_\ell(1) = 1. \quad (1.142)$$

Откуда, для направления вдоль оси квантования,

$$Y_{\ell m}(\theta = 0) = \delta_{m0} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}. \quad (1.143)$$

Полиномы Лежандра ортонормированы, как функции $x = \cos \theta$, на отрезке от -1 до +1,

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta P_{\ell'}(\cos \theta) P_\ell(\cos \theta) = \int_{-1}^1 dx P_{\ell'}(x) P_\ell(x) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell'\ell}. \quad (1.144)$$

Первые четыре полиномы имеют вид

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x). \quad (1.145)$$

Принимая $\mathbf{n}' = \mathbf{e}_z$, единичный вектор в направлении оси z , и применяя (1.93) и (1.141), получаем *соотношение полноты*

$$\sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(x) = 4\pi \delta(x - 1) \quad (1.146)$$

показывающее, что полиномы Лежандра компенсируют друг друга во всех направлениях, за исключением переднего. Из-за соотношения полноты, азимут-независимые функции от $\cos \theta$ можно разложить в ряд по полиномам Лежандра.

Соотношение четности, уравнение (1.96), очевидно для P_{ℓ} , которые являются полиномами порядка ℓ от $\cos \theta$. В частности, для направления назад

$$P_{\ell}(-1) = (-1)^{\ell} \quad (1.147)$$

что приводит к аналогу уравнения (1.146),

$$\sum_{\ell} (2\ell + 1) (-1)^{\ell} P_{\ell}(x) = 4\pi \delta(x + 1). \quad (1.148)$$

Задача 1.15

Вывести общее выражение для полиномов Лежандра $P_{\ell}(\cos \theta)$,

$$P_{\ell}(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} (x^2 - 1)^{\ell}. \quad (1.149)$$

Решение Функция (1.149) определяет регулярное решение дифференциального уравнения для полиномов Лежандра, что следует из (1.80) при $m = 0$,

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP_{\ell}}{d\theta} \right) + \ell(\ell + 1) P_{\ell} = 0. \quad (1.150)$$

Коэффициент перед (1.149) определяется условием (1.142).

Задача 1.16

Доказать следующие полезные свойства полиномов Лежандра:

а. рекуррентные соотношения (штрих означает производную d/dx)

$$P'_{\ell+1}(x) - xP'_\ell(x) = (\ell+1)P_\ell(x), \quad xP'_\ell(x) - P'_{\ell-1}(x) = \ell P_\ell(x), \quad (1.151)$$

где во втором уравнении для $\ell = 0$ мы предполагаем, что $P_{-1}(x) = 0$;

б. при $x = 0$, производные четных полиномов имеют вид

$$P'_{\ell \text{ even}}(x = 0) = 0; \quad (1.152)$$

с. при $x = 0$ и для четного ℓ

$$P_\ell(x = 0) = (-)^{\ell/2} \frac{(\ell-1)!!}{2^\ell \ell!}, \quad P'_{\ell+1}(x = 0) = (-)^{\ell/2} \frac{(\ell+1)!!}{2^\ell \ell!}. \quad (1.153)$$

Задача 1.17

Вывести квазиклассическую асимптотику для полиномов Лежандра.

Решение В целях приведения уравнения (1.150) к форме уравнения Шредингера, введем новую функцию

$$F_\ell(\theta) = \sqrt{\sin \theta} P_\ell(\cos \theta), \quad (1.154)$$

что удовлетворяет

$$\frac{d^2 F_\ell}{d\theta^2} + \left[\left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{1}{4 \sin^2 \theta} \right] F_\ell = 0. \quad (1.155)$$

Тогда квазиклассическая асимптотика дается выражением

$$F_l(\theta) \approx f_\ell \sin \left[\left(\ell + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4} \right], \quad (1.156)$$

где постоянный множитель f_ℓ не может быть найден из уравнения (1.155). Значения (1.153) определяют этот коэффициент для $\ell \gg 1$, когда можно использовать Формулу Стирлинга (I.9.96) для факториалов,

$$f_\ell \approx \sqrt{\frac{2}{\pi \ell}}. \quad (1.157)$$

Квазиклассическая асимптотика справедлива при больших ℓ , за исключением узкой области углов вблизи полярной оси, $\theta = 0$ и $\theta = \pi$.

1.11 Угловой момент во внешнем поле

Скалярные операторы коммутируют с полным угловым моментом системы. Если система изотропна (нет внешних полей), Гамильтониан не должен меняться при вращении системы как целой: он должен быть *скалярным* оператором,

$$[\hat{\mathbf{J}}, \hat{H}] = 0. \quad (1.158)$$

(В релятивистской теории это утверждение остается в силе в системе центра масс; оно также может быть обобщено для преобразований Лоренца.) Таким образом, для скалярного Гамильтониана \hat{H} , угловой момент \mathbf{J} является интегралом движения. Мы должны подчеркнуть, что \mathbf{J} представляет собой *полный* угловой момент системы, включая всех орбитальных и спиновых степеней свободы всех частиц: система инвариантна только если мы повернем ее *как целое*, избегая любых искажений внутренней структуры. Как отмечалось в разделе I.7.10, сохранение углового момента (также как другие классические правила сохранения) является следствием симметрии системы, вращательной в данном случае.

Повороты связывают разные состояния внутри мультиплетта $|JM\rangle$. Так как эти состояния отличаются только ориентацией, что в отсутствие внешних источников анизотропии не меняет внутреннюю структуру, все состояния $|JM\rangle$ с одним и тем же J , но с различными M являются *вырожденными* по энергии. Когда внешнее поле нарушает вращательную симметрию, угловой момент больше не сохраняется. Рассмотрим простейший пример статического однородного векторного поля \vec{B} , которое связано с моментом импульса взаимодействием

$$\hat{H}' = -g\hbar(\hat{\mathbf{J}} \cdot \vec{B}). \quad (1.159)$$

Можно считать \vec{B} магнитным полем. Тогда

$$\hat{\mu} = g\hbar\hat{\mathbf{J}} \quad (1.160)$$

представляет собой оператор магнитного момента, и g есть гиромагнитное отношение магнитного момента к механическому моменту $\hbar\mathbf{J}$, вспомним раздел I.1.9.

Гамильтониан (1.160) содержит только проекцию углового момента на направление поля; возьмем его в качестве оси z . Это единственное направление в пространстве, которое физически выделено. Вращение вокруг этой оси по-прежнему не меняют систему: *осевая симметрия* сохраняется, в

то время как общая вращательная симметрия не имеет места. Полезно подчеркнуть, что мы всегда предполагаем вращение системы в фиксированном внешнем поле: если поле \vec{B} рассматривается как часть системы и тоже участвует во вращении, полная инвариантность восстанавливается. Генератор вращений в плоскости перпендикулярной полю является сохраняющейся величиной J_z .

Оператор Казимира \hat{J}^2 тоже коммутирует с \hat{H} (1.159). Поэтому мы все еще можем маркировать стационарные состояния $|JM\rangle$ с теми же квантовыми числами, что в случае полной вращательной симметрии. Но поле *расщепляет* уровни энергии в мультиплете, и они теперь зависят от M ,

$$E_M = -g\hbar BM. \quad (1.161)$$

Это *Зеемановское расщепление* линейно по величине поля и сохраняет центр тяжести мультиплета. При $g > 0$ мы имеем *выравнивание* углового момента вдоль внешнего поля, самое низкое энергетическое состояние соответствует максимальному выравниванию с $M = J$.

В задаче Ландау, раздел I.13.4, мы не учитывали спин электрона. Взаимодействие спина с магнитным полем характеризуется, раздел I.1.9, гиромагнитным отношением $g_s = e/mc = 2g_\ell$. Соответствующий вклад имеет вид

$$H_s = -g_s \hbar (\hat{s} \cdot \vec{B}) = -\frac{e\hbar B}{mc} \hat{s}_z. \quad (1.162)$$

Вводя циклотронную частоту (13.38) и добавляя спиновый вклад (1.162) к орбитальному квантованию (I.13.61), мы приходим к полному спектру энергии частицы со спином $1/2$ (с проекцией спина $s_z = \pm 1/2$) в статическом однородном магнитном поле,

$$E(n, s_z) = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} - (\text{sign } e) s_z \right). \quad (1.163)$$

Спектр Ландау приобретает дополнительное вырождение. Для электрона, $e = -|e|$, состояния $(n, s_z = 1/2)$ и $n + 1, s_z = -1/2$ вырождены по энергии, так что их емкость (I.13.62) увеличивается в два раза. Исключением является основное состояние $n = 0, s_z = -1/2$.

Существенная разница уравнении (1.159) от случая сферической симметрии состоит в том, что теперь поперечные компоненты $\hat{J}_{x,y}$ не коммутируют с Гамильтонианом \hat{H} . Как мы знаем, они меняют M на ± 1 и, следовательно,

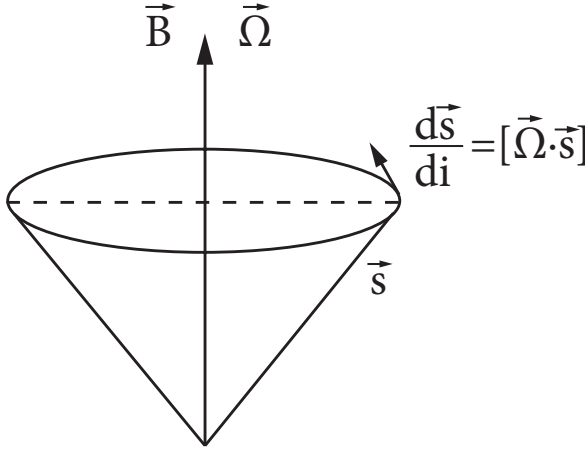


Рис. 1.2. Прецессия углового момента во внешнем магнитном поле.

меняют энергию (1.161). Операторы $\hat{J}_{x,y}$ не сохраняются, вместо этого они создают возбуждения в системе. Магнитное поле вызывает вращающий момент, и уравнения движения для компонент углового момента, вспомним *Задачу I.7.12*, имеют вид

$$i\hbar \dot{J}_k = [\hat{J}_k, \hat{H}'] = -g\hbar B_l i\varepsilon_{kl n} \hat{J}_n, \quad (1.164)$$

или, в векторных обозначениях,

$$\dot{\vec{J}} = [\vec{\Omega} \times \vec{J}], \quad \vec{\Omega} = -g\vec{B}. \quad (1.165)$$

Мы снова видим из (1.165), что J_z сохраняется, тогда как поперечные компоненты вращаются с угловой скоростью $\Omega = \Omega_z$,

$$\dot{J}_x = -\Omega \hat{J}_y, \quad \dot{J}_y = \Omega \hat{J}_x. \quad (1.166)$$

Для обычного гиромангнитного отношения, $g = e/2mc$, эта *Ларморовская частота* Ω в два раза меньше, чем циклотронная частота ω_c . Повышающие и понижающие комбинации (1.24) являются *нормальными модами*,

$$\dot{J}_{\pm} = \pm i\Omega J_{\pm}. \quad (1.167)$$

Их эволюция представляет собой чистое фазовое вращение,

$$\hat{J}_{\pm}(t) = e^{\pm i\Omega t} \hat{J}_{\pm}, \quad (1.168)$$

где Шредингеровские операторы \hat{J}_{\pm} не зависят от времени. Это может быть интерпретировано, рис. 1.2, как изображение классической прецессии вокруг направления поля с угловой скоростью Ω . Факт отсутствия *диагональных* матричных элементов \hat{J}_{\pm} соответствует на классическом языке усреднению по времени поперечных компонентов. Прецессия была уже упомянута ранее в связи со стационарным состоянием $|JM\rangle$ просто чтобы визуализировать образ состояния с заданными J и M , но никакого физического вращения не предполагалось.

Гамильтониан (1.159) является подлинным скаляром, так как угловой момент, магнитный момент и магнитное поле — все аксиальные векторы, так что их произведение не только инвариантно относительно поворотов, которое подразумевалось в предыдущих рассуждениях, но оно инвариантно и при пространственной инверсии. Аналогичное гипотетическое взаимодействие момента импульса или магнитного момента с электрическим полем, $(\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{E}})$, было бы псевдоскаляром и привело бы к несохранению четности. Кроме того, Гамильтониан (1.159) инвариантен относительно обращения времени (\mathcal{T} -инвариантность), так как \mathbf{J} и магнитное поле меняют знак при обращении времени, в то время как взаимодействие электрического поля с магнитным моментом будет \mathcal{T} -неинвариантным. В противоположность этому, обычное взаимодействие $(\mathbf{d} \cdot \vec{\mathcal{E}})$ электрического дипольного момента с электрическим полем является как \mathcal{P} -, так и \mathcal{T} -инвариантным. Такое взаимодействие также приведет к расщеплению мультиплета $|JM\rangle$ по проекциям M на естественное направление квантования, определенное электрическим полем, но, в отличие от расщепления Зеемана (1.161), оно не может расщепить состояния $\pm M$ являясь безразличным к направлению вращения, которое может быть изменено обращением времени.

Дополнительная литература: [4], [5], [6]

Сокольниковый сокола не докричится;
 Всеобщий распад; притяжение центра
 слабеет; Все шире и шире круги
 обезумевшей птицы, Над миром
 анархия черными крыльями веет...

В.Б. Йиитс, *Второе пришествие*

Глава 2

Движение в центральном поле

2.1 Приведение к задаче одного тела

В этом разделе мы рассмотрим частицу, движущуюся во внешнем потенциальном поле $U(\mathbf{r})$. Во многих случаях эта задача возникает в результате приведения задачи *двух тел*; мы уже использовали этот подход в задаче *I.1.6* вводя поправку к спектру водорода от отдачи тяжелого ядра. В общем случае, это приведение проводят так же, как в классической механике [7]

Пусть две частицы взаимодействуют через потенциал $\hat{U} = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, зависящий только от их относительного расстояния. Волновая функция Ψ зависящая от координат $\mathbf{r}_{1,2}$ обеих частиц удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)}{\partial t} = (\hat{K} + \hat{U})\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t), \quad (2.1)$$

где кинетическая энергия определяется массами обеих частиц, m_1 и m_2 ,

$$\hat{K} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\nabla_1^2}{m_1} + \frac{\nabla_2^2}{m_2} \right). \quad (2.2)$$

Координаты *центра масс*, \mathbf{R} , и *относительная* координата, \mathbf{r} , определены как

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M}, \quad M = m_1 + m_2, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (2.3)$$

Соответствующие операторы градиентов преобразуются в соответствии с

$$\nabla_1 = \nabla + \frac{m_1}{M} \nabla_{\mathbf{R}}, \quad \nabla_2 = -\nabla + \frac{m_2}{M} \nabla_{\mathbf{R}}, \quad \nabla \equiv \nabla_{\mathbf{r}}, \quad (2.4)$$

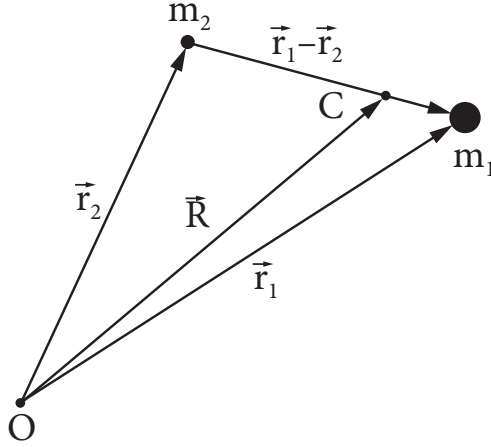


Рис. 2.1. Координаты в задаче двух тел

и импульсы частиц $\hat{\mathbf{p}}_{1,2} = -i\hbar\nabla_{1,2}$ выражаются через относительный импульс $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ и импульс центра масс $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}}$,

$$\hat{\mathbf{p}}_1 = \hat{\mathbf{p}} + \frac{m_1}{M} \hat{\mathbf{P}}, \quad \hat{\mathbf{p}}_2 = -\hat{\mathbf{p}} + \frac{m_2}{M} \hat{\mathbf{P}}. \quad (2.5)$$

Обратное преобразование координат, см. Рис. 2.1,

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{M} \mathbf{r}; \quad (2.6)$$

здесь мы ясно видим, эффекты отдачи, упомянутые в задаче 1.1.6. Для операторов импульса находим

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2, \quad \hat{\mathbf{p}} = \frac{m_2}{M} \hat{\mathbf{p}}_1 - \frac{m_1}{M} \hat{\mathbf{p}}_2. \quad (2.7)$$

Задача 2.1

Для системы из двух частиц, преобразуйте операторы орбитального момента, электрического дипольного момента и орбитального магнитного момента в переменных относительно центра масс.

Решение Орбитальный момент раскладывается на орбитальный момент центра масс и движения относительно него,

$$\mathbf{L} = \vec{\ell}_1 + \vec{\ell}_2 = [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1] + [\mathbf{r}_2 \times \mathbf{p}_2] = [\mathbf{R} \times \mathbf{P}] + [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] \equiv \mathbf{L}_{\text{c.m.}} + \vec{\ell}. \quad (2.8)$$

Электрический дипольный момент определяется как

$$\mathbf{d} = e_1 \mathbf{r}_1 + e_2 \mathbf{r}_2 = (e_1 + e_2) \mathbf{R} + \frac{e_1 m_2 - e_2 m_1}{M} \mathbf{r}. \quad (2.9)$$

В нейтральной системе, $e_1 + e_2 = 0$, дипольный момент не зависит от выбора центра масс. Внутренняя часть, не зависящая от движения центра масс, отсутствует для *тождественных частиц*, когда $e_1 = e_2$ и $m_1 = m_2$. В самом деле, то же самое происходит с любой системой частиц с одинаковым соотношением e/m , так как в этом случае весь дипольный момент

$$\mathbf{d} = \sum_a e_a \mathbf{r}_a = \sum_a \frac{e_a}{m_a} m_a \mathbf{r}_a = \frac{e}{m} \sum_a m_a \mathbf{r}_a = \frac{e}{m} \mathbf{R} \sum_a m_a, \quad (2.10)$$

пропорционален вектору центра масс \mathbf{R} . Орбитальный магнитный момент частицы пропорционален ее орбитальному угловому моменту, см. раздел I.1.8

$$\vec{\mu}_l = g_l \vec{\ell}. \quad (2.11)$$

Для системы из двух частиц с гиромагнитными отношениями g_1 и g_2 ,

$$\vec{\mu} = g_1 \vec{\ell}_1 + g_2 \vec{\ell}_2, \quad (2.12)$$

и преобразования (2.5,2.6) дают

$$\vec{\mu} = \frac{g_1 m_1 + g_2 m_2}{M} \mathbf{L}_{\text{с.м.}} + \frac{g_1 m_2 + g_2 m_1}{M} \vec{\ell} + (g_1 - g_2) \left([\mathbf{R} \times \mathbf{p}] + \frac{m_1 m_2}{M^2} [\mathbf{r} \times \mathbf{P}] \right). \quad (2.13)$$

Единственная часть этого оператора, который зависит исключительно от относительного движения, $\vec{\mu}_{\text{rel}} = g_{\text{rel}} \vec{\ell}$, описывается гиромагнитным соотношением

$$g_{\text{rel}} = \frac{g_1 m_2 + g_2 m_1}{M} = \frac{1}{2c} \left(\frac{e_1}{m_1^2} + \frac{e_2}{m_2^2} \right) m, \quad (2.14)$$

где мы предполагаем нормальное орбитальное гиромагнитное соотношение частиц (1.65) и вводим приведенную массу m , как в задаче I.1.6,

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}, \quad m = \frac{m_1 m_2}{M}. \quad (2.15)$$

Преобразование для кинетической энергии (2.2),

$$\hat{K} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \quad (2.16)$$

вновь приводит к сумме двух *независимых* компонент для относительного движения и для движения центра масс. Если ни один потенциал не действует на центр масс, суммарный импульс \mathbf{P} сохраняется, а движение в целом описывается плоской волной, отделенной от относительных переменных (нерелятивистской *инвариантностью Галилея*). Поэтому волновая функция записанная в новых координатах, $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t)$, факторизована в тривиальную плоскую волну центра масс с соответствующей кинетической энергией и относительную волновую функцию

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \Rightarrow \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = e^{(i/\hbar)[(\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}) - (\mathbf{P}^2/2M)t]} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.17)$$

Здесь \mathbf{P} - собственное значение полного импульса, в то время как функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$, обозначаемая тем же самым символом Ψ , теперь описывает только внутреннее движение упрощенной задачи одного тела с приведенной массой (2.15)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.18)$$

Потенциал также может зависеть от времени. Для постоянного потенциала, мы можем поискать стационарные решения,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-(i/\hbar)Et} \psi(\mathbf{r}), \quad (2.19)$$

где стационарные волновые функции удовлетворяют выражению

$$\left(\nabla^2 + k^2(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = 0, \quad k^2(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\mathbf{r})]. \quad (2.20)$$

2.2 Разделение угловых переменных

Центральный потенциал зависит только от абсолютной величины r , но не от углов вектора \mathbf{r} , $U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}|) = U(r)$. *Нецентральные* взаимодействия, такие как тензорные силы в ядерной физике или силы между двумя магнитными моментами, появляются тогда, когда частицы имеют определенные направления, выделенные их внутренними степенями свободы. Для $U = U(r)$, уравнение Шредингера (2.20) не содержит функций углов,

а гамильтониан инвариантен относительно *вращений*. Такая ситуация обсуждалась в Гл. 7.10. Орбитальный момент $\hat{\ell}$ сохраняется (поскольку он коммутирует с гамильтонианом). Однако только один компонент $\hat{\ell}$, например $\hat{\ell}_z$, может иметь определенное значение m (не путать с приведенной массой) в данном состоянии. Изменяя ориентацию системы, мы можем изменить эту проекцию, но не значение энергии, поскольку операторы вращений, раздел 4.7, коммутируют с \hat{H} . Поэтому энергетический спектр в центральном поле всегда *вырожден* по отношению к проекции орбитального момента.

Выбирая решение с определенным значением m , мы ограничиваем ориентацию системы. Симметрия такого решения *меньше*, чем гамильтониана. Это простейшее проявление *спонтанного нарушения симметрии*. Симметрия восстанавливается в присутствии вырожденных состояний с различными величинами m . Полный набор таких состояний и вероятность изменения ориентации и переходов от одного состояния к другому внутри одного и того же набора указывает на вращательную инвариантность системы. Мы уже встречали подобную инвариантность в двухмерной системе, Разд. 11.5, где симметрия позволяет выделить азимутальный угол и найти *универсальную* угловую функцию (11.82). Теперь мы реализуем аналогичную программу для трех измерений.

Чтобы разделить радиальные и угловые переменные мы ищем решение уравнения Шредингера в виде произведения

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (2.21)$$

С таким подходом уравнение (2.20) состоит из двух частей, зависящих от различных переменных и, следовательно, каждая из которых равна *константе разделения* C ,

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + k^2(r)r^2 = \frac{1}{Y} \hat{\ell}^2 Y = C, \quad (2.22)$$

где мы использовали оператор Лапласа в сферических координатах (16.69). Константа разделения должна быть определена из граничных условий для волновых функций. Это место, где возникает квантование — такие константы являются источником квантовых чисел, ср. т.I, раздел 11.5.

Угловое уравнение,

$$\hat{\ell}^2 Y(\theta, \varphi) = CY(\theta, \varphi), \quad (2.23)$$

является задачей по нахождению собственных значений оператора $\hat{\ell}^2$. В соответствии с алгеброй углового момента, собственное значение C может быть записано как $\ell(\ell + 1)$, где ℓ - неотрицательное, полуцелое или целое число. Дальнейшее разделение переменных (16.77) дает нормированное экспоненциальное решения (11.82) с *целыми* значениями m , отобранными согласно периодическим граничным условиям для азимутального угла. Из этого следует, что ℓ также является *целым*, так что решения являются *сферическими функциями* $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$. Важно, что угловые функции *универсальные*, не зависящие от потенциала $U(r)$. Таким образом, с полным набором сферических функций, мы можем решить эту угловую задачу раз и навсегда. Характерный потенциал вводится через радиальные уравнения.

Задача 2.2

Показать, что гамильтониан частицы массы m в сферически симметричном потенциале $U(r)$ может быть представлен в форме

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \hat{\ell}^2}{2mr^2} + U(r), \quad (2.24)$$

и радиальный импульс определенный, как

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r, \quad (2.25)$$

канонически сопряжен к радиальной координате \hat{r} .

Решение Оператор \hat{p}_r отличается от наивного выражения $-i\hbar(\partial/\partial r)$:

$$\hat{p}_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right). \quad (2.26)$$

Различие связано с различной геометрической природой радиального движения в ограниченной области $r \geq 0$. Квадрат оператора (2.26) равен

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \right). \quad (2.27)$$

Поскольку

$$\frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} = -\frac{1}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}, \quad (2.28)$$

мы приходим к выражению

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad (2.29)$$

которое является правильной формой радиального оператора кинетической энергии (радиальной частью оператора Лапласа). Коммутационные соотношения

$$[\hat{p}_r, \hat{r}] = -i\hbar \quad (2.30)$$

следуют из (2.26) поскольку дополнительный член $1/r$ коммутирует с r если $r \neq 0$.

Задача 2.3

Вывести операторные уравнения движения для \hat{r} , \hat{p}_r и \hat{r}^q , и доказать связь между ожидаемыми значениями в стационарном состоянии,

$$\langle p_r r^{q-1} \rangle = -\frac{i\hbar}{2}(q-1)\langle r^{q-2} \rangle. \quad (2.31)$$

Решение С помощью (2.29) получаем, по аналогии с классической механикой,

$$\frac{d\hat{r}}{dt} = \frac{\hat{p}_r}{m}, \quad (2.32)$$

$$\frac{d\hat{p}_r}{dt} = \frac{\hbar^2 \hat{\ell}^2}{m\hat{r}^3} - \frac{dU}{d\hat{r}}. \quad (2.33)$$

Оператор \hat{r}^q не коммутирует только с радиальной частью кинетической энергии,

$$[\hat{r}^q, \hat{p}_r^2] = [\hat{r}^q, \hat{p}_r]\hat{p}_r + \hat{p}_r[\hat{r}^q, \hat{p}_r] = i\hbar q(\hat{r}^{q-1}\hat{p}_r + \hat{p}_r\hat{r}^{q-1}). \quad (2.34)$$

Совместно с (2.32) это дает

$$\frac{d\hat{r}^q}{dt} = \frac{q}{m}\hat{p}_r\hat{r}^{q-1} + i\hbar\frac{q(q-1)}{2m}\hat{r}^{q-2}. \quad (2.35)$$

Так как среднее значение производной оператора в стационарном состоянии дискретного спектра зануляется, см. т.I, раздел 7.7, мы приходим к предложенному выражение (2.31).

2.3 Радиальная часть уравнения Шредингера

При определенном значении константы разделения $C = \ell(\ell + 1)$, радиальная часть уравнения (2.22),

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + k^2(r) R = \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} R, \quad (2.36)$$

должна определять, для каждого значения орбитального момента ℓ , решение $R_\ell(r)$ и спектр возможных энергий E , вырожденных по m в результате вращательной инвариантности потенциала. Мы называем эти решения *парциальные волны* и используем традиционную символику для различных значений ℓ :

ℓ	0	1	2	3	4	...
symbol	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	...

(2.37)

и далее в алфавитном порядке.

Уравнение (2.36) может быть переписано с помощью ℓ -зависимого потенциала,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + k_\ell^2(r) R = 0, \quad (2.38)$$

$$k_\ell^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U_\ell(r)], \quad U_\ell(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2}. \quad (2.39)$$

Последний, *центробежный*, член в эффективном потенциале (2.39) известен из классической механики как представление вращательной части кинетической энергии с моментом инерции mr^2 . *s*-волновое уравнение не содержащих этот член.

Во многих случаях полезно упрощение, основанное на параметрах создания тока. В трехмерной геометрии с фиксированным началом координат, поток из центра распространяется через поверхность с площадью увеличивающейся как $\propto r^2$. Постоянный поток, поэтому, должен падать как $\propto 1/r^2$. Так было бы в случае, если бы абсолютное значение волновой функции вело себя, независимо от ℓ , $\propto 1/r$. Давайте посмотрим на решение для радиальной части в виде

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}. \quad (2.40)$$

Радиальная часть оператора Лапласа (кинетической энергии радиального движения) становится

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{u''}{r}, \quad (2.41)$$

где штрих обозначает радиальную производную, а уравнение при решении приобретает *одномерную* форму с эффективным волновым вектором $k_\ell(r)$ см. уравнение (2.39),

$$u'' + k_\ell^2(r)u = 0. \quad (2.42)$$

Некоторые свойства решения являются общими для широкого класса потенциалов. Позвольте нам оценить решения на больших расстояниях и в окрестности нуля.

Будем считать, что потенциал имеет конечный радиус a , и при $r > a$ мы можем пренебречь потенциальным членом $U(r)$. Центробежный член также уменьшается и, на достаточно больших r , $\hbar^2 \ell(\ell + 1)/(2mr^2) \ll E$. На таких расстояниях мы можем рассматривать движение как свободное с волновым числом k , $k^2 = 2mE$, так, что мы приходим к простейшей одномерной задаче

$$u'' + k^2 u = 0, \quad (2.43)$$

с общим решением как произвольной суперпозицией волн распространяющейся от (+) и к (−) центру,

$$u(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}. \quad (2.44)$$

В терминах исходной функции (2.40),

$$R(r) = A \frac{e^{ikr}}{r} + B \frac{e^{-ikr}}{r}, \quad (2.45)$$

мы получаем суперпозиции сферической *исходящей* и *входящей* волн. Уравнение (2.45) подтверждает наши ожидания по части сохранения тока. Радиальный ток в сферической волне единичной амплитуды с угловыми квантовыми числами ℓ и m есть, для определенного направления в пространстве,

$$j_r = \frac{\hbar}{2mi} |Y_{\ell m}|^2 \left(R^* \frac{dR}{dr} - R \frac{dR^*}{dr} \right) = \pm \frac{\hbar k}{mr^2} |Y_{\ell m}|^2, \quad (2.46)$$

так, что поток через элемент площади,

$$j_r dS = j_r r^2 do = \pm \frac{\hbar k}{m} |Y_{\ell m}|^2 do, \quad (2.47)$$

сохраняется как функция r . Здесь мы предположили, $E > 0$ и бесконечное движение с потенциалом $U \rightarrow 0$ на больших расстояниях. Для *связанного состояния*, $E < 0$, асимптотический волновой вектор является мнимым, $k = i\kappa$, а функция $u(r)$ экспоненциально спадает,

$$u(r) \propto e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \quad (2.48)$$

Мы должны отметить, что это асимптотическое решение не верно для кулоновского потенциала, который уменьшается слишком медленно, $\propto 1/r$.

Сферические полярные координаты имеют геометрическую сингулярность $r \rightarrow 0$, где углы не определены, а энергия вращения (для $\ell \neq 0$) стремится к бесконечности. Если потенциал $U(r)$ конечен в $r \rightarrow 0$, нет никакой физической сингулярности, и волновая функция должна быть определена в нуле. В этом случае главные члены уравнения (2.42) дают в начале координат

$$u'' - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = 0. \quad (2.49)$$

Это уравнение универсальное, не имеющее отношения к памяти о величине энергии или фактического потенциала. Уравнение Эйлера-Пуассона типа имеет решение в виде степенной Функции

$$u = r^\gamma, \quad \gamma(\gamma-1) = \ell(\ell+1), \quad (2.50)$$

с двумя возможностями, $\gamma = \ell + 1$ or $\gamma = -\ell$. Они определяют *регулярное* и *нерегулярное* решения,

$$u_\ell^{(\text{reg})} \propto r^{\ell+1}, \quad R_\ell \propto r^\ell, \quad (2.51)$$

$$u_\ell^{(\text{irreg})} \propto \frac{1}{r^\ell}, \quad R_\ell \propto \frac{1}{r^{\ell+1}}, \quad (2.52)$$

Задача 2.4

Предполагая центральный потенциал $U(r)$ удовлетворяющий условиям применимости квазиклассического приближения, измените одномерное

решение, данное в гл. 15, таким образом, чтобы включить трехмерный эффективный потенциал (2.39).

Решение Разница по сравнению с одномерным случаем в дополнительном граничном условии $R(0) = 0$. Сингулярность может быть устранена путем отображения полуюси $r \geq 0$ на всю ось x с помощью замены

$$r = e^x, \quad r = 0 \Rightarrow x = -\infty, \quad r = \infty \Rightarrow x = \infty. \quad (2.53)$$

С новыми переменными уравнение Шредингера приобретает форму

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{du}{dx} + e^{2x} \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(e^x) - \ell(\ell + 1)e^{-2x} \right] u = 0. \quad (2.54)$$

Первая производная может быть устранена стандартным приемом введения новой функции $F(x)$ в соответствии с

$$u = e^{x/2} F(x). \quad (2.55)$$

$F(x)$ удовлетворяет

$$\frac{d^2 F}{dx^2} + e^{2x} \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(e^x) - \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 e^{-2x} \right] F(x) = 0. \quad (2.56)$$

Это уравнение имеет обычный вид с граничными условиями определенными на $x = \pm\infty$. Квазиклассическая фаза новой волновой функции

$$S(x) = \int^x dx e^x \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(e^x) - \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 e^{-2x}}, \quad (2.57)$$

или, возвращаясь к исходной переменной r , уравнение (2.53),

$$S(r) = \int^r dr \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) - \frac{(\ell + 1/2)^2}{r^2}}. \quad (2.58)$$

Сравнение (2.58) с исходным уравнением показывает, что радиальная задача может быть изучена в квазиклассическом приближении с тем лишь отличием, что

$$\ell(\ell + 1) \Rightarrow \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (2.59)$$

Требование регулярности вблизи начала координат выбирает решение (2.51). s -волна не имеет центробежный барьера, в то время как все волны $\ell > 0$ подавлены вблизи начала координат. Этот факт сильно влияет на свойства взаимодействия частиц на малых расстояниях. Это соображение справедливо даже для кулоновского взаимодействия $\sim 1/r$, более слабого, вблизи начала координат, чем центробежная энергия. Если потенциал более сингулярен, чем $1/r^2$, мы сталкиваемся с ненормальной ситуацией *падения на центр* так, что система может не иметь конечной энергии в основном состоянии. На самом деле другие физические факторы должны играть роль изменяя потенциал на очень малых расстояниях.

2.4 Свободное движение

В порядке описания радиальной волновой функции мы начнем со случая свободного движения, $U = 0$, когда решение дается в виде сферических волн как аналога плоских волн в декартовой геометрии. Поскольку они образуют полный набор альтернативных решений, плоских и сферических волны могут быть представлены в виде суперпозиции решений другого класса. Это взаимодополняемость имеет важное практическое значение: детектор улавливающий рассеяную сферическую волну в определенном направлении от отражателя на самом деле проецирует эту волну на плоскую волну с определенным направлением импульса. Поэтому необходимо изучить эту взаимосвязь.

Волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ свободного движения в определенной *парциальной волне* с орбитальным моментом ℓ ,

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell m}(\mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (2.60)$$

удовлетворяет радиальному уравнению

$$u'' + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = 0. \quad (2.61)$$

Два линейно независимых решения (2.51) и (2.52) уравнения (2.61) отличаются своим поведением в начале координат. Для свободного движения мы должны выбрать правильное решение, $u(0) = 0$. Тем не менее, для движения в центральном поле, свободное уравнение (2.61) справедливо только в асимптотической области вне зоны действия потенциала. Здесь общее решение будет суперпозицией регулярного и нерегулярного решений,

которые должны быть гладко склеены с регулярным решением в области взаимодействия. Поэтому, мы должны знать свойства обоих решений.

Вводя размерную переменную $\rho = kr$, можно переписать уравнение (2.61) как

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] u = 0. \quad (2.62)$$

Здесь энергетическая зависимость исчезла — откуда, решения для всех энергий ведут себя аналогично, если расстояния измеряются в соответствующих длинах волн. Действительно, свободное движение не имеет любого внешнего масштаба длины.

При малых ρ , в соответствии с разделом 17.3, регулярное, f_ℓ , и сингулярное, g_ℓ , решения ведут себя как

$$f_\ell \sim C_\ell \rho^{\ell+1}, \quad g_\ell \sim \frac{D_\ell}{\rho^\ell}, \quad \rho \rightarrow 0. \quad (2.63)$$

В асимптотике, $\rho \rightarrow \infty$, оба решения суперпозиции исходящей, $e^{i\rho}$, и входящей, $e^{-i\rho}$, волн. Отнормируем (путем выбора C_ℓ) регулярное решение таким образом, что асимптотически

$$f_\ell \approx \sin(\rho + \beta_\ell), \quad \rho \rightarrow \infty. \quad (2.64)$$

Фаза β_ℓ будет найдена ниже. Исследуя решения мы применим *метод факторизации* [8].

Определим два набора дифференциальных операторов

$$\hat{A}_\ell^{(\pm)} = \frac{d}{d\rho} \pm \frac{\ell}{\rho}. \quad (2.65)$$

Тогда легко проверить, что уравнение (2.62) можно представить в двух эквивалентных формах,

$$\hat{A}_{\ell+1}^{(+)} \hat{A}_{\ell+1}^{(-)} u_\ell = -u_\ell = \hat{A}_\ell^{(-)} \hat{A}_\ell^{(+)} u_\ell. \quad (2.66)$$

С помощью регулярных решений f_ℓ , введем набор функций

$$w_{\ell-1} = \hat{A}_\ell^{(+)} f_\ell, \quad \ell = 1, 2, \dots \quad (2.67)$$

Теперь мы можем доказать, что функции w_ℓ пропорциональны f_ℓ и найти коэффициенты пропорциональности. Со вторым уравнением (2.66) мы найдем

$$\hat{A}_\ell^{(-)} w_{\ell-1} = \hat{A}_\ell^{(-)} \hat{A}_\ell^{(+)} f_\ell = -f_\ell. \quad (2.68)$$

Если мы здесь подставим $\ell \rightarrow \ell + 1$, то мы придем к

$$\hat{A}_{\ell+1}^{(-)} w_\ell = -f_{\ell+1}, \quad (2.69)$$

или, действуя на обе части (2.69) при помощи $\hat{A}_{\ell+1}^{(+)}$,

$$\hat{A}_{\ell+1}^{(+)} \hat{A}_{\ell+1}^{(-)} w_\ell = -\hat{A}_{\ell+1}^{(+)} f_{\ell+1} = -w_\ell, \quad (2.70)$$

в соответствии с определением (2.67). Если мы сравним результат (2.70) с первым из уравнений (2.66), мы увидим, что функции w_ℓ и f_ℓ удовлетворяют *одному и тому же* уравнению.

Чтобы убедиться, что w_ℓ регулярно в начале координат, мы используем уравнение (2.67) с $(\ell - 1) \rightarrow \ell$ и асимптотикой (2.63) регулярного решения $f_{\ell+1}$,

$$w_\ell = A_{\ell+1}^{(+)} f_{\ell+1} \sim A_{\ell+1}^{(+)} C_{\ell+1} \rho^{\ell+2} = (2\ell + 3) C_{\ell+1} \rho^{\ell+1}. \quad (2.71)$$

Это означает, что w_ℓ также принадлежит к классу *регулярных* решений. Но регулярное решение есть, с точностью до нормировки, уникальное, то есть w_ℓ и f_ℓ просто пропорциональны, а их постоянное отношение может быть найдено из (2.63) и (2.71),

$$w_\ell = (2\ell + 3) \frac{C_{\ell+1}}{C_\ell} f_\ell. \quad (2.72)$$

Таким образом мы определим *рекуррентное соотношение*,

$$f_{\ell+1} = -\hat{A}_{\ell+1}^{(-)} w_\ell = -(2\ell + 3) \frac{C_{\ell+1}}{C_\ell} \hat{A}_{\ell+1}^{(-)} f_\ell, \quad (2.73)$$

которое позволяет последовательно построить все регулярные функции f_ℓ . Для s -волны, $\ell = 0$, регулярным при $\rho = 0$ решение уравнения (2.62) является $C_0 \sin \rho$. Для асимптотического выбора (2.64), $C_0 = 1$, и мы получим

$$f_0 = \sin \rho, \quad \beta_0 = 0. \quad (2.74)$$

При следующем шаге (p -волна, $\ell = 1$), в соответствии с уравнениями (2.73) и (2.74),

$$f_1 = -3 \frac{C_1}{C_0} \left(\cos \rho - \frac{\sin \rho}{\rho} \right), \quad (2.75)$$

и в асимптотике ($\rho \rightarrow \infty$)

$$f_1 \rightarrow -3 \frac{C_1}{C_0} \cos \rho = 3 \frac{C_1}{C_0} \sin \left(\rho - \frac{\pi}{2} \right). \quad (2.76)$$

Сравнение с требуемой асимптотикой (2.64) показывает, что $C_1 = (1/3)C_0 = 1/3$, и

$$f_1 = \frac{\sin \rho}{\rho} - \cos \rho, \quad \beta_1 = -\frac{\pi}{2}. \quad (2.77)$$

Нетрудно видеть, что общий результат

$$C_\ell = \frac{1}{2\ell+1} \cdot \frac{1}{2\ell-1} \cdots \frac{1}{5} \cdot \frac{1}{3} = \frac{1}{(2\ell+1)!!} = \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!}, \quad (2.78)$$

и

$$\beta_\ell = -\frac{\ell\pi}{2}. \quad (2.79)$$

В итоге, наше регулярное решение характеризуется асимптотиками

$$f_\ell \sim \begin{cases} [2^\ell \ell! / (2\ell+1)!] \rho^{\ell+1}, & \rho \rightarrow 0, \\ \sin(\rho - \ell\pi/2), & \rho \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.80)$$

В отличие от регулярного решения, основной член ряда, который представляет при малых ρ *нерегулярное* решение g_ℓ не определяет однозначно функцию g_ℓ . Действительно, при добавлении к g_ℓ регулярной функции, af_ℓ с произвольным постоянным коэффициентом a , главный доминирующий сингулярный член при $\rho \rightarrow 0$ не изменяется, однако стремится к другим асимптотикам при $\rho \rightarrow \infty$. Для полного определения g_ℓ , мы накладываем требование, что на больших расстояниях g_ℓ имеет асимптотики аналогичные (2.80),

$$g_\ell \sim \cos \left(\rho - \frac{\ell\pi}{2} \right), \quad \rho \rightarrow \infty. \quad (2.81)$$

Такой выбор фазы означает определенное значение константы a . При условиях (2.63) и (2.81) решение g_ℓ полностью определено. Обратите внимание, что старые рекуррентные отношения действительны для функции g_ℓ ,

$$\hat{A}_{\ell+1}^{(-)} g_\ell = -g_{\ell+1}, \quad \hat{A}_\ell^{(+)} g_\ell = -g_{\ell-1}. \quad (2.82)$$

В последовательности парциальных волн, операторы $\hat{A}^{(-)}$ and $\hat{A}^{(+)}$ очевидно играют роль операторов рождения и аннигиляции, соответственно.

Задача 2.5

Определить величину константы D_ℓ в уравнении (2.63).

Решение Результат может быть найден многими способами. Например, рассмотрим Вронскиан (9.24)

$$W[f_\ell, g_\ell] = \frac{df_\ell}{d\rho} g_\ell - f_\ell \frac{dg_\ell}{d\rho}. \quad (2.83)$$

Как и в разделе 9.3, нетрудно показать, что этот Вронскиан не зависит от ρ поскольку обе функции, f_ℓ и g_ℓ , подчиняющиеся уравнению (2.61). Поэтому мы можем вычислить его значение в асимптотике на больших расстояниях,

$$W = \cos^2\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right) + \sin^2\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right) = 1. \quad (2.84)$$

С другой стороны, вычисляя W при $\rho \rightarrow 0$, мы находим

$$W = 1 = (\ell + 1)C_\ell \rho^\ell D_\ell \rho^{-\ell} - C_\ell \rho^{\ell+1}(-\ell)\rho^{-\ell-1}D_\ell = (2\ell + 1)D_\ell C_\ell, \quad (2.85)$$

откуда

$$D_\ell = \frac{1}{C_\ell(2\ell + 1)}. \quad (2.86)$$

Задача 2.6

Докажите, что функции f_ℓ и g_ℓ относятся к функциям Бесселя полуцелого порядка, раздел 9.7,

$$f_\ell(\rho) = \sqrt{\frac{\pi\rho}{2}} J_{\ell+1/2}(\rho), \quad g_\ell(\rho) = \sqrt{\frac{\pi\rho}{2}} J_{-(\ell+1/2)}(\rho). \quad (2.87)$$

Полные радиальные функции (2.40) выражаются через так называемые *сферические функции Бесселя* и *сферические функции Ноймана*,

$$j_\ell(\rho) = \frac{f_\ell(\rho)}{\rho} = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{\ell+1/2}(\rho), \quad n_\ell(\rho) = -\frac{g_\ell(\rho)}{\rho} = (-)^{\ell+1} \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{-(\ell+1/2)}(\rho).$$

$$(2.88)$$

Суммируем их свойства (эти функции комбинации элементарных тригонометрических функций с координатой в степени в знаменателе). Низшие порядки

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}, \quad (2.89)$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}, \quad n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}. \quad (2.90)$$

Вблизи начала координат, $\rho \rightarrow 0$,

$$j_\ell(\rho) \approx \frac{\rho^\ell}{(2\ell + 1)!!}, \quad n_\ell(\rho) \approx -\frac{(2\ell - 1)!!}{\rho^{\ell+1}}, \quad (2.91)$$

в то время как в асимптотике, $\rho \rightarrow \infty$,

$$j_\ell(\rho) \approx \frac{\sin(\rho - \ell\pi/2)}{\rho}, \quad n_\ell(\rho) \approx -\frac{\cos(\rho - \ell\pi/2)}{\rho}. \quad (2.92)$$

Любые линейные комбинации f_ℓ и g_ℓ удовлетворяют тому же самому свободному уравнению (2.61). В особенности, комбинации соответствуют *сферическим функциям Ханкеля* первого и второго рода,

$$v_\ell = f_\ell + ig_\ell, \quad \tilde{v}_\ell = f_\ell - ig_\ell, \quad (2.93)$$

в асимптотике представляющие входящую или исходящую сферическую волну,

$$v_\ell \sim ie^{-i(\rho - \ell\pi/2)}, \quad \tilde{v}_\ell \sim -ie^{i(\rho - \ell\pi/2)}. \quad (2.94)$$

Сферические функции Ханкеля определяются как

$$h_\ell^{(1)}(\rho) = j_\ell(\rho) + in_\ell(\rho), \quad h_\ell^{(2)}(\rho) = j_\ell(\rho) - in_\ell(\rho). \quad (2.95)$$

Их асимптотики даны

$$h_\ell^{(1)}(\rho) \sim -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - \ell\pi/2)}, \quad h_\ell^{(2)}(\rho) = \left(h_\ell^{(1)}(\rho)\right)^*. \quad (2.96)$$

2.5 Плоская и сферическая волны

Сферическая волна,

$$\frac{f_\ell(\rho)}{\rho} Y_{\ell m}(\mathbf{n}) = j_\ell(\rho) Y_{\ell m}(\mathbf{n}), \quad \rho = kr, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (2.97)$$

образует полный набор *регулярных* в начале координат решений уравнения Шредингера для свободного движения частицы с энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Любое другое регулярное решение может быть расширено с помощью этого полного набора. В частности, это может быть применено к *плоской волне*, которая, определенно, не имеет особенностей в начале координат,

$$e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} = \sum_{\ell m} C_{\ell m}(\mathbf{k}) Y_{\ell m}(\mathbf{n}) j_\ell(\rho). \quad (2.98)$$

Чтобы найти амплитуды $C_{\ell m}$ в разложении (2.98), мы используем свободу выбора оси квантования z для сферических функций $Y_{\ell m}$. Мы скомбинируем ось z с направлением волнового вектора \mathbf{k} , так, что ($\eta = \cos \theta$)

$$k = k_z, \quad (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = kz = kr \cos \theta \equiv \rho \eta. \quad (2.99)$$

Плоская волна (2.98) имеет осевую симметрию вокруг оси z и не зависит от полярного угла φ . Поэтому разложение содержит только $Y_{\ell 0} = \sqrt{(2\ell + 1)/4\pi} P_\ell(\eta)$, так, что

$$e^{i\rho\eta} = \sum_{\ell} C_{\ell} P_{\ell}(\eta) j_{\ell}(\rho), \quad C_{\ell} = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi}} C_{\ell 0}. \quad (2.100)$$

Из-за ортогональности (16.145) полиномов Лежандра,

$$\int_{-1}^1 d\eta e^{i\rho\eta} P_{\ell}(\eta) = \frac{2}{2\ell + 1} C_{\ell} j_{\ell}(\rho). \quad (2.101)$$

Это соотношение должно быть одинаково правильным в ρ , так, чтобы достаточно было вычислить левую сторону при некотором значении ρ . Интегрирование по частям дает

$$\int_{-1}^1 d\eta e^{i\rho\eta} P_{\ell}(\eta) = \frac{i}{\rho} \int_{-1}^1 d\eta e^{i\rho\eta} P'_{\ell}(\eta) + \frac{1}{i\rho} [e^{i\rho} - (-)^{\ell} e^{-i\rho}], \quad (2.102)$$

где необходимо вспомнить граничные значения полиномов Лежандра (16.143) и (16.148). Проинтегрированное выражение с правой стороны (2.102) равна

$(2/\rho)i^\ell \sin(\rho - \ell\pi/2)$, в то время, как видно из дальнейшего интегрирования по частям, оставшийся интеграл имеет порядок величины $1/\rho^2$ при больших ρ . Приравнявая асимптотики (2.80) с правой стороны (2.101), мы приходим к

$$\frac{2}{\rho} i^\ell \sin(\rho - \ell\pi/2) = \frac{2}{2\ell + 1} C_\ell \frac{\sin(\rho - \ell\pi/2)}{\rho} \rightsquigarrow C_\ell = i^\ell (2\ell + 1). \quad (2.103)$$

Уравнения (2.101) и (2.103) определяют полезные интегральные соотношения,

$$j_\ell(\rho) = \frac{1}{2i^\ell} \int_{-1}^1 d\eta e^{i\rho\eta} P_\ell(\eta). \quad (2.104)$$

Таким образом, искомым разложением (2.98) плоской волны на сферические волны является

$$e^{ikz} = e^{i\rho\eta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\eta) j_\ell(\rho), \quad (2.105)$$

или, в произвольной системе координат,

$$e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta_{(\mathbf{k},\mathbf{r})}) j_\ell(\rho). \quad (2.106)$$

Возвращаясь обратно к уравнениям (2.103) и (2.104), мы можем записать асимптотическую форму расширения при $\rho \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} &\Rightarrow \frac{1}{2i\rho} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta_{(\mathbf{k},\mathbf{r})}) [e^{i\rho} - (-)^\ell e^{-i\rho}] \\ &= \sum_{\ell} i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta_{(\mathbf{k},\mathbf{r})}) \frac{\sin(\rho - \ell\pi/2)}{\rho}. \end{aligned} \quad (2.107)$$

Набор полиномов Лежандра является полным, как мы можем видеть из уравнений (16.147) и (16.149),

$$\sum_{\ell} (2\ell + 1) P_\ell(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = 4\pi \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}'), \quad \sum_{\ell} (2\ell + 1) (-)^\ell P_\ell(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = 4\pi \delta(\mathbf{n} + \mathbf{n}'). \quad (2.108)$$

Это показывает эквивалентное и геометрически прозрачное асимптотическое равенство: при $\rho \rightarrow \infty$

$$e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \Rightarrow \frac{2\pi}{ikr} \left[e^{ikr} \delta(\mathbf{n}_k - \mathbf{n}) - e^{-ikr} \delta(\mathbf{n}_k + \mathbf{n}) \right]. \quad (2.109)$$

В асимптотике, плоские волны выглядят как суперпозиция исходящих сферической волны в направлении \mathbf{k} и входящих волны вдоль $-\mathbf{k}$.

2.6 Сферическая потенциальная яма

Это самый простой, но очень важный пример — притягивающего потенциала глубиной U_0 и радиусом a , рис. 3.8. Задача сводится к одномерному движению вдоль полуоси $r \geq 0$.

Для *связанных* состояний ($E = -\varepsilon < 0$), волновой вектор внутри потенциальной ямы, $0 \leq r \leq a$, is k_0 ,

$$k_0^2 = \frac{2m(U_0 - \varepsilon)}{\hbar^2}. \quad (2.110)$$

С заменой (2.40) и безразмерная переменная длины, определенной здесь как $\rho = k_0 r$, радиальное уравнение Шредингера (2.61) снова принимает вид (2.61) свободного движения. Выбирая *регулярное* решение внутри потенциальной ямы, получим

$$R(r) = A j_\ell(k_0 r), \quad 0 \leq r \leq a. \quad (2.111)$$

В континууме, то же самое справедливо для бесконечного движения при $E > 0$. Для $\ell = 0$, нет центробежного барьера, и мы имеем стандартное одномерное уравнение для $u(r)$ с кинематическим условием $u(0) = 0$, что можно имитировать непроницаемой стеной в начале координат и, следовательно,

$$u_0(r) = \text{const} \cdot \sin(k_0 r). \quad (2.112)$$

Это равносильно сохранению только *нечетных* решений задачи для одномерной симметричной потенциальной ямы, простирающейся от $-a$ до $+a$.

Во внешней области, $r \geq a$, связанное уравнение состояния включает в себя мнимый волновой вектор,

$$k = i\kappa, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}, \quad \varepsilon = -E, \quad (2.113)$$

и уравнение снова приобретает ту же самую форму с *мнимой* безразмерной переменной $\rho = i\kappa r$. Чтобы получить экспоненциально затухающую функцию под барьером, мы должны взять комбинацию h_ℓ из мнимого аргумента,

$$R_\ell(r) = B h_\ell^{(1)}(i\kappa r). \quad (2.114)$$

Низшая функция этого типа

$$h_0^{(1)}(i\kappa r) = -\frac{1}{\kappa r} e^{-\kappa r}, \quad (2.115)$$

$$h_1^{(1)}(i\kappa r) = i \left(\frac{1}{\kappa r} + \frac{1}{\kappa^2 r^2} \right) e^{-\kappa r}. \quad (2.116)$$

Внутренние и внешние решения должны сшиваться на границе потенциальной ямы $r = a$. Достаточно соответствия функций $u = rR$ (*доказать это!*). Для $\ell = 0$ нам необходимо сшить $\sin(k_0 r)$ с $\exp(-\kappa r)$. Как часто в таких случаях, удобно исключить постоянные амплитуды приравнявая *логарифмические производные* при $r = a$, что ведет к уравнению для энергии связи ε ,

$$\tan(k_0 a) = -\frac{k_0}{\kappa}. \quad (2.117)$$

Это уравнение может быть решено графически, но сразу видно, что связанное состояние появляется, только если глубина потенциальной ямы превышает критическое значение U^{crit} . Предполагая, например, положительный знак внутренней функции (2.11), мы следуем растущему синусу к границе. Если внутренняя Функция достигает $r = a$ с положительной производной, то невозможно сделать непрерывную сшивку со спадающей внешней экспонентой. Однако это становится возможным после того, как фаза синуса $k_0 a$ достигнет $\pi/2$. Таким образом, как мы уже обсуждали в (3.65),

$$k_0^{\text{crit}} = \frac{\pi}{2a}, \quad U^{\text{crit}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (2.118)$$

Дальнейшее углубление потенциальной ямы увеличивает энергию связи, и в какой-то момент внутренняя функция, приобретая узел внутри потенциальной ямы, снова может быть склеена со спадающей внешней

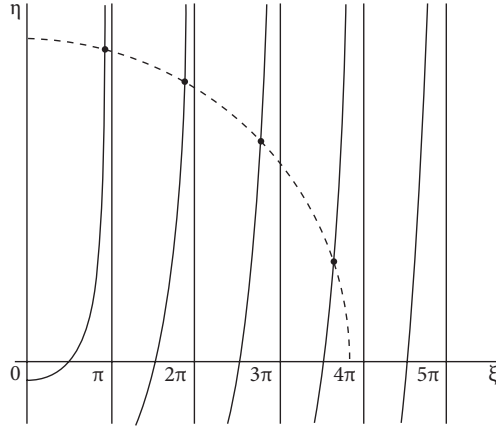


Рис. 2.2. Графическая конструкция для сферического потенциальной ямы (в этом случае существует четыре связанных s -уровня)

функцией, так что колодец может содержать два связанных состояния. Каждый раз, новый уровень появляется с нулевой энергией связи, а затем опускается вниз, по мере углубления потенциальной ямы. Момент появления уровня соответствует $\kappa = 0$. Удобно ввести безразмерные переменные удовлетворяющие уравнению (2.117),

$$\xi = k_0 a, \quad \eta = \kappa a, \quad \eta = -\frac{\xi}{\tan \xi}. \quad (2.119)$$

Они взаимосвязаны через уравнение окружности в плоскости (η, ξ) , рис. 17.2,

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \equiv \zeta^2. \quad (2.120)$$

При $\kappa \rightarrow 0$, переменная $\xi \rightarrow \zeta$, предел, который не зависит от ε . Для $\ell = 0$, как видно из уравнения (2.117), это происходит, когда обе части уравнения бесконечны,

$$\zeta_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad n = 0, 1, \dots \quad (2.121)$$

так, что новорожденные уровни появляются, когда

$$U_0 = U_n^{\text{crit}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2. \quad (2.122)$$

Задача 2.7

Найти последовательность критических значений переменных U_n при появлении связанных состояний с $\ell = 1$ (p -волна).

Решение Используя точную форму сферических функций Бесселя и Ханкеля для $\ell = 1$, найдем решение

$$u(r) = \begin{cases} A[\sin(k_0 r)/(k_0 r) - \cos(k_0 r)], & r < a, \\ B[1 + 1/(\kappa r)] \exp(-\kappa r), & r > a. \end{cases} \quad (2.123)$$

Граничные условия могут быть записаны как

$$\frac{\cot \xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^2} \quad (2.124)$$

в терминах переменных (2.119), связанных уравнением (2.120). Новые p -уровни появляются при $\cot \xi \rightarrow \infty$, или $\zeta_n = n\pi$,

$$U_n^{\text{crit}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n \geq 1. \quad (2.125)$$

Задача 2.8

Квадратный колодец радиуса a поддерживает только слабо связанное s -волновое состояние с энергией связи ε . Найти глубину потенциальной ямы.

Решение Глубина только слегка больше, чем критическая величина (2.118), $U_0 = U^{\text{crit}} + \delta U$. Это означает, что ξ слегка больше, чем $\pi/2$, и, в первую очередь в η , мы находим из (2.120) $\zeta^2 \approx \pi^2/4 + 2\eta$. Это определяет

$$\delta U = \sqrt{\frac{2\hbar^2 \varepsilon}{ma^2}}. \quad (2.126)$$

Энергия связи растет пропорционально квадрату избытка глубины потенциала,

$$\varepsilon = \frac{ma^2}{2\hbar^2} (\delta U)^2 = \frac{\pi^2}{16} \frac{(\delta U)^2}{U^{\text{crit}}}. \quad (2.127)$$

2.7 Короткодействующий потенциал

Новорожденные состояния очень слабо связаны. Соответствующая внешняя экспонента имеет большую длину проникновения $\sim 1/\kappa$ и форму *гало*, раздел 3.5, волновой функции в классически запрещенной области. Решения в континууме могут быть найдены с использованием одного и того же граничного условия, но мы отложим их обсуждение до тех пор, пока мы не сформулируем задачу рассеяния.

Во многих практических ситуациях, мы заинтересованы в вопрос существования связанного состояния(-й). *Дальнодействующие* потенциалы, как, например, кулоновской силы, может иметь бесконечное количество связанных состояний, в том числе очень большого пространственного размера. В таких случаях у нас нет *гало*: волновая функция экспоненциально затухает, $\sim \exp(-\kappa r)$, в то время как потенциал спадает по степенному закону, например $\sim 1/r$, так что хвост слабосвязанной волновой функции все еще находится в *классически разрешенной* области. В случае *короткодействующего* потенциала, $1/\kappa \gg a$, подавляющая часть волновой Функции может быть в *гало*, за пределами потенциал, вспомним, например, раздел 3.5

Поскольку центробежный барьер для $\ell \neq 0$ подавляет вероятность нахождения частицы внутри притягивающего потенциала на расстояниях $r < \ell/k$, как правило, только *s*-волновые связанные состояния имеют значительный шанс существовать в короткодействующем потенциале. Последовательность *нижних* связанных состояний для каждого орбитального момента ℓ образует так называемые *ираст линии*. Как установлено, вдоль ирастовых линий, состояния упорядочены в точном соответствии с возрастанием ℓ .

Задача 2.9

Докажите, что низшее связанное состояние с орбитальным моментом ℓ в центральном потенциал имеет энергию, которая ниже, чем низшее связанных состояний с орбитальным моментом $\ell' > \ell$.

Решение Энергия E_ℓ - ожидаемое значение эффективного Гамильтониана, уравнение (2.39), для радиальной функции $R_\ell(r)$,

$$E_\ell = \langle R_\ell | \hat{H}_\ell | R_\ell \rangle = \int dr r^2 R_\ell^*(r) \left(\hat{K} + U_\ell(r) \right) R_\ell(r). \quad (2.128)$$

Для высших значений орбитального момента, $\ell' > \ell$,

$$E_{\ell'} = \langle R_{\ell'} | \hat{H}_{\ell'} | R_{\ell'} \rangle = \langle R_{\ell'} | \hat{H}_\ell | R_{\ell'} \rangle + \left\langle R_{\ell'} \left| \frac{\hbar^2 [\ell'(\ell' + 1) - \ell(\ell + 1)]}{2mr^2} \right| R_{\ell'} \right\rangle.$$

(2.129)

Второе слагаемое в (2.129), очевидно, положительно. Что касается первого слагаемого, то мы можем применить вариационный принцип. Гамильтониан H_ℓ имеет свою *минимальную* ожидаемую величину равную E_ℓ в своем собственном состоянии R_ℓ ; поэтому в любых других состояниях, в том числе и в $R_{\ell' \neq \ell}$, его ожидаемое значение больше. В результате, $E_{\ell'} > E_\ell$.

Что касается s -волны, можно заметить из рассуждений предыдущего параграфа, что можно записать граничное условие для логарифмических производных, для любой собственной волновой Функции $R = u/r$, как

$$\lambda(\varepsilon) \equiv \left(\frac{1}{u} \frac{du}{dr} \right)_{r=a} = -\kappa, \quad (2.130)$$

где κ , см. уравнение (2.113), характеризует энергию связи ε . Связанное состояние существует, если логарифмическая производная взята изнутри отрицательна, $\lambda < 0$, и две части волновой функции могут быть непрерывно сшиты. Этот вывод справедлив для любого короткодействующего потенциала и любой границы $r = a$, где движение уже свободно. Если основная часть нормировочного интеграла $\int dr r^2 |R|^2$, определяется внешней частью, где $R \propto \exp(-\kappa r)/r$, весь эффект потенциала в основном описывается одной величиной λ , и результат не зависит от конкретный вид потенциала.

2.8 Добавление второго центра

В случае, когда логарифмическая производная $\lambda > 0$ и нет связанных состояний, присутствие еще одного центра притяжения, не очень далеко от первого, можно породить связанное состояние. Предположим, что центры идентичны и оценим как близко второй центр должны быть расположен.

Если длина проникновения $1/\kappa$, велика по сравнению с радиусом r_0 потенциала, внешняя функция в большой области $r_0 < r < 1/\kappa$ может быть представлена в виде

$$u = \text{const } e^{-\kappa r} \approx \text{const}(1 - \kappa r). \quad (2.131)$$

Тогда полная s -волновая функция ведет себя в этом регионе, как

$$\psi(r) \approx \text{const} \left(\frac{1}{r} - \kappa \right). \quad (2.132)$$

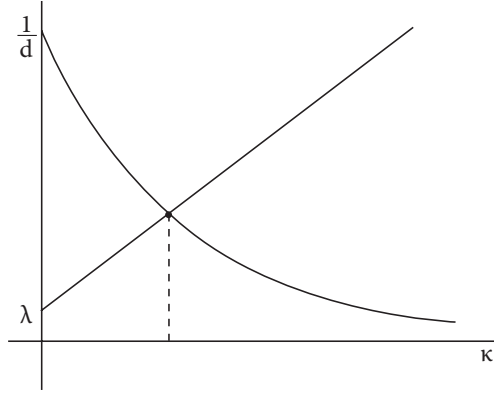


Рис. 2.3. Графическое решение задачи двух центров, уравнение (2.135)

Пусть теперь второй центр на расстоянии $d > r_0$ от первого. В точке \mathbf{r} вне обоих короткодействующих колодцев, волновая функция может быть записана в виде суперпозиции двух одинаковых экспоненциально спадающих s -волновых функций (мы можем присвоить постоянную амплитуду, равную 1),

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|} + \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}, \quad (2.133)$$

где \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 позиции центров. Вблизи (но все еще снаружи) первого центра, \mathbf{r} около \mathbf{r}_1 , приблизительно получим $\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1| \ll 1$, и $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2| \approx d$, так что

$$\psi \approx \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|} - \kappa + \frac{e^{-\kappa d}}{d}. \quad (2.134)$$

Сравнение с уравнением (2.132) показывает, что теперь величина κ эффективно изменено другим выражением, зависящем от d . Для сшивки внешнего решения с внутренним внутри первой потенциальной ямы, характеризующегося логарифмической производной λ , мы должны потребовать, по аналогии с уравнением (2.130), чтобы

$$\lambda = -\kappa + \frac{e^{-\kappa d}}{d}. \quad (2.135)$$

Даже если $\lambda > 0$ и связанное состояние в отдельной потенциальной яме невозможно, здесь оно все же может существовать. Как видно из рис. 17.3,

решение существует, если положительная логарифмическая производная не превышает $1/d$,

$$d < \frac{1}{\lambda}. \quad (2.136)$$

Грубо говоря, частица оказывается захваченной между двумя центрами отражаясь туда и обратно; дополнительное слагаемое в уравнении. (2.135) соответствует *обменному потенциалу* упомянутому в задаче 1.7, см. уравнение (1.46).

Задача 2.10

Рассмотрим среду с идентичными центрами близкодействующего притяжения, распределенных с плотностью ρ . Логарифмическая производная λ для одного центра положительным. Покажите, что частицы в такой среде связаны и найдите энергию связи в пределе малой κ , соответствующей длине проникновения $1/\kappa$ большей, чем среднее расстояние до центра $d \sim \rho^{-1/3}$ [9].

Решение Прямое обобщение уравнения (2.135) дает граничные условия в терминах суммы по дискретным центрам на расстояниях d_i ,

$$\lambda = -\kappa + \sum_i \frac{e^{-\kappa d_i}}{d_i}. \quad (2.137)$$

Переходя к непрерывной плотности, получим

$$\lambda = -\kappa + \int d^3r \rho \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad (2.138)$$

или, для постоянной плотности,

$$\lambda = -\kappa + \frac{4\pi\rho}{\kappa^2}. \quad (2.139)$$

Рисунок, подобный рис. 2.3, показывает, что решение существует для любой положительной плотности ρ . В пределе малых κ мы можем оставить только второе слагаемое в правой части (2.139) и получить

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \approx \sqrt{\frac{4\pi\rho}{\lambda}} \rightsquigarrow \varepsilon = -E = \frac{4\pi\hbar^2\rho}{2m\lambda}. \quad (2.140)$$

Это справедливо в пределе $\lambda \gg 1/d$. Среда действует как отрицательный постоянный потенциал, и частица оказывается связанной, хотя ее *длина*

локализации, $\sim 1/\kappa$, велика по сравнению с расстоянием d между центрами. Такие соображение [уравнение (2.138)] недопустимо для идеальной периодической структуры кристалла, где решение представлено в виде непрерывного спектра Блоховских волн, раздел 8.7. Отличие заключается в строго когерентной суперпозиции волн, отраженных от всех узлов решетки.

2.9 Трехмерный гармонический осциллятор

Трехмерный гармонический осциллятор делает возможным тривиальное разделение переменных. Предполагая потенциал в виде

$$U(x, y, z) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (2.141)$$

получаем стационарные состояния как произведение стандартные функции линейного осциллятора ψ_n с соответствующими частотами,

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x; \omega_x) \psi_{n_y}(y; \omega_y) \psi_{n_z}(z; \omega_z), \quad (2.142)$$

и энергиями

$$E(n_x, n_y, n_z) = \hbar \left[\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \omega_z \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (2.143)$$

Как и в двумерной геометрии, раздел 11.5, изотропный случай,

$$\omega_x = \omega_y = \omega_z \equiv \omega, \quad U = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2, \quad (2.144)$$

особенно интересен. Здесь мы сталкиваемся с большим вырождением, поскольку энергия зависит только от суммы трех квантовых чисел,

$$E(n_x, n_y, n_z) = \hbar \omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) = \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2} \right), \quad N = n_x + n_y + n_z. \quad (2.145)$$

Это экстремальный пример *оболочечной структуры*, так как спектр представляет собой эквидистантную последовательность вырожденных оболочек. Состояния внутри оболочки имеют одинаковые средние значения

$\langle \mathbf{p}^2 \rangle$ and $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$. Действительно, в силу теоремы вириала мы имеем равенство кинетической и потенциальной энергии в любом стационарном состоянии,

$$\langle K \rangle = \langle U \rangle = \frac{1}{2} E = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2} \right). \quad (2.146)$$

Из (2.146) следует, что

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \hbar \omega m \left(N + \frac{3}{2} \right), \quad \langle \mathbf{r}^2 \rangle = \frac{\hbar}{m \omega} \left(N + \frac{3}{2} \right). \quad (2.147)$$

Задача 2.11

Покажите, что степень вырождения оболочки N – той равна

$$g(N) = \frac{1}{2}(N+1)(N+2). \quad (2.148)$$

Большое вырождение не случайно очевидно связано с симметрией по отношению к перестановке осей. Замещение x -кванта y -квантом ведет к различной пространственной форме волновой функции, но не меняет энергии. Таким образом, мы находим девять констант движения,

$$\hat{T}_{ik} = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k, \quad [\hat{T}_{ik}, \hat{H}] = 0. \quad (2.149)$$

Эти операторы не могут иметь одновременно определенные значения, потому что они не коммутируют,

$$[\hat{T}_{ik}, \hat{T}_{mn}] = \delta_{km} \hat{T}_{in} - \delta_{in} \hat{T}_{mk}. \quad (2.150)$$

Все \hat{T}_{ik} коммутируют с полным числом квантов,

$$[\hat{T}_{ik}, \hat{N}] = 0, \quad \hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_i \hat{T}_{ii} \equiv \text{tr } \hat{T}. \quad (2.151)$$

Восемь оставшихся независимых комбинаций генерируют представление группы $SU(3)$ унитарных преобразований в пространстве N . Мультиплеты с различными N являются различными неприводимыми представлениями группы $SU(3)$, основанной на симметрии трех основных объектов, квантов вдоль различных осей. В случае углового момента соответствующая группа $SU(2)$ порождена двумя элементарными объектами, спинами направленными вверх или вниз.

Задача 2.12

Выразите компоненты орбитального момента $\hat{\ell}$ в терминах генераторов \hat{T}_{ik} .

Решение Члены рождения и уничтожения пар квантов взаимно сокращаются, и в результате, в соответствии с классификацией (16.125), выражаются через антисимметричную часть тензора \hat{T}_{ik} ,

$$\hat{\ell}_i = -\frac{i}{2}\varepsilon_{ijk}(\hat{T}_{jk} - \hat{T}_{kj}) = -i\varepsilon_{ijk}\hat{T}_{jk}. \quad (2.152)$$

В декартовых состояниях (2.142) три диагональные оператора, $\hat{N}_i = \hat{T}_{ii}$ (без суммирования по i) одновременно диагонализуются, и это максимальное количество операторов, которые могут иметь определенные значения одновременно; это соответствует трем квантовым числам маркирующим состояния. Конечно, проблема с потенциалом (2.144) может быть также решена путем разделения переменных в сферических координатах. Это дает тот же энергетический спектр, но с другой комбинацией вырожденных собственных функций, обозначенных теперь квантовыми числами N, l и m .

Задача 2.13

Выведите энергетический спектр изотропного гармонического осциллятора (2.144), решая радиальное уравнение Шредингера. Установите границы изменения орбитального момента ℓ внутри данной N -оболочки. Покажите, что степень вырождения такая же, как в Декартовом базисе.

Решение С помощью переменных, введенных в (11.6) и (11.7), мы будем искать решение радиального уравнения в виде

$$u = \xi^{\ell+1} e^{-\xi^2/2} v_\ell(\xi). \quad (2.153)$$

При $\eta = \xi^2$ мы приходим к уравнению для вырожденной гипергеометрической функции,

$$\eta \frac{d^2 v}{d\eta^2} + \left[\left(\ell + \frac{3}{2} \right) - \eta \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{2} - \ell - \frac{3}{2} \right) v = 0. \quad (2.154)$$

Спадающие асимптотитки определяют собственные значения v как полиномы от η при условии, что

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{2} - \ell - \frac{3}{2} \right) = n = 0, 1, \dots \quad (2.155)$$

Энергетический спектр находится как

$$E = \hbar\omega \frac{\varepsilon}{2} = \hbar\omega \left(2n + \ell + \frac{3}{2} \right). \quad (2.156)$$

Получим соответствие между квантовыми числами в разных наборах собственных функций,

$$N = 2n + \ell. \quad (2.157)$$

Отсюда следует, что в каждой оболочке все состояния имеют одинаковую четность $(-)^{\ell}$, а квантовое число ℓ принимает значения $N, N-2, \dots, 0$ или 1 в зависимости от четности N . Подсчитывая вырождения мы находим, как и в (2.148),

$$g(N) = \sum_{\ell=0}^N (2\ell+1) \frac{1 + (-)^{\ell+N}}{2} = \frac{1}{2}(N+1)(N+2). \quad (2.158)$$

Точное соотношение между декартовым и сферическим решением довольно громоздко, донако рассчитать минимальные значения квантовых чисел достаточно легко. Вакуумное состояние, $N = 0$, не имеет вырождения, $n_x = n_y = n_z = 0$, и $\ell = n = 0$. Эта 1s-функция равна $\exp(-\xi^2/2)$ в обеих системах координат. При $N = 1$ у нас есть три декартовых состояния,

$$n_x = 1, n_y = 0, n_z = 0, \quad \psi \sim x e^{-\xi^2/2};$$

$$n_x = 0, n_y = 1, n_z = 0, \quad \psi \sim y e^{-\xi^2/2};$$

$$n_x = 0, n_y = 0, n_z = 1, \quad \psi \sim z e^{-\xi^2/2}.$$

Они образуют три компоненты вектора $\mathbf{r} e^{-\xi^2/2}$ и соответствуют угловой зависимости Y_{1m} сочетаясь стандартным образом (16.100).

Задача 2.14

Установите точное соответствие между двумя множествами решений, в декартовых и в сферических координатах, для $N = 2$ и $N = 3$.

Задача 2.15

Используя решение задачи 17.2, получите рекурсивные соотношения между средними значениями различных степеней r , с применением теоремы вириала и вычислите $\langle r^2 \rangle_{N\ell}$ и $\langle r^4 \rangle_{N\ell}$ для стационарного состояния

изотропного гармонического осциллятора с главным квантовым числом N и орбитальным моментом ℓ .

Решение Применяя уравнения движения для оператора $\hat{O} = \hat{r}^{q+1}$, получаем вместо (2.35)

$$\frac{d\hat{r}^{q+1}}{dt} = \frac{q+1}{m}\hat{p}_r\hat{r}^q + i\hbar\frac{q(q+1)}{2m}\hat{r}^{q-1}. \quad (2.159)$$

Теперь, используя $\hat{O} = \hat{p}_r\hat{r}^{q+1}$, получим

$$\frac{d}{dt}(\hat{p}_r\hat{r}^{q+1}) = \frac{d\hat{p}_r}{dt}\hat{r}^{q+1} + \frac{q+1}{m}\hat{p}_r^2\hat{r}^q + i\hbar\frac{q(q+1)}{2m}\hat{p}_r\hat{r}^{q-1}. \quad (2.160)$$

Однако среднее значение слева равно нулю, так что

$$\left\langle \frac{d\hat{p}_r}{dt}\hat{r}^{q+1} + \frac{q+1}{m}\hat{p}_r^2\hat{r}^q + i\hbar\frac{q(q+1)}{2m}\hat{p}_r\hat{r}^{q-1} \right\rangle = 0. \quad (2.161)$$

В первом слагаемом мы используем уравнение движения (2.32); во втором слагаемом выражаем \hat{p}_r^2 через Гамильтониан (2.24) и подставляя среднее значение \hat{H} через энергию E и $\hat{\ell}^2$ с помощью собственных значений $\ell(\ell+1)$; в третьем слагаемом используем (2.160). Уничтожая \hat{p}_r^2 и $d\hat{p}_r/dt$ с помощью Гамильтониана и уравнения движения для \hat{p}_r , получаем рекуррентное соотношение,

$$2E(q+1)\langle r^q \rangle - m\omega^2(q+2)\langle r^{q+2} \rangle + \frac{q\hbar^2}{2m} \left[\frac{q^2-1}{4} - \ell(\ell+1) \right] = 0, \quad (2.162)$$

который включает только четные или только нечетные, а не последовательные, степени r (уравнение осциллятора инвариантна относительно формального преобразования $r \rightarrow -r$). При $q = 0$ получаем

$$\langle r^2 \rangle_{N\ell} = \frac{E_{N\ell}}{m\omega^2} = \frac{\hbar}{m\omega} \left(N + \frac{3}{2} \right), \quad (2.163)$$

в соответствии с теоремой вириала $\langle U \rangle = \langle K \rangle = E/2$ для всех стационарных состояний. Случай $q = 2$ определяет

$$\langle r^4 \rangle_{N\ell} = \frac{\hbar^2}{2m^2\omega^2} \left[3 \left(N + \frac{3}{2} \right)^2 + \frac{3}{4} - \ell(\ell+1) \right]. \quad (2.164)$$

Понять атом водорода значит понять всю физику.

Приписывается В. Вайскопфу, из книги Д.С. Ридгена *Водород: Существенный элемент*

Глава 3

Атом водорода

3.1 Связанные состояния

Движение в кулоновском поле представляет пример нетривиальной задачи, которая позволяет получить точное аналитическое решение. Излишне подчеркивать практическую важность этой проблемы.

Стационарные состояния, после отделения переменной центра масс, описываются уравнением Шредингера для волновой функции относительного движения двух разноименных зарядов,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad U(r) = -\frac{g}{r}. \quad (3.1)$$

Здесь m -приведенная масса двух частиц, а g является произведением их зарядов, $g = Ze^2$ для водородоподобной системы, состоящей из электрона с зарядом $-e$ и ядра с зарядом Ze . Менее обычные системы такого рода это, например, *позитроний* (связанное электрон-позитронное состояние, $m = m_e/2$, $g = e^2$), *мезоатомы* (связанные состояния отрицательно заряженных пионов, каонов или мюонов с ядром) и связанное состояние антипротона с ядром, та же физика описывает *экситоны*, электростатически связанные состояния электрона и положительно заряженной дырки в полупроводниках.

Уравнение (3.1) относящееся к классу задач с центральной симметрией, обсуждается в разделах 16 и 17 и может быть решено с помощью стандартного разделения переменных в сферической системе координат. Энергетический спектр парциальных волн с орбитальным моментом ℓ определяется радиальным уравнением ($\psi = (u/r)Y_{\ell m}$)

$$u'' + \left[k^2 + \frac{2mg}{\hbar^2} \frac{1}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.2)$$

Для связанных состояний $E = -\varepsilon < 0$, и на больших расстояниях волновая функция экспоненциально спадает,

$$u(r) \propto e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}. \quad (3.3)$$

С безразмерными переменными $\rho = \kappa r$, уравнение (3.2) становится

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \left[1 + \frac{U(\rho/\kappa)}{\varepsilon} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] u = 0. \quad (3.4)$$

Теперь мы будем действовать аналогично одномерным задачам, см. раздел 11. Поскольку мы знаем асимптотическое поведение связанного состояния волновых функций вблизи начала координат и на больших расстояниях, мы выделяем оставшиеся интерполяционные функции $v(\rho)$ ища решение в виде

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\rho} v(\rho). \quad (3.5)$$

Новая функция $v(\rho)$ должна быть регулярной возле особых точек. Она удовлетворяет (теперь штрих это производная по ρ)

$$v'' + 2 \left(\frac{\ell+1}{\rho} - 1 \right) v' - \left[\frac{U(\rho/\kappa)}{\varepsilon} + \frac{2(\ell+1)}{\rho} \right] v = 0. \quad (3.6)$$

Позвольте ввести вспомогательный параметр

$$\xi = -\frac{\rho U(\rho/\kappa)}{\varepsilon} = \frac{g\kappa}{\varepsilon} = \frac{g}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\varepsilon}}. \quad (3.7)$$

Это преобразует уравнение (3.6) к виду

$$\rho v'' + 2(\ell+1-\rho)v' + [\xi - 2(\ell+1)]v = 0. \quad (3.8)$$

Мы пришли к уравнению для вырожденной гипергеометрической функции уже обсуждавшейся в (11.31). Энергетический спектр определяется с помощью обычной процедуры. Решение должно быть выражено в виде ряда

$$v(\rho) = \sum_{k=0} c_k \rho^k, \quad (3.9)$$

где коэффициенты c_k подчиняются двучленному рекуррентному соотношению

$$c_{k+1} = \frac{2(k+\ell+1) - \xi}{(k+1)(k+2\ell+2)} c_k. \quad (3.10)$$

Если бы ряд (3.9) была бы бесконечным, то дальние члены ряда удовлетворяли бы $c_{k+1}/c_k \approx 2/k$, что эквивалентно асимптотическому поведению $\exp(2\rho)$ и, отсюда, расхождение волновых функций (3.5), $u(\rho) \sim \rho^{\ell+1} \exp(\rho)$. Волновая функция связанного состояния, поэтому должна иметь полиномиальное обрезание начиная с некоторой степени N , т.е. $c_N \neq 0$, в то время как $c_{N+1} = 0$. Для полиномиального решения степени N , уравнение (3.10) требует

$$\xi = 2(N + \ell + 1), \quad (3.11)$$

когда

$$c_{k+1} = \frac{2(k - N)}{(k + 1)(k + 2\ell + 2)} c_k, \quad (3.12)$$

и волновые функции являются *полиномами Лагерра*.

Называя N *радиальным квантовым числом*, определим *главное квантовое число* как

$$n = N + \ell + 1 = \frac{\xi}{2}, \quad (3.13)$$

и уравнение (3.7) определит энергетический спектра связанного состояния

$$E_n = -\varepsilon_n = -\frac{2mg^2}{\hbar^2 \xi_n^2} = -\frac{mg^2}{2\hbar^2 n^2}. \quad (3.14)$$

Для водородоподобного атома этот точный результат совпадает со старой формулой Бальмера (1.26).

Задача 3.1

Покажите, что полуклассическое квантование в соответствии с *Задачей 17.4* дает в кулоновском поле точный результат (3.14).

С точки зрения соответствующего Боровского радиуса, $a = \hbar^2/mc^2$, энергии связи водородоподобного атома равна

$$\varepsilon_n = \frac{Z^2}{n^2} \varepsilon_1(H) = \frac{Z^2}{n^2} \frac{e^2}{2a}, \quad (3.15)$$

и глубина проникновения для уровня n^{th} равна

$$\frac{1}{\kappa_n} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_n}} = \frac{a}{Z} n. \quad (3.16)$$

3.2 Основное состояние

Стационарные волновые функции,

$$\psi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \frac{u_{n\ell}(r)}{r}, \quad (3.17)$$

помечены главным квантовым числом n и вращательными квантовыми числами $\ell, \ell_z = m$. Так как степень полинома $N \geq 0$, главное квантовое число

$$n \geq \ell + 1. \quad (3.18)$$

Собственные значения энергии (3.14) зависят только от n . Для заданных n , все состояния $|n\ell m\rangle$, где $\ell = 0, \dots, n-1$ и $m = -\ell, \dots, +\ell$ вырождены. Вырождение ведет к *оболочечной структуре* дискретного спектра.

Основное состояние это состояние с $n = 1$ (*K-оболочка*). Здесь $N = 0$, а единственно возможное значение орбитального момента равно $\ell = 0$. В спектроскопических нотации, *K-оболочка* это *1s* состояние, где перед символом орбитального момента мы ставим главное квантовое число. Угловые квантовые числа основного состояния - $\ell m = 00$, и волновая функция, уравнение (3.5), дается выражением

$$\psi_{100} \sim \frac{\rho^{\ell+1}}{\rho} e^{-\rho} v_{N=0}(\rho) \sim e^{-\rho} \sim e^{-Zr/a}, \quad (3.19)$$

так как $v_0(\rho) = c_0 = \text{const}$, $\kappa_1 = Z/a$. При полной нормировке, волновая функция основного состояния (3.19) равна

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \psi_{100}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}} e^{-Zr/a}. \quad (3.20)$$

Вероятность достичь начала координат для частицы в этом состоянии конечна

$$|\psi_{100}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a^3}. \quad (3.21)$$

Для более высоких ℓ эта вероятность стремится к нулю как определенная степень r , в то время как для $n > 1$ и $\ell = 0$ вероятность $|\psi_{n00}(0)|^2$ меньше, чем (3.21) на величину n^3 как видно из (3.16).

| Задача 3.2

Для электрона в основном состоянии атома водорода найти вероятность быть в пределах классически запрещенной области.

Решение Классическая точка поворота $r = R$ определена выражением $-\varepsilon = -e^2/R$; для атома водорода оно дает $R = 2a$. Вероятность быть в классически запрещенной области равна

$$P = \int_{r>R} d^3r |\psi|^2 = 4\pi \int_R^\infty dr r^2 \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}. \quad (3.22)$$

Интегрирование дает

$$P = 2 \left[\left(\frac{R}{a} \right)^2 + \frac{R}{a} + \frac{1}{2} \right] e^{-2R/a}. \quad (3.23)$$

Как это должно быть, $P \rightarrow 1$ при $R \rightarrow 0$ (нормировочный интеграл). Для $R = 2a$, уравнение (3.23) дает $P = 13 \exp(-4) = 0.238$.

Задача 3.3

Для электрона в основном состоянии атома водорода найдите распределение вероятности импульса и проверьте соотношение неопределенностей $(\Delta x)(\Delta p_x)$.

Решение Волновая функция в импульсном представлении дана преобразованием Фурье координат волновой функции,

$$\varphi(\mathbf{p}) = \int d^3r \psi(\mathbf{r}) e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}. \quad (3.24)$$

Используя волновую функцию основного состояния $\psi(\mathbf{r})$, перейдем к импульсное распределение вероятностей,

$$W(\mathbf{p}) = \frac{|\varphi(\mathbf{p})|^2}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{8a^3}{\pi^2\hbar^3} \left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} + 1 \right)^{-4}, \quad (3.25)$$

где нормировка такова, что

$$\int d^3p W(\mathbf{p}) = 1. \quad (3.26)$$

Среднее значение \mathbf{p}^2 может быть найдено путем интегрирования

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \int d^3p W(\mathbf{p}) p^2 = \frac{\hbar^2}{a^2}. \quad (3.27)$$

Еще проще воспользоваться вириальной теоремой, которая дает среднее значение кинетической энергии $\langle K \rangle = \varepsilon$, or $\langle \mathbf{p}^2 \rangle = 2m\varepsilon = \hbar^2/a^2$. Подобным образом, мы используем координатную волновую функцию для вычисления среднего значения

$$\langle \mathbf{r}^2 \rangle = \int d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2 r^2 = 3a^2. \quad (3.28)$$

Благодаря сферической симметрии основного состояния, средние значения $\langle \mathbf{r} \rangle$ и $\langle \mathbf{p} \rangle$ взаимно сокращаются, и

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle \mathbf{r}^2 \rangle = a^2, \quad (3.29)$$

$$\langle p_x^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle \mathbf{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{3a^2}. \quad (3.30)$$

Произведение неопределенностей равно

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \left[\langle x^2 \rangle \langle p_x^2 \rangle \right]^{1/2} = a \frac{\hbar}{a\sqrt{3}} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} \quad (3.31)$$

в сравнении с нижней границей Гауссиана $\hbar/2$.

Так как радиусы орбит, уравнение (3.16), пропорциональны $1/m$, мюон (масса $\mu = 106 \text{ МэВ}$) в мезоатоме имеет самую низкую орбиту на величину $\mu/m_e \approx 200$ ближе к ядру, чем для электрона. Хотя ядро в атоме водорода или водородоподобном ионе может рассматриваться как точечный положительный заряд, в мезоатомах, особенно тяжелых, с большими Z , размер самой низкой боровской орбиты становится сравнимым с размером ядра. Поэтому наши результаты для точечного ядра становятся неверными, и необходимо принимать во внимание реалистичное распределение заряда внутри ядра. Обычно, наоборот, отклонения спектров мезоатомов от рассчитанных исходя из предположения точечного ядра служить источником информации о распределении заряда в ядре.

3.3 Дискретный спектр

Первое возбужденное состояние водородоподобной системы, $n = 2$, допускает $\ell = 0$ ($2s$ состояние с $N = 1$, $\ell = m = 0$) и $\ell = 1$ (три $2p$ состояния с $\ell = 1$, $m = 0, \pm 1$ и $N = 0$). Все четыре состояния вырождены по энергии и формируют L -оболочки. Радиальное квантовое число N показывает число радиальных узлов функции $u(r)$ при $r \neq 0$. Удобно использовать

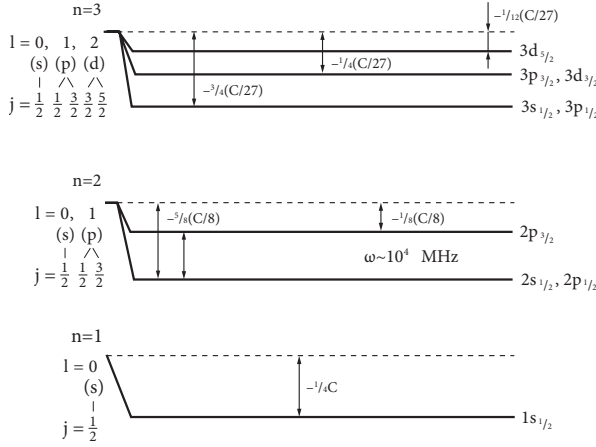


Рис. 3.1. Более детальная картина энергетического спектра водородоподобной системы; сравните с рис. 1.7. Тонкая структура будет объяснена в разделе 23.3.

радиальные координаты в единицах Боровского радиуса, $\zeta = r/a$; тогда $\rho = \kappa r = \zeta/n$. Радиальными собственными функциями,

$$R_{n\ell}(\zeta) \propto \zeta^\ell e^{-\zeta/n} v(\zeta), \quad (3.32)$$

отнормированными в соответствии с

$$\int_0^\infty d\zeta \zeta^2 R^2(\zeta) = 1, \quad (3.33)$$

являются: $1s(n=1, \ell=0, N=1)$:

$$R_{10}(\zeta) = 2e^{-\zeta}; \quad (3.34)$$

$2s(n=2, \ell=0, N=1)$:

$$R_{20}(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\zeta}{2}\right) e^{-\zeta/2}; \quad (3.35)$$

$2p(n=2, \ell=1, N=0)$:

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \zeta e^{-\zeta/2}. \quad (3.36)$$

М-оболочки, $N = 3$, содержит одно $3s$ состояние, $N = 2$, $\ell = m = 0$, три $3p$ состояния, $N = 1$, $\ell = 1$, $m = 0, \pm 1$ и пять $3d$ состояний, $N = 0$, $\ell = 2$, $m = 0, \pm 1, \pm 2$, всего девять вырожденных состояний. Структура спектра показана на рис. 18.1. Легко найти общую формулу для числа вырожденных орбитальных состояний в оболочке с заданным значением n ,

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} 1 = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2. \quad (3.37)$$

Как отмечалось ранее, вырождение по отношению к магнитному квантовому числу следует из инвариантности вращения, в то время как кулоновское поле добавляет определенное *случайное вырождение* по отношению к ℓ (или, что эквивалентно, к N для данных n) — внутри оболочки энергия зависит только от n , но не зависит от ℓ , на классическом языке от эксцентриситета орбиты. Релятивистские эффекты обсуждаемые в гл. 23 устраняют основную часть случайного вырождения, и возникает тонкая структура, рис. 18.1 [масштабная константа $C = \alpha^2 Z^4 \text{ Ry}$, где $\alpha \approx 1/137$ это постоянная тонкой структуры, которая будет введена в (23.43)].

Фактическая степень вырождения атома водорода дается выражением $2n^2$, поскольку электрон обладает спином $1/2$, и мы должны учитывать два возможных значения проекции спина $m_s = \pm 1/2$. В нашем нерелятивистском приближении, энергия не зависит от спинового состояния электрона. Из-за *запрета Паули*, который появится в нашем курсе позже, одиночные электроны в сложном атоме заполняют последовательные оболочки. Это причина особой стабильности электронной структуры инертных газов: доступный число электронов, равных Z в нейтральном атоме, именно то, которое необходимо для полного заполнения числа оболочек (гелий $Z = 2$, неон $Z = 10 = 2 + 2 \cdot 4, \dots$). Похожие эффекты структуры оболочек, но не точного вырожденных, существуют в других системах, такие как *квантовые точки* — искусственные "атомы создаваемые замкнутым движением электронов в полупроводниках [10], или атомных ядер; ядерные аналоги инертных газов называются *магические ядра*. В ядрах и тяжелых атомах, эффекты взаимодействия между частицами, становятся достаточно сильные, и наша одночастичными картинка становится слишком грубой.

Задача 3.4

Объясните качественно, почему в сложных атомах вырождение состояний с различным ℓ одной и той же оболочки (при данном n) исчезает, и орбиты с одними и теми же n , но большими ℓ имеют более низкий энергию связи

(ядра экранировано другими электронами); вырождение по m по-прежнему присутствует.

Конечно, выражения, например «орбита», «оболочка» и т.д., не могут быть приняты в буквальном смысле. Как всегда в квантовой механике, в отличие от оригинальной модели Бора, у нас есть облако вероятности локализации электронов. Облако имеет угловую форму, которая описывается сферической функцией $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ и определенной радиальной зависимостью с максимумами и узлами функции $R_{n\ell}(r)$.

Задача 3.5

Для $\ell = n - 1$, аналога круговой классической орбиты, убедитесь, что максимальная вероятность соответствует Боровским радиусам (1.25).

Решение С помощью (16.136), найдем волновую функцию водорода с квантовыми числами $n, \ell = n - 1, N = 0, m = \ell$ локализованными в экваториальной плоскости,

$$\psi_{n\ell\ell} = \text{const} \left(\frac{r}{a}\right)^\ell e^{-r/(na)} e^{i\ell\varphi} \sin^\ell \theta. \quad (3.38)$$

Максимум радиальной вероятности $r^2|\psi|^2$ соответствует

$$r_{\max}(n) = n^2 a. \quad (3.39)$$

Задача 3.6

Для атома водорода в основном состоянии найти

- средние значения электростатического потенциала $\langle \varphi(\mathbf{R}) \rangle$ (объяснить асимптотику, $R \rightarrow \infty$, поведения) и электрическое поле $\langle \vec{\mathcal{E}}(\mathbf{R}) \rangle$;
- произведение компонент $\langle \mathcal{E}_i(\mathbf{R}) \mathcal{E}_k(\mathbf{R}) \rangle$ в точке \mathbf{R} вдали от ядра.

Решение

- Средний потенциал определяется плотностью заряда атома, которая включает в себя точечное ядро и электронное облако,

$$\langle \rho(\mathbf{R}) \rangle = e\delta(\mathbf{R}) - e|\psi_{100}(\mathbf{R})|^2 = e\delta(\mathbf{R}) - \frac{e}{\pi a^3} e^{-2R/a}. \quad (3.40)$$

Легко проверить нейтральность атома, $\int d^3R \rho(\mathbf{R}) = 0$. Решение уравнения Пуассона

$$\nabla^2 \langle \varphi(\mathbf{R}) \rangle = -4\pi \langle \rho(\mathbf{R}) \rangle \quad (3.41)$$

может быть легко найдено, поскольку оно сферически симметрично

$$\langle \varphi(R) \rangle = e \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{a} \right) e^{-2R/a}. \quad (3.42)$$

На малых расстояниях $R \ll a$, этот потенциал сводится к потенциалу голого ядра, в то время как на больших расстояниях, $R \gg a$, оно экспоненциально спадает из-за *электронного экранирования*. Среднее электрическое поле определяется градиент среднего потенциала (3.42),

$$\langle \vec{\mathcal{E}}(\mathbf{R}) \rangle = -\nabla \langle \varphi(\mathbf{R}) \rangle = e \left(\frac{2}{a^2} + \frac{2}{aR} + \frac{1}{R^2} \right) e^{-2R/a} \frac{\mathbf{R}}{R}. \quad (3.43)$$

Поле имеет радиальное направление и на больших расстояниях экспоненциально убывает.

- б) . Чтобы вычислить средний квадрат флуктуации электрического поля нам нужны взять *мгновенное поле* $\vec{\mathcal{E}}(\mathbf{R})$ созданное протоном в начале координат и электроном в произвольной точке \mathbf{r} , построить произведение компонент этого поля, и усреднить с вероятностью $|\psi_{100}(\mathbf{r})|^2$ для электрона находится в точке \mathbf{r} . Поле на больших расстояниях R такое же как у *электрического диполя* $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$,

$$\vec{\mathcal{E}}(\mathbf{R}) \approx \frac{3\mathbf{n}'(\mathbf{d} \cdot \mathbf{n}') - \mathbf{d}}{R^3}, \quad (3.44)$$

где $\mathbf{n}' = \mathbf{R}/R$ единичный вектор в направлении наблюдения за полем. Это поле диполя имеет нулевое среднее значение потому, что в сферически-симметричном основном состоянии атома направление \mathbf{d} усредняется. Поэтому средний потенциал и электрическое поле найденные ранее соответствуют сферической симметрии. Тем не менее, билинейная корреляционная функция дипольного поля не обращается в нуль. Из уравнения (3.44) находим

$$\langle \mathcal{E}_i(\mathbf{R}) \mathcal{E}_k(\mathbf{R}) \rangle = \frac{1}{R^6} \int d^3r |\psi_{100}(\mathbf{r})|^2 [3n'_i(\mathbf{d} \cdot \mathbf{n}') - d_i][3n'_k(\mathbf{d} \cdot \mathbf{n}') - d_k]. \quad (3.45)$$

В интеграле по d^3r пишем $d_i = -ern_i$, где мы вводим единичный вектор вдоль радиуса, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Интеграл затем разделяется на радиальную часть, которая содержит $|\psi|^2 r^4$ и может быть легко вычислена, и угловую часть с четырьмя интегралами типа (16.107). Собирая все части, получим

$$\langle \mathcal{E}_i(\mathbf{R}) \mathcal{E}_k(\mathbf{R}) \rangle = \frac{e^2 a^2}{R^6} (\delta_{ik} + 3n'_i n'_k). \quad (3.46)$$

Средний квадрат флуктуации дипольного электрического поля атома,

$$\sqrt{\langle \vec{\mathcal{E}}^2(\mathbf{R}) \rangle} = \frac{\sqrt{6}ea}{R^3}, \quad (3.47)$$

изотропен и убывает с расстоянием от атом медленнее, $\propto R^{-3}$, чем среднее монопольное поле нейтрального атома.

Задача 3.7

С помощью метода, используемого для гармонического осциллятора в разделе 2, получаем рекуррентное соотношение для стационарного состояния в кулоновском потенциале с квантовыми числами n и ℓ :

$$2(q+1)E_{n\ell}\langle r^q \rangle_{n\ell} + Ze^2(2q+1)\langle r^{q-1} \rangle_{n\ell} + \frac{q\hbar^2}{m} \left[\frac{q^2-1}{4} - \ell(\ell+1) \right] \langle r^{q-2} \rangle_{n\ell} = 0. \quad (3.48)$$

Используя в (3.48) подходящие значения параметра q , найти вириальную теорему и вычислить средние значения $\langle 1/r \rangle_{n\ell}$, $\langle r \rangle_{n\ell}$ и $\langle r^2 \rangle_{n\ell}$; выразить результат в атомных единицах связанных с боровским радиусом, $\hbar = m = e = 1$.

Решение Рекуррентные соотношение для $q = 0$ приводит к

$$2E = -Ze^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \langle U \rangle. \quad (3.49)$$

Это ни что иное как теорема вириала

$$\langle K \rangle = E - \langle U \rangle = -E. \quad (3.50)$$

Используя радиус Бора и энергетический спектр водорода, как атомные единицы,

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 1 \text{ а.е. }, \quad E_n = -\frac{m^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2}{2n^2} \text{ а.е. }, \quad (3.51)$$

получим (в атомных единицах)

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n\ell} = \frac{Z}{n^2}. \quad (3.52)$$

При $q = 1$ то же самое соотношение ведет к

$$4E\langle r \rangle + 3Ze^2 - \frac{\hbar^2}{m}\ell(\ell+1)\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = 0, \quad (3.53)$$

которое эквивалентно [сравнить с (3.39)]

$$\langle r \rangle_{n\ell} = \frac{1}{2Z} [3n^2 - \ell(\ell+1)]. \quad (3.54)$$

В конечном итоге, для $q = 2$, тем же самым способом получим

$$6E\langle r^2 \rangle + 5Ze^2\langle r \rangle + \frac{2\hbar^2}{m} \left[\frac{3}{4} - \ell(\ell+1) \right] = 0, \quad (3.55)$$

или

$$\langle r^2 \rangle_{n\ell} = \frac{n^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)]. \quad (3.56)$$

Такие же результаты могут быть получены путем прямого интегрирования с точными волновыми функциями, но алгебраический способ более простой и элегантный.

Задача 3.8

Обобщая правила сумм, раздел 7.9, вычислите

$$S_n^{(k)} = \sum_j (E_j - E_n)^k |\langle \mathbf{r} \rangle_{jn}|^2, \quad (3.57)$$

где $k = 2$ и 3 , для связанного $|n00\rangle$ электрона в водородоподобном атоме.

Решение Используя операторные уравнения движения (7.89), получаем

$$S_n^{(2)} = - \sum_j [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}]_{jn} \cdot [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}]_{nj} = \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j (\mathbf{p}_{jn} \cdot \mathbf{p}_{nj}) = \frac{\hbar^2}{m^2} (\mathbf{p}^2)_{nn}. \quad (3.58)$$

Теорема вириала (3.50) дает

$$S_n^{(2)} = \frac{2\hbar^2}{m} K_{nn} = \frac{2\hbar^2}{m} |E_n| = \frac{2\hbar^2}{m} \frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} = \frac{(Ze^2)^2}{n^2}. \quad (3.59)$$

В отличие от правил сумм ТРК (7.138), этот результат зависит от состояния $|n\rangle$. Аналогичным образом,

$$S_n^{(3)} = \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j (E_j - E_n) (\mathbf{p}_{jn} \cdot \mathbf{p}_{nj}). \quad (3.60)$$

Разность энергий может быть интерпретирована как следующий коммутатор с одним или другим оператором импульса. Взяв симметрично их полусумму и используя (7.90) находим

$$S_n^{(3)} = i \frac{\hbar^3}{2m^2} [\hat{\mathbf{p}}, \nabla U]_{nn} = \frac{\hbar^4}{2m^2} (\nabla^2 U)_{nn}. \quad (3.61)$$

Это верно для любого потенциала $U(\mathbf{r})$. Для водородоподобного атома,

$$\nabla^2 U = 4\pi Ze^2 \delta(\mathbf{r}), \quad (3.62)$$

и уравнение (3.61) становится

$$S_n^{(3)} = \frac{2\pi Ze^2 \hbar^4}{m^2} |\psi_{n00}(0)|^2 = \frac{2\pi Ze^2 \hbar^4}{m^2} \frac{Z^3}{\pi a^3 n^3} = \frac{2(Ze^2)^4 m}{\hbar^2 n^3}. \quad (3.63)$$

Можно использовать эти два правила сумм для оценки энергии E_{dip} возбужденных промежуточных состояний соответствующих максимуму дипольной силы. Для основного состояния, $n = 1$,

$$E_{\text{dip}} \approx \frac{S^{(3)}}{S^{(2)}} = \frac{2(Ze^2)^2 m}{\hbar^2} = 4|E_{n=1}|. \quad (3.64)$$

Это означает, что эти возбужденные состояния главным образом принадлежат к континууму.

Тот факт, что вероятность для s -волны имеет ненулевое значение в начале координат, уравнение (3.21), имеет важное значение для многих физических процессов. Так, например, структура ядра может сделать процесс *захвата электрона* ядром энергетически разрешенным. Реакция $p + e^- \rightarrow n + \nu_e$ происходит с превращением протона в нейтрон и излучением электронного нейтрино. Этот процесс индуцируется *слабым взаимодействием*; в результате ядро с избытком протонов преобразуется в другое, энергетически более выгодное ядро, а высвобождающаяся энергия уносится нейтрино. Процесс происходит благодаря обмену W - и Z -бозонами. Из-за их большой массы, ~ 100 ГэВ, диапазон этого взаимодействия очень мал, $\sim 10^{-16}$ см, вспомним оценки из раздела 5.10. Поэтому процесс может иметь заметную вероятность, только если у электрона есть шанс попасть внутрь ядра. Это происходит только для s -электронов; в зависимости от главного квантового числа, это может быть K -захват, L -захват и так далее. Атомные s -оболочки играют также преобладающую роль в других процессах, такие как *внутренняя конверсия*, когда возбужденное ядро энергию возбуждения

без реального излучения фотонов непосредственно одному из атомных s -электронов, который покидает атом.

Задача 3.9

Электрон находится в основном состоянии атом трития. Ядро трития ${}^3\text{H}$ (один протон + два нейтрона) внезапно претерпевает бета-распад,

$${}^3\text{H} \rightarrow {}^3\text{He} + e^- + \bar{\nu}_e, \quad (3.65)$$

превращаясь в ядро лёгкого изотопа гелия ${}^3\text{He}$ (два протона и один нейтрон); новый электрон и антинейтрино образовавшиеся при бета-распаде уносят электрический заряд и энергию. Найти вероятность для первоначального атомного электрона остаться в основном состоянии атома гелия.

Решение После того, как внезапное изменение потенциала, начальная волновая функция не является больше стационарной собственной функцией нового потенциала. Она содержит амплитуды новых собственных функций различных возбужденных (в том числе ионизированных) состояний. Амплитуда оставшаяся в основном состоянии

$$\begin{aligned} A_{g.s.} &= \int d^3r \psi_{\text{new}}^{(g.s.)*} \psi_{\text{old}}^{(g.s.)} = \int_0^\infty dr 4\pi r^2 \sqrt{\frac{2^3}{\pi a^3}} e^{-2r/a} \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}} e^{-r/a} \\ &= \frac{4\sqrt{8}}{a^3} \int_0^\infty dr r^2 e^{-3r/a} = \frac{16\sqrt{2}}{27}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Соответствующая вероятность $A_{g.s.}^2 = (8/9)^3 \approx 70\%$.

Общее выражение для радиальных водородоподобных волновых функций (3.5) связанных состояний в притягивающем потенциале Ze^2/r дается

$$u_{n\ell}(r) = C_{n\ell} \left(\frac{2Z}{na} r \right)^{\ell+1} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)} \left(\frac{2Z}{na} r \right) e^{-r(Z/na)}, \quad (3.67)$$

где полиномы Лагерра вводятся стандартным образом

$$L_n^\alpha(x) = e^x \frac{x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}). \quad (3.68)$$

При обычном выборе фазы, нормировочная константа в (3.67) равна

$$C_{n\ell} = (-)^{n-\ell-1} \frac{1}{n} \sqrt{\frac{Z}{a} \frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!}}. \quad (3.69)$$

Иногда полиномы (3.68) называются *обобщенные* в то время как термин *полиномы Лагерра* зарезервирован для особого случая $\alpha = 0$. Низшие полиномы записываются как

$$L_0^\alpha(x) = 1, \quad L_1^\alpha(x) = 1 + \alpha - x, \quad L_2^\alpha(x) = \frac{1}{2}[(1 + \alpha)(2 + \alpha) - 2(2 + \alpha)x + x^2]. \quad (3.70)$$

Задача 3.10

Докажите алгебраические свойства полиномов Лагерра (3.68): явный вид полинома

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{\Gamma(k + \alpha + 1)} \frac{(-x)^k}{k!(n - k)!}; \quad (3.71)$$

относится к Эрмитовым полиномам,

$$\mathcal{H}_{2n}(x) = (-)^n 2^{2n} n! L_n^{-1/2}(x^2), \quad \mathcal{H}_{2n+1}(x) = (-)^n 2^{2n+1} n! x L_n^{1/2}(x^2); \quad (3.72)$$

генерирующая функция,

$$F(x, t) = (1 - t)^{-(\alpha+1)} e^{-xt/(1-t)} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(x) t^n, \quad (3.73)$$

удовлетворяющая дифференциальным уравнениям

$$(1 - t)^2 \frac{\partial F}{\partial t} + [x - (1 - t)(1 + \alpha)] F = 0, \quad (3.74)$$

$$(1 - t) \frac{\partial F}{\partial x} + t F = 0, \quad (3.75)$$

и

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x} \right)_\alpha = -t F(x, t)_{\alpha=1} \quad (3.76)$$

(разложения (3.73)) сходится при $|t| < 1$); рекуррентные соотношения с фиксированной α ,

$$(n + 1) L_{n+1}^\alpha(x) + (x - \alpha - 2n - 1) L_n^\alpha(x) + (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(x) = 0, \quad (3.77)$$

$$x \frac{dL_n^\alpha(x)}{dx} = n L_n^\alpha(x) - (n + \alpha) L_{n-1}^\alpha(x); \quad (3.78)$$

рекуррентные соотношения для разных n ,

$$L_n^\alpha(x) = L_n^{\alpha+1}(x) - L_{n-1}^{\alpha+1}(x), \quad (3.79)$$

и

$$\frac{dL_n^\alpha(x)}{dx} = -L_{n-1}^{\alpha+1}(x). \quad (3.80)$$

3.4 Операторное решение

Как уже кратко обсуждалось в разделе 7.10, «случайное» вырождение можно отнести к скрытой симметрии. Эта симметрия приводит к появлению дополнительной констант в кулоновском поле, *вектора Рунге–Ленца*,

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r} - \frac{\hbar}{2mg} \left([\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\vec{\ell}}] - [\hat{\vec{\ell}} \times \hat{\mathbf{p}}] \right). \quad (3.81)$$

Этот вектор, лежащий в плоскости классической орбиты Кеплеровской задачи,

$$(\hat{\vec{\ell}} \cdot \hat{\mathbf{A}}) = (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\vec{\ell}}) = 0, \quad (3.82)$$

глядя из точки фокуса в перигелий. [Постоянная Планка появилась в определении (3.81) из-за нашего условия по измерению угловых моментов в единицах \hbar ; классически $\hbar \hat{\vec{\ell}} = \vec{\ell}^{(cl)}$ и двумя векторных произведения в (3.81) равны.

В классической механике этот закон сохранения проявляется в *замкнутой* петле периодической планетарной траектории так как наличие постоянного вектора \mathbf{A} фиксирует ориентацию орбиты в плоскости, перпендикулярной другому сохраняющемуся вектору, $\vec{\ell}$. Отклонения от точного гравитационного (или кулоновского) потенциала $\sim 1/r$ приводит [7] к искажению орбиты, когда радиальные и угловые частоты слегка рассогласуются и траектория становится розеткообразной вместо эллиптической (сдвиг перигелия в общей теории относительности). В квантовой механике вектор $\hat{\mathbf{A}}$ не коммутирует с угловым моментом. Как и для любого вектора,

$$[\hat{\ell}_i, \hat{A}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{A}_k. \quad (3.83)$$

Поэтому невозможно найти состояние, в котором оба вектора, имеют определенные значения.

Как мы знаем из нашего обсуждения измеримости, раздел 6.13, собственные состояния гамильтониана в таких случаях должны быть вырожденными — тогда можно построить два множества вырожденных собственных функций для того, чтобы диагонализировать одну из этих констант движения одновременно с гамильтонианом. Мы будем добавлять новые комментарии на эту тему, когда мы будем обсуждать *эффекта Старка*, глава 24. Теперь мы в состоянии найти энергетический спектр атома водорода чисто алгебраическим способом.

Задача 3.11

Докажите операторные соотношения:

а) связь между $\hat{\mathbf{A}}^2$ и Гамильтонианом \hat{H} ,

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = 1 + \frac{2\hbar^2}{mg^2} \hat{H}(1 + \hat{\ell}^2); \quad (3.84)$$

классический предел этой величины квадрат эксцентриситета орбиты [7],

$$e = \sqrt{1 + \frac{2E(\ell^{(cl)})^2}{mg^2}}; \quad (3.85)$$

б) коммутаторы компонент \hat{A}_i ,

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -i \frac{2\hbar^2}{mg^2} \varepsilon_{ijk} \hat{H} \hat{\ell}_k. \quad (3.86)$$

Рассмотрим вырожденный набор связанных кулоновских состояний с отрицательной энергией, $\hat{H} \rightarrow E = -\varepsilon$. Оба вектора, $\hat{\ell}$ и $\hat{\mathbf{A}}$, действуют только внутри этого семейства состояний. Если мы перенормируем вектор Рунге-Ленца в виде

$$\hat{\mathbf{A}} = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{mg^2}} \hbar \hat{\mathbf{a}}, \quad (3.87)$$

мы получим из (3.84)

$$\hat{\mathbf{a}}^2 + \hat{\ell}^2 + 1 = \frac{mg^2}{2\hbar^2\varepsilon}, \quad (3.88)$$

в то время как коммутатор (3.86) теперь принимает вид, аналогичный коммутатору компонент углового момента,

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{\ell}_k \quad (3.89)$$

(коммутатор (3.83) не изменяется). Два новых моментоподобных оператора,

$$\hat{\mathbf{J}}^{(\pm)} = \frac{1}{2}(\hat{\ell} \pm \hat{\mathbf{a}}), \quad (3.90)$$

разложение связанных коммутационных соотношений между $\hat{\mathbf{a}}$ и $\hat{\ell}$ на две отдельные группы,

$$[\hat{J}_i^{(\pm)}, \hat{J}_j^{(\pm)}] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k^{(\pm)}, \quad [\hat{J}_i^{(\pm)}, \hat{J}_j^{(\mp)}] = 0. \quad (3.91)$$

Операторная алгебра задачи теперь сводится к тому, что из двух $SU(2)$ алгебр для сохраняющихся векторов угловых моментов $\hat{\mathbf{J}}^{(\pm)}$. Мы ожидаем, что собственные состояния помечены четырьмя квантовыми числами (целыми или полуцелыми), две величины $J^{(\pm)}$ и две проекции $J_z^{(\pm)}$. Однако из-за ортогональности (3.82), их величины должны быть равны,

$$(\hat{\mathbf{J}}^{(\pm)})^2 = \frac{1}{4}(\hat{\ell} \pm \hat{\mathbf{a}})^2 = \frac{1}{4}(\hat{\ell}^2 + \hat{\mathbf{a}}^2) \equiv \hat{\mathbf{J}}^2 \Rightarrow J(J+1). \quad (3.92)$$

Откуда, каждое стационарное состояние характеризуется тремя дискретными квантовыми числами, $J^{(+)} = J^{(-)} = J$, $J_z^{(+)}$ и $J_z^{(-)}$, и энергия вырожденного набора состояний дается, см. (3.88) и (3.92), формулой Бальмера,

$$E_J = -\varepsilon_J = \frac{mg^2}{2\hbar^2[1 + 4J(J+1)]} = \frac{mg^2}{2\hbar^2n^2}, \quad (3.93)$$

где главное квантовое число проявляется как связь с числом состояниями в J -мультиплете,

$$n = 2J + 1. \quad (3.94)$$

Так как оба, целое и полуцелым значения J разрешены, мы получаем $N = 1, 2, \dots$. Орбитальный момент $\hat{\ell} = \hat{\mathbf{J}}^{(+)} + \hat{\mathbf{J}}^{(-)}$ пробегает в этом наборе состояний все целые значения от 0 до $2J = n - 1$, в соответствии с результатом, полученным из прямых решения дифференциального уравнения. (Сложение угловых моментов будет обсуждаться гораздо более подробно позже, в главе 22). Степень вырождения задаваемая полным количеством комбинаций проекций, $(2J + 1)^2$, совпадает с той, которую дают уравнения (3.37). Интересной особенностью этого операторного подхода является очевидная симметрия между двумя сохраняющимися векторами.

| Задача 3.12

Рассмотрим *двумерную* кеплеровскую задачу,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} - \frac{g}{\hat{r}}, \quad \hat{r} = \sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2}. \quad (3.95)$$

Сконструируйте алгебру углового момента, используя в качестве генераторов сохраняющиеся операторы \hat{A}_x , \hat{A}_y , и \hat{L}_z , найдите связь между $\hat{A}_x^2 + \hat{A}_y^2$ и энергией, и получить двумерную формулу Бальмера (3.93) с главным квантовым числом $n = J + 1/2$, где J должен быть целым числом. Покажите, что вырождение собственных значений энергии равно $2n = 2J + 1$.

3.5 На пути к прецизионной спектроскопии

В нашем рассмотрении атома водорода, или аналитическом или алгебраическом, игнорируются многие физические факторы. Мы получили только грубый скелет спектральной структуры, знание которого необходимо, но далеко не достаточно для объяснения результатов наблюдений. Атомная спектроскопия, по-видимому, наиболее точный раздел экспериментальной физики. Принятое в настоящее время значение постоянной тонкой структуры (1.29), являющееся усреднением результатов наиболее точных экспериментов различного типа, дано в [11]

$$\frac{1}{\alpha} = 137.035\,999\,084(\pm 51), \quad (3.96)$$

где величина ошибки относится к двум последним цифрам. Для такой точностью, атомная теория должна учитывать множество малых эффектов, которые отвечают за крошечные поправки к энергетическим уровням. Поправки становятся еще более важными в тяжелых атомах, где, в добавок, необходимо учитывать взаимодействие между электронами. Ниже мы перечислим некоторые из эффектов, которые будут обсуждаться в последующих главах.

1. *Спин электрона* упоминался только в отношении вырождения атомных оболочек. Кроме того, он играет важную роль в отклик атома на магнитное поле, это один из самых чувствительных датчиков.
2. В нашем рассмотрении мы не касались каких-либо *релятивистских* эффектов. Поправки порядка $(v/c)^2 \sim \alpha^2$ задают так называемую *тонкую структуру* спектра, источник термина α . Они складываются из трех источников: следующие слагаемые после $p^2/2m$ в разложении

в ряд величины кинетической энергии, спин-орбитального взаимодействия, которое, главным образом есть результат взаимодействия магнитного момента спина электрона с магнитным полем возникающим в результате движения электронов, а также определенные делокализации электрона в следствии релятивистского соотношения неопределенности, раздел 5.10.

3. Любые ядра, включая протон, имеют *конечный размер*, и, поэтому, в небольшой области вблизи центра, потенциал отличен от потенциала точечного заряда. Этот эффект особенно виден в разнице спектров для разных изотопов (разные размеры ядер) и в мезоатомах, так как мезоны проникают глубже в объем ядра.
4. Многие ядра, включая протон, имеют ненулевой *магнитный момент*, который взаимодействует с магнитным моментом спина электрона, создавая *сверхтонкую структуру* спектра.
5. Некоторые ядра (исключая протон) могут иметь ненулевые *мультипольные моменты* распределения заряда, начиная с квадрупольного момента; это изменяет сверхтонкую структуру.
6. Квантовая теория поля предсказывает *радиационные поправки* связанные с виртуальным излучением и поглощением фотонов и изменяющие свойства (*поляризацию*) вакуума из-за присутствия заряженных частиц. Эти поправки привести к дополнительному смещению уровней (*сдвиг Лэмба*).

Для того, чтобы количественно оценить влияние таких эффектов необходимо разработать методы оценки малых поправок для волновых функций и собственных значений. Такие методы даются в различных формы *теорией возмущений*, раздел 4.

3.6 Решение в параболических координатах

Состояния с положительной энергией принадлежат к непрерывному спектру. На самом деле они являются *состояниями рассеяния*. Как правило, внешний электронный пучок взаимодействует с протоном и рассеивается после этого под различными углами по отношению к исходному направлению, которое может быть выбрано в качестве оси z . Волновые функции этой задачи можно вычислить точно, аналитически решив уравнение Шредингера.

Удобным способом решения является использование *параболических координат* [12] § 37, хорошо подходящих для геометрии задачи, хотя очевидно нарушающих сферическую симметрию, тем не менее сохраняющих осевую симметрию, так что ℓ_z по-прежнему хорошее квантовое число. Сначала покажем, что дискретный спектр также можно найти методом разделения переменных в параболических координатах.

Когда оси z определена, введем вместо r и z , две новых неотрицательно определенных переменные ξ и η в соответствии с

$$r = \xi + \eta, \quad z = \xi - \eta. \quad (3.97)$$

Вместе с азимутальным углом φ , этот выбор определяет

$$x = 2\sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, \quad y = 2\sqrt{\xi\eta} \sin \varphi. \quad (3.98)$$

Задача 3.13

Выведите уравнение Шредингера в параболических координатах для стационарного состояния с энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ в кулоновском потенциале $U(r) = -Ze^2/r$ и покажите, что переменные разделяются.

Решение После прямого преобразования оператора Лапласа, получим

$$\left\{ \hat{O}_\xi + \hat{O}_\eta + \frac{2Z}{a} \right\} \psi(\xi, \eta, \varphi) = 0, \quad (3.99)$$

где вводятся два идентичных дифференциальных оператора \hat{O}_ξ и \hat{O}_η , действующих соответственно на переменные ξ и η ,

$$\hat{O}_\xi = \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{1}{4\xi} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + k^2 \xi. \quad (3.100)$$

Теперь мы можем искать решение в разделяемой форме

$$\psi(\xi, \eta, \varphi) = \frac{X(\xi)}{\sqrt{\xi}} \frac{Y(\eta)}{\sqrt{\eta}} e^{im\varphi}, \quad (3.101)$$

где $X(\xi)$ и $Y(\eta)$ удовлетворяют идентичны уравнениям,

$$\left\{ \frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{m^2 - 1}{4\xi^2} + \frac{B_\xi}{a\xi} + k^2 \right\} X(\xi) = 0, \quad (3.102)$$

и аналогично для $Y(\eta)$ с заменой $B_\xi \Rightarrow B_\eta$. Эти константы разделения связаны условием

$$B_\xi + B_\eta = 2Z. \quad (3.103)$$

Уравнение (3.102) и его аналог для $Y(\eta)$ имеют тот же вид, как и уравнение (3.2) для радиальной функции $u(r)$ в сферических координатах, где спектр *связанного состояния* дается уравнениями (3.13) и (3.14),

$$k^2 = -\frac{Z}{a^2} \frac{1}{(N + \ell + 1)^2}. \quad (3.104)$$

Чтобы установить четкое соответствие, отметим, что число $\ell(\ell + 1)$ в сферических координатах соответствует $(m^2 - 1)/4$ в наших новых уравнениях, т.е. в решении (3.104) мы должны заменить $\ell = (|m| - 1)/2$. Это приводит к возникновению двух новых целых квантовых чисел, N_ξ и N_η входящих в (3.102) и его Y -аналоге,

$$k^2 = -\frac{B_\xi}{a} \frac{1}{N_\xi + (1/2)(|m| + 1)} = -\frac{B_\eta}{a} \frac{1}{N_\eta + (1/2)(|m| + 1)}. \quad (3.105)$$

Условие (3.103) воспроизводит спектр (3.14) с главным квантовым числом

$$n = N + \ell + 1 = N_\xi + N_\eta + |m| + 1. \quad (3.106)$$

Задача 3.14

Покажите, что общее количество вырожденных связанных состояний помеченных параболическими квантовыми числами совпадает с тем, что мы нашли в (3.37).

Решение Число сочетаний N_ξ и N_η разрешенных формулой (3.106) при заданных n равно n для $m = 0$ и, как следует из (17.148), $n(n - 1)/2$ для каждого $m \neq 0$, которые могут быть положительными и отрицательными. Полная сумма равна n^2 .

Существование альтернативной системы координат, которая позволяет полное разделение переменных связана с кулоновским вырождением. Вместо сферических гармоник с определенным значением орбитального момента, но с той же энергией в пределах данной основной оболочки, в параболических координатах мы берем их комбинации с некоторой выделенной осью. Это непосредственно связано с наличием дополнительных констант движения (3.81).

3.7 Состояния континуума

Общая проблема рассеяние будет обсуждаться позже, но с кулоновским потенциалом у нас есть редкий, точно разрешимый пример. Параболические координаты (3.97) особенно удобны в этом случае, так как мы ожидаем, что в решении присутствуют падающая волна $\sim \exp(ikz)$ и расходящейся сферической волны $\sim \exp(ikr)$, и обе функции содержат множитель $\exp(ik\xi)$. Поэтому, следуя Дж. Швингеру [13], мы можем искать решение уравнения (3.99) для рассеяния электрона ядром с зарядом Ze в виде [ср. (3.101)]

$$\psi(\xi, \eta) = e^{ik\xi} \frac{Y(\eta)}{\sqrt{\eta}}. \quad (3.107)$$

здесь, нет никакой φ -зависимости в силу осевой симметрии падающей волны относительно оси z ; $\ell_z = m = 0$ является константой движения.

Подход (Ref 18,107) приводит к уравнению для функции $Y(\eta)$ (не путать со сферическими функциями $Y_{\ell m}$)

$$\left\{ \frac{d^2}{d\eta^2} + \frac{1}{4\eta^2} + \frac{ik + (2Z/a)}{\eta} + k^2 \right\} Y(\eta) = 0. \quad (3.108)$$

Здесь, энергия $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ положительна.

Задача 3.15

Сравните уравнение (3.108) с радиальным уравнением для дискретный спектр и докажите, что решение формально можно записать в терминах полинома Лагерра $L_{-i\zeta}^{\alpha=0}(x) \equiv L_{-i\zeta}(x)$,

$$Y(\eta) = \sqrt{\eta} L_{-i\zeta}(2ik\eta) e^{-ik\eta}, \quad (3.109)$$

где

$$\zeta = \frac{Z}{ka} = \frac{Ze^2}{\hbar v} \quad (3.110)$$

параметр Зоммерфельда, и $v = \hbar k / m$ скорость на больших дистанциях.

Особое внимание необходимо, чтобы обосновать выбор знака комплексной переменной $-i\zeta$ в индексе полинома Лагерра. Здесь мы имеем полиномиальное аналитическое продолжение комплексного ζ . Для нулевого верхнего индекса $\alpha = 0$, полиномы Лагерра были определены, уравнение (3.68), так

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n (x^n e^{-x}). \quad (3.111)$$

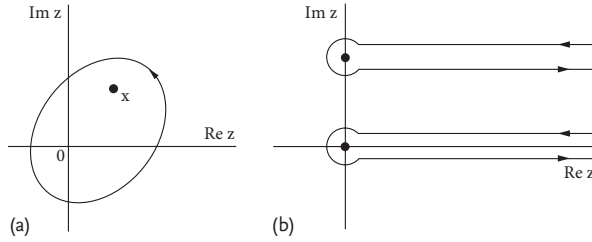


Рис. 3.2. *a.* Контур интегрирования для уравнения (3.112). *b.* Контур интегрирования для аналитического продолжения с комплексным индексом у полинома Лагерра

С помощью теоремы Коши о вычетах, это можно записать в виде интеграл по контуру в комплексной плоскости переменной z вдоль любой петли, включающей точку x ,

$$L_n(x) = e^x \oint \frac{dz}{2\pi i} \frac{e^{-z} z^n}{(z-x)^{n+1}}. \quad (3.112)$$

Теперь x может быть перемещена в любую комплексную точку, при условии, что она находится внутри контура, рис. 18.2*a*. В особенности, в уравнении (3.109) мы должны передвинуть эту точку, на мнимую ось, $x = 2ik\eta$.

Больше внимания необходимо уделить комплексному показателю, $n \Rightarrow -i\zeta$. Мы сохраняем аналитическую форму (3.112), но теперь точка $z = 0$ становится особой точкой и мы должны определить правильную фазу при переходе через точку ветвления. Опять же следуя [13], мы выбираем замкнутый контур, рис. 18.2*b*, от $z = \infty$ до $z = \infty$ в направлении против часовой стрелки содержащий две небольшие окружности вокруг $z = 0$ и $z = 2ik\eta$ и две пары путей параллельных вещественной оси. Интеграл принимает вид

$$L_{-i\zeta}(2ik\eta) = e^{2ik\eta} \oint \frac{dz}{2\pi i} \frac{e^{-z} z^{-i\zeta}}{(z-2ik\eta)^{-i\zeta+1}}. \quad (3.113)$$

В верхней части интеграла имеем $z = 2ik\eta + x$ так, что

$$\left(L_{-i\zeta}(2ik\eta) \right)_{\text{upper}} = \int \frac{dx}{2\pi i} \frac{e^{-x} (2ik\eta + x)^{-i\zeta}}{x^{-i\zeta+1}}. \quad (3.114)$$

Из-за экспоненциального множителя $\exp(-x)$ под интегралом, большие значения $x \gg 1$ не дают вклад в интеграл. Когда мы заинтересованы в

нахождении асимптотики волновой функции, $x \gg 1$, мы можем аппроксимировать

$$(2ik\eta + x)^{-i\zeta} \approx (2ik\eta)^{-i\zeta} = e^{-i\zeta \ln(2ik\eta)} = e^{\pi\zeta/2} e^{-i\zeta \ln(2k\eta)}. \quad (3.115)$$

В оставшемся интеграле (3.114) верхний берег дает

$$\int_0^\infty dx \frac{e^{-x}}{x^{-i\zeta+1}} = - \int_0^\infty dx x^{i\zeta-1} e^{-x} = -\Gamma(i\zeta), \quad (3.116)$$

гамма-функцию мнимого аргумента, который определен для положительной действительной частью ζ . В интеграл по нижней берегу верхнего пути, нам нужно сделать замену $x \rightarrow x \exp(2\pi i)$, которая не изменяется числителя, но умножает знаменатель на $(\exp(2\pi i))^{-i\zeta} = \exp(2\pi\zeta)$. В результате, эта часть интеграла дает $\exp(-2\pi\zeta)\Gamma(i\zeta)$. Наконец, добавив два берега и используя $\Gamma(i\zeta + 1) = i\zeta\Gamma(i\zeta)$, находим

$$\left(L_{-i\zeta}(2ik\eta)\right)_{\text{upper}} = e^{\pi\zeta/2} e^{-i\zeta \ln(2k\eta)} \Gamma(1 + i\zeta) \frac{1 - \exp(-2\pi\zeta)}{2\pi\zeta}. \quad (3.117)$$

Задача 3.16

Рассчитайте вклад нижней часть интеграла (3.113).

Решение В знаменателе интеграл содержит $[\exp(i3\pi/2)2k\eta]^{-i\zeta+1}$, и в результате

$$\left(L_{-i\zeta}(2ik\eta)\right)_{\text{lower}} = e^{-3\pi\zeta/2} e^{i[2k\eta+\zeta \ln(2k\eta)]} \frac{e^{2\pi\zeta-1}}{4\pi k\eta} \Gamma(1 - i\zeta). \quad (3.118)$$

Комбинируя оба вклада, мы находим асимптотику, $k\eta \gg 1$, лаггерровского полинома в форме

$$L_{-i\zeta}(2ik\eta) \approx f(\zeta) \left\{ e^{-i\zeta \ln(2k\eta)} + \frac{\zeta}{2k\eta} e^{i[2k\eta+\zeta \ln(2k\eta)]} \frac{\Gamma(1 - i\zeta)}{\Gamma(1 + i\zeta)} \right\}, \quad (3.119)$$

где

$$f(\zeta) = e^{-3\pi\zeta/2} \frac{e^{2\pi\zeta} - 1}{2\pi\zeta} \Gamma(1 + i\zeta) \quad (3.120)$$

не зависит от координат.

Теперь можно вспомнить о том, что первоначальная волновая функция имеет вид

$$\psi(\xi, \eta) = e^{ik\xi} L_{-i\zeta}(2ik\eta) e^{-ik\eta}. \quad (3.121)$$

Обычные координаты находятся из

$$\xi = \frac{1}{2}(r+z), \quad \eta = \frac{1}{2}(r-z). \quad (3.122)$$

Углом рассеяния θ является угол между падающим волновым вектором (ось z) и направлением в котором наблюдалась рассеянная частица, θ . Тогда

$$z = r \cos \theta, \quad \eta = r \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right). \quad (3.123)$$

В первом слагаемом асимптотического выражения (3.121) мы имеем $\exp[ik(\xi - \eta)] = \exp(ikz)$, т.е. *падающую волну*,

$$\psi_{\text{inc}} = e^{ikz} e^{-i\zeta \ln[2kr \sin^2(\theta/2)]}. \quad (3.124)$$

Второе слагаемое содержит $\exp[ik(\xi + \eta)] = \exp(ikr)$ дает *исходящую сферическую волну*. С помощью (3.123) находим

$$\psi_{\text{scatt}} = \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\zeta}{2k \sin^2(\theta/2)} e^{i\{\zeta \ln[2kr \sin^2(\theta/2)] - 2i \arg[\Gamma(i\zeta+1)]\}}. \quad (3.125)$$

Таким образом, мы видим, что выбор знака в (3.109) правильно отражает граничные условия для физической задачи рассеяния. Рассеянной волны исчезает в пределе $Z \rightarrow 0$, когда $\zeta \rightarrow 0$. Величина

$$q = 2k \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (3.126)$$

имеет простое значение. Это импульс (точнее, волновой вектор) передаваемый в процессе упругого рассеяния, $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$, где $\mathbf{k}' = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}/r)$ - волновой вектор в направлении рассеянной волны. Теперь мы можем вычислить *сечение рассеяния* $d\sigma$ определяемое как отношение интенсивности зарегистрированного удаленным детектором, который охватывает телесный угол do на расстоянии r к интенсивностью падающего потока (более подробно мы обсудим это позже),

$$d\sigma = \frac{|\psi_{\text{scatt}}|^2}{|\psi_{\text{inc}}|^2} r^2 do. \quad (3.127)$$

Наши асимптотические результаты (3.124) и (3.125) определяют

$$\frac{d\sigma}{do} = \left(\frac{\zeta}{2k \sin^2(\theta/2)} \right)^2 = \left(\frac{2Z}{aq^2} \right)^2. \quad (3.128)$$

Это ничто иное, как классическое *резерфордское сечение*,

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \left(\frac{Ze^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (3.129)$$

Хотя в итоге сечение совпадает с классическим результатом, волновые функции падающей и рассеянной волны содержат квантовые фазы зависящие от угла рассеяния. Даже падающая волна (3.124) искажается кулоновским потенциалом, который имеет дальнodelствующий характер. Тем не менее, этот эффект не виден в сечении и может наблюдаться только в виде интерференции с другим взаимодействием, например, ядерным, которые может присутствовать вместе со кулоновским потенциалом.

Глава 4

Стационарное возмущение

4.1 Введение

Практически ни одну из физических систем нельзя изучать без использования подходящего приближенного метода. Искусство физика в большой степени состоит в умении определить относительную значимость различных факторов в данной физической системе и в выборе подходящего приближенного метода. Вообще говоря, для каждой задачи существует свой приближенный метод...

А. Мессиа, *Квантовая механика*, Т. 2, пер. с фр. И.П. Жульина под ред. Р.Д. Фаддеева

Существует очень мало задач квантовой физики, которые имеют точное аналитическое решение. В некоторых случаях можно решить проблему численно. А часто даже это не представляется возможным. Однако практически всегда рассматриваемые физические эффекты не являются равнозначными. Можно выделить наиболее значимые факторы в отличие от менее важных. Если можно решить проблему без учёта менее важных эффектов, то влияние проигнорированных при решении факторов можно учесть как *возмущение*. Этот термин пришёл из небесной механики, где гравитационное влияние планет мало по сравнению с влиянием Солнца.

Обычно (не всегда), добавление поправок, лишь слегка меняет волновые функции дискретного спектра и уровни энергий так, сохраняя качественную картину спектра. Математически это может быть сформулирована как *аналитичность* физических характеристик как функции от дополнительных параметров. В этом случае можно искать поправки к исходным или *невозмущённым* решениям в виде регулярного ряда по степеням новых малых поправок. Однако есть ситуации, когда бесконечно слабое возмущение резко меняет невозмущённую картину. В случае классической механики в таких ситуациях говорят, что первоначальное состояние было неустойчивым. Часто малое изменение начальных условий через некоторое время полностью меняет траекторию движения (*классический хаос* [14]). В квантовой механике принцип неопределённости не позволяет описать начальные состояния в фазовом пространстве сколь угодно точно. Тем не менее, аналогичные хаотические явления существуют и в квантовой механике (глава 48). Особые проблемы возникают в случае вырожденных уровней, когда в отсутствии возмущений любые суперпозиции вырожденных состояний одинаковы, но даже слабое возмущение выбирает

непертурбативным образом, правильное сочетание, как соответствующее направление в подпространстве вырожденных состояний.

Для того чтобы рассмотреть не зависящее от времени (*стационарные*) возмущения в дискретного спектра, мы предполагаем, что гамильтониан может быть разложен на невозмущенную часть и на часть, соответствующую возмущению:

$$\hat{H} = \hat{H}^{\circ} + g\hat{H}', \quad (4.1)$$

где g — это параметр, формально характеризующий величину возмущения. Предположим, что мы знаем стационарные состояния $|n\rangle$ и энергии E_n° для невозмущенной системы ($g = 0$)

$$\hat{H}^{\circ}|n\rangle = E_n^{\circ}|n\rangle. \quad (4.2)$$

Нам нужно найти стационарные состояния $|\Psi\rangle$ и энергии E для полного гамильтониана:

$$(\hat{H}^{\circ} + g\hat{H}')|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (4.3)$$

Предположим, что возмущение \hat{H}' не меняет граничные условия. Тогда функция $|\Psi\rangle$ принадлежит тому же самому гильбертовому пространству и может быть разложено по полному набору невозмущенных функций:

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (4.4)$$

где сумма по n включает в себя интеграл по непрерывному спектру, если он в задаче присутствует. Как и в случае стандартной задачи диагонализации (раздел 6.8 из первого тома), мы можем использовать ортонормировку $\langle n|m\rangle = \delta_{mn}$ (или дельта-функцию Дирака в случае непрерывных квантовых чисел) и свести задачу к бесконечному множеству связанных линейных однородных уравнений для коэффициентами c_n :

$$c_m(E - E_m^{\circ}) = g \sum_n c_n H'_{mn}. \quad (4.5)$$

Здесь $H'_{mn} = \langle m|\hat{H}'|n\rangle$ является матричным элементом возмущения, разложенного по невозмущенному базису (4.2). Формально при нахождении коэффициентов c_m из системы уравнений (4.5) мы сталкиваемся *энергетическим знаменателем*, характерным для этого вида теории возмущений.

Система уравнений (4.5) эквивалентна оригинальному уравнению Шрёдингера и точного решения не имеет, хотя численные методы диагонализации разработаны для матриц достаточно больших размеров. При таком решении с помощью вариационного метода (раздел 10.3 из первого тома) необходимо какое-либо физическое обоснование для урезания гильбертова пространства. В этой главе мы вместо этого ищем простой метод регулярных приближений.

4.2 Теория возмущения без вырождения

Рассмотрим изменение *невыврожденного* невозмущенного состояния $|k\rangle$ под влиянием возмущения. Наиболее практически удобным методом является теория возмущения *Рэлея—Шрёдингера*, где точное состояние $|\Psi\rangle$ и точная энергия E развиваются из $|k\rangle$ и E_k° под действием возмущения.

Без возмущений $g \rightarrow 0$ мы имеем $|\Psi\rangle = |k\rangle$, т.е. $c_n = \delta_{nk}$ для выражения (4.4). При наличии возмущения в волновой функции (4.4) появляется *примесь* состояний $n \neq k$. Предположении аналитичности позволяет разложить коэффициенты (4.6) по малому параметру:

$$c_m = \delta_{mk} + g c_m^{(1)} + g^2 c_m^{(2)} + \dots, \quad (4.6)$$

Собственное значение энергии начинается с E_k° и гладко эволюционирует с увеличением величины возмущения:

$$E = E_k^\circ + g E_k^{(1)} + g^2 E_k^{(2)} + \dots. \quad (4.7)$$

Вычислив *энергетический член* $E(g)$ для конечного, но малого значения g , мы можем проследить его эволюцию назад вплоть до начального состояния в предположение уникального «генетического» развития, Рис. 4.1 (здесь мы видим часть реального спектра сложных ядра ^{24}Mg , рассчитанных g использованием оболочечной модели [15], где роль параметр играет сила межчастичного взаимодействия λ). Этот генетическое приближение основано на *теореме непересечения* из раздела 10.5 первого тома. На Рис. 4.1 *избегается* пересечение уровней. Также существует вариант теории возмущения *Бриллюэна—Вигнера*, где собственное значение энергии не разлагается в ряд, в то время как волновая функция разлагается. На практике этот вариант менее удобен.

Развитие уравнений (4.6) и (4.7) ведёт к системе уравнений для разных значений m :

$$\left(E_k^\circ - E_m^\circ + g E_m^{(1)} + g^2 E_m^{(2)} + \dots\right) \left(\delta_{mk} + g c_m^{(1)} + g^2 c_m^{(2)} + \dots\right) = g \sum_n H'_{mn} \left(\delta_{nk} + g c_n^{(1)}\right)$$

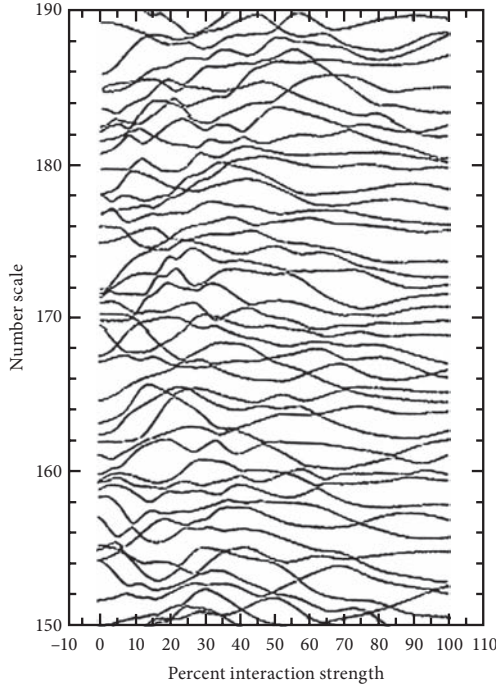


Рис. 4.1. Эволюция энергетического члена как функции от малого параметра теории возмущения

(4.8)

где k — фиксированный номер интересующего нас состояния, а m пробегает по всему гильбертову пространству. (Следует аккуратно обращаться с численными индексами).

В начале мы берём выражение (4.8) с $m = k$, тогда невозмущённые энергии и общий множитель g сокращаются, и

$$\left(E_k^{(1)} + gE_k^{(2)} + \dots\right) \left(1 + gc_k^{(1)} + g^2c_k^{(2)} + \dots\right) = \sum_n H'_{kn} \left(\delta_{nk} + gc_n^{(1)} + g^2c_n^{(2)} + \dots\right). \quad (4.9)$$

Далее выделяем в отдельное уравнение первый

$$E_k^{(1)} = H'_{kk}, \quad (4.10)$$

второй

$$E_k^{(2)} + E_k^{(1)} c_k^{(1)} = \sum_n H'_{kn} c_n^{(1)}, \quad (4.11)$$

и все высшие порядки по степени g . Низший порядок поправки (4.10) к уровню энергии определяется средним значением возмущения в невозмущенном состоянии. Поэтому член с $n = k$ из правой части выражения (4.11) сокращается со вторым слагаемым из левой части и остаётся выражение

$$E_k^{(2)} = \sum_{n \neq k} H'_{kn} c_n^{(1)} \quad (4.12)$$

в котором не содержится коэффициента $c_k^{(1)}$.

Вычисляя выражение (4.8) с $m \neq k$, мы получаем:

$$\left(E_k^{\circ} - E_m^{\circ} + g E_m^{(1)} + g^2 E_m^{(2)} + \dots \right) \left(c_m^{(1)} + g c_m^{(2)} + \dots \right) = \sum_n H'_{mn} \left(\delta_{nk} + g c_n^{(1)} + g^2 c_n^{(2)} + \dots \right) \quad (4.13)$$

Опять разлагаем это выражение по степеням малого параметра теории возмущений:

$$(E_k^{\circ} - E_m^{\circ}) c_m^{(1)} = H'_{mk}, \quad (4.14)$$

$$E_m^{(1)} c_m^{(1)} + (E_k^{\circ} - E_m^{\circ}) c_m^{(2)} = \sum_n H'_{mn} c_n^{(1)}, \quad (4.15)$$

и так далее. В предположении, что состояние $|k\rangle$ не является вырожденным и мы не боимся поделить на разность энергий, мы получим:

$$c_m^{(1)} = \frac{H'_{mk}}{E_k^{\circ} - E_m^{\circ}}, \quad m \neq k. \quad (4.16)$$

Таким образом, собственный вектор эволюционирующий из невозбуждённого состояния $|k\rangle$ в первом порядке теории возмущений

$$|\Psi\rangle = \sum_m (\delta_{mk} + g c_m^{(1)}) |m\rangle = (1 + g c_k^{(1)}) |k\rangle + g \sum_{m \neq k} \frac{H'_{mk}}{E_k^{\circ} - E_m^{\circ}} |m\rangle, \quad (4.17)$$

где поправки $c_k^{(1)}$ пока ещё не найдены. Энергия (4.12) не зависит от этих коэффициентов:

$$E = E_k^{\circ} + g H'_{kk} + g^2 \sum_{n \neq k} \frac{|H'_{kn}|^2}{E_k^{\circ} - E_n^{\circ}}. \quad (4.18)$$

Отметим, что гамильтониан является эрмитовым $H'_{nk} = (H'_{kn})^*$.

Наконец, потребуем, чтобы решение $|\Psi\rangle$ (4.17) было нормализовано:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1. \quad (4.19)$$

В этих условиях члены первого порядка удовлетворяют выражению

$$c_k^{(1)} + c_k^{(1)*} = 0. \quad (4.20)$$

неизвестный коэффициент должен быть мнимым $c_k^{(1)} = i\alpha$ и соответствующая поправка волновой функции это первый член разложения фазы $e^{ig\alpha}$. Постоянная величина фазы не имеет значения и мы можем постановить

$$c_k^{(1)} = i\alpha = 0. \quad (4.21)$$

Это определяет ответ для первого порядка возмущения волновой функции

$$|\Psi\rangle = |k\rangle + g \sum_{n \neq k} \frac{H'_{nk}}{E_k^o - E_n^o} |n\rangle. \quad (4.22)$$

Уравнения (4.18) и (4.22) решают задачу поиска возмущенной волновой функции и её новой энергией. Этот итерационный метод является регулярным, так что не сложно явно вычислить поправки в любом (не слишком высоком) порядке. В конце концов, мы можем избавиться от вспомогательного параметра g полагая его равным 1, просто включив его в оператор \hat{H}' . Структура разложения в ряд (4.8) демонстрирует, что для вычисления поправки энергии $n^{\text{го}}$ порядка достаточно знать поправку волновой функции $(n-1)^{\text{го}}$ порядка. В первом порядке возмущения в состояние $|k\rangle$ добавляется только примеси состояний $|n\rangle$ напрямую связанных с исходным состоянием ненулевыми элементами матрицы возмущения H'_{nk} .

Задача 4.1

Найдите второй порядок возмущения вектора состояний, полученного из невозмущённого состояния $|k\rangle$ и третий порядок возмущения для энергии.

Решение Собирая члены следующего порядка, получаем:

$$c_k^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq k} \frac{|H_{kn}|^2}{(E_k^o - E_n^o)^2}; \quad (4.23)$$

$$c_{m \neq k}^{(2)} = \frac{1}{E_k^\circ - E_m^\circ} \left\{ \sum_{n \neq k} \frac{H'_{mn} H'_{nk}}{E_k^\circ - E_n^\circ} - \frac{H'_{kk} H'_{mk}}{E_k^\circ - E_m^\circ} \right\}; \quad (4.24)$$

$$E_k^{(3)} = \sum_{m \neq k} \frac{H'_{km}}{E_k^\circ - E_m^\circ} \left\{ \sum_{n \neq k} \frac{H'_{mn} H'_{nk}}{E_k^\circ - E_n^\circ} - \frac{H'_{kk} H'_{mk}}{E_k^\circ - E_m^\circ} \right\}. \quad (4.25)$$

В $n^{\text{ом}}$ порядке возмущения входят примеси невозмущенных состояний, которые могут быть достигнуты из исходного состояния $|k\rangle$ за n шагов с использованием матричных элементов \hat{H}' . В результате этого процесса перебираются все возможные пути, включающие $(n - 1)$ промежуточное (*виртуальное*) состояние. Если гамильтониан \hat{H}° имеет, наряду с дискретным спектром, где локализовано состояние $|k\rangle$ также и континуум, то в общем случае возмущенное состояние $|\Psi\rangle$ может принадлежать и непрерывному спектру, так как соответствующая примесь воспроизводится с помощью \hat{H}' . Это произойдет, если возмущенная энергия перейдет в непрерывную часть спектра. Состояния из непрерывного спектра также должны учитываться при переборе виртуальных состояний.

Поправка энергии первого порядка (4.10) известна без вычислений и может быть просто включена в невозмущенную энергию E_k° в самом начале, так что в последующих итерациях участвуют только *недиагональные* матричные элементы, которые и дают нетривиальный эффект. Обратите внимание, что поправки к энергии из-за недиагональных элементов всегда образуют *циклы*, $k \rightarrow n \rightarrow m \rightarrow k$ из выражения (4.25), а соответствующие поправки к волновой функции образуют *дерево* (хотя и включающее в себя циклы) с ветвями достигающими подмешанные состояния. Поправка к энергии *основного* уровня второго порядка (4.18) всегда *отрицательна* из-за знака в *энергетическом знаменателе*. Мы уже упоминали, что появление таких знаменателей является типичной особенностью этого варианта теории возмущений. Как мы помним из задачи с двумя уровнями (раздел 10.5 из первого тома), смешивание состояний приводит к их *отталкиванию*. Основное состояние чувствует отталкивающее давление всех примесей сверху и перемещается вниз, в то время как для других состояний баланса сил сдвигающих вверх и вниз может оказаться любого знака. Таким образом, в этой формулировке, теория возмущений содержит *вариативные* признаки.

4.3 Сходимость

Как видно из полученных результатов и Задачи 4.1, каждый новый порядок теории возмущений добавляет недиагональный матричный элемент возмущения H'_{mk} делённый на энергетический знаменатель $E_k^\circ - E_m^\circ$. Таким образом, очевидным условием применимости подхода Рэля—Шрёдингера является малость недиагональных матричных элементов по сравнению с разностью значений энергий соответствующих невозмущённых уровней:

$$\left| \frac{H'_{mk}}{E_k^\circ - E_m^\circ} \right| \ll 1. \quad (4.26)$$

Если это условие выполнено, то в зависимости от требуемой точности в своих вычислениях мы можем ограничиться, несколькими низшими порядками теории возмущений. Так же очевидно, что если для исходного состояния $|k\rangle$, существует состояние $|k'\rangle$, которое является вырожденным по отношению к начальному $E_k^\circ = E_{k'}^\circ$ или имеет энергию близкую по значению к энергии первого $|E_k^\circ - E_{k'}^\circ| \simeq |H_{k'k}|$, то поправка к состоянию $|k\rangle$ становится большой и теория возмущения перестаёт в таком подходе работать. В этом случае волновые функции $|k\rangle$ и $|k'\rangle$ являются *нестабильными* и даже слабое возмущение \hat{H}' способно существенно их перемешать.

Тем не менее, если мы работаем в пространстве *конечной размерности*, то как всегда в задаче диагонализации (раздел 10.3 из первого тому) для матриц конечного размера, выражение (4.5) сводится к алгебраическому уравнению, решение которого зависит алгебраически от параметру возмущения g , а все корни являются реальными, что исключает особенности типа квадратного корня, становящегося мнимым. В этом случае пертурбативное разложение в принципе сходится, хотя может случить, что сходится слишком медленно, чтобы можно было прервать ряд в каком-либо порядке возмущений.

Ситуация становится более интересной в реалистичных случаях бесконечномерного гильбертова пространства. Теория возмущений расходится, даже если возмущение является слабым, меняет граничные условия или асимптотику изначальных функций. Такая ситуация возникает, например, если гамильтониан \hat{H}° имеет только дискретный спектр, а возмущение трансформирует его в спектр непрерывный. Рассмотрим осциллятор с *ангармонической* кубической поправкой, Рис. 4.2:

$$\hat{H} = \hat{H}^\circ + g\hat{H}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + g\frac{\hat{x}^3}{3}. \quad (4.27)$$

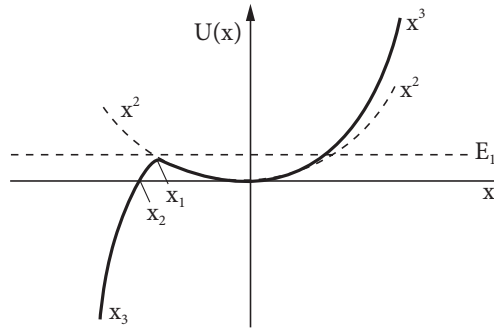


Рис. 4.2. Потенциальная энергия кубической аангармоничности.

Для малых g мы можем решить задачу формально с помощью развитой выше теории возмущения. Мы получим новый набор *стационарных* состояний. Как это видно из (11.109), энергии состояний изменятся во втором порядке, а к основному состоянию подмешаются одно- и трёх-квантовые состояния. Однако эти формальные вычисления не показывают, что реальные стационарные состояния гамильтониана (4.27), в отличие от состояний в случае невозмущенного квадратичного гамильтониана, являются *несвязанными* из-за проницаемого барьера конечных размеров, Рис. 4.2. Состояния, найденные нами с помощью теории возмущения, являются *квазистационарными* (раздел 5.8 из первого тому), и имеют конечное время жизни.

Очевидно, что состояния, расположенные над барьером, абсолютно неустойчивы. Потенциальный барьер существует для всех состояний с энергией $E < E_1$, Рис. 4.2. Верхушка барьера находится в $x = x_1 = -m\omega^2/g$, где $U'(x_1) = 0$ и $E_1 = U(x_1) = (m\omega^2)^3/6g^2$. Левая граница барьера расположена в $x = x_2 = -(3/2)m\omega^2/g = (3/2)x_1$. Следовательно, при $g \rightarrow 0$ энергия $E_1 \rightarrow \infty$, а точки $x_{1,2}$ уходят на $-\infty$, а барьер становится очень широким и высоким. В этом случае барьер удерживает множество невозмущенных состояний, но только в течение конечного времени.

Задача 4.2

Продемонстрируйте, что время жизни состояний с энергией $E \ll E_1$ равно:

$$\tau \sim e^{\text{const } m^3 \omega^5 / \hbar g^2}. \quad (4.28)$$

Для малого g время жизни состояний, расположенных ниже верхушки барьера, очень длительное, так что приближение, предполагающее стационарность состояния, является достаточно хорошим. Вероятность распада $\gamma \sim 1/\tau$ мала и *неаналитически* зависит от g . При малых g в уравнении (4.28) возникает *особая точка*. Поскольку поведение волновой функции в случае $t \rightarrow \infty$ сильно отличается от стационарного, то теория возмущения не в состоянии описать неаналитические эффекты.

Задача 4.3

Рассмотрим ангармоническую поправку четвёртого порядка к осциллятору:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 + g \frac{\hat{x}^4}{4}. \quad (4.29)$$

Покажите, что разложение в ряд по теории возмущения расходится и обсудите причины этого.

Решение Рассмотрим матричные элементы возмущения четвёртого порядка между состояниями невозмущенного осциллятора. При больших n они растут квадратично $\sim n^2$, в то время как знаменатель увеличивается линейно $\sim n$. Поэтому при учёте высоких порядков теории возмущений ряд расходится. Соответствующие примесей высоко возбужденных состояний описывают хвосты волновой функции, которые имеют типичные для поправки четвёртого порядка асимптотики, отличаются от асимптотик гармонического осциллятора. Можно предвосхитить расхождение: сходящаяся теория возмущения в виде степенного ряда расширения должны иметь некоторый круг сходимости в комплексной плоскости вокруг $g = 0$. Но тогда это будет сходиться внутри круга и при отрицательных g , что невозможно, поскольку для отрицательных g система неустойчива, точно по той же причине, по какой она была неустойчива и в случае кубической ангармонической поправки.

В случае (4.29) мы до сих пор рассматриваем только дискретный спектр. Решение, полученное с помощью теории возмущений, является хорошим приближением при малых g , но разложение в ряд по теории возмущений даёт *асимптотическое* приближение, аналогично тому, которое обсуждалось в случае квазиклассики. Для любой наперёд заданной ошибки, мы можем найти такое малое значение из g , при котором результат теории возмущений будет близок к точному в пределах этой ошибки. Но для конкретного значения g , начиная с некоторого порядка теории возмущений

(оцените этот порядок для ангармонической поправки четвёртого порядка!), результаты вычислений будут всё больше и больше отклоняться от точного ответа.

4.4 Случай близкорасположенных уровней

Как было показано, простые варианты теории возмущений не работают в случае близлежащих или вырожденных уровней. Возьмём для примера два невозмущенных состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ с малой разницей Δ по энергии. Опасные поправки в первом порядке возмущения (4.16) следуют из отношения H'_{12}/Δ и ведут к большому коэффициенту смешивания. Слишком малый знаменатель не будет влиять на поправку в первом порядке теории возмущения, если матричный элемент H_{12} будет отсутствовать.

Простым рецептом избавления от этого смешивания является диагонализация *полный* гамильтониана \hat{H} в подпространстве этих двух состояний. В результате мы получаем два новых вектора, представляющих из себя *надлежащую линейную комбинацию*:

$$|\alpha\rangle = c_1^{(\alpha)}|1\rangle + c_2^{(\alpha)}|2\rangle, \quad \alpha = 1, 2. \quad (4.30)$$

Для применения теории возмущений эти два состояния $|\alpha\rangle$ заменяют два старых. Конечно, гамильтониан \hat{H} диагонализуется диагонализуется лишь в небольшом подпространстве. Остальные элементы матрицы возмущения могут связать эту пару состояний с другими невозмущенными состояниями, однако которые в рамках нашего предположения не расположены по энергии слишком близко. В высших порядках теории возмущений мы снова можем смешивать состояния (4.30), но это смешивание будет содержать по крайней мере, вторую степень малого параметра g^2 , а соответствующие энергетические знаменатели будут соответствовать разницы энергий с уровнями, находящимися за пределами диагонализированного подпространства. Если эта поправка прежнему не мало, то следует расширить диагонализацию на другие состояния.

Диагонализация опасных близких состояний на самом деле является *вариационным приближением* из раздела 10.3 первого тома. В примере (4.30), мы ищем лучшие линейные комбинации в усечённом до двумерии базисе. Задача с двумя уровнями была решена в разделе 10.4 из первого тома. Теперь мы видим, что наши теории возмущений действительно следуют из этих результатов в соответствующем пределе $|H_{12}| \ll \Delta$. Используя обозначения введённые в выражениях (10.26) и (10.27) и раскрывая корень s в выражении (10.33), мы приходим к пертурбативному решению

с расталкиванием уровней (сравнить с (4.18) в случае $g = 1$):

$$E_+ = H_{22} + \frac{|H_{12}|^2}{\Delta}, \quad E_- = H_{11} - \frac{|H_{12}|^2}{\Delta}. \quad (4.31)$$

Здесь верхнележащее состояние $(+)$ соответствует состоянию $|2\rangle$ с небольшой примесью $|H_{12}/\Delta|$ состояния $|1\rangle$, в то время как низколежащее состояние $(-)$ является состоянием с небольшой примесью $|H_{12}/\Delta|$ состояния $|2\rangle$. Если параметр смешивания $|H_{12}/\Delta|$ не мал, то смешивание становится сильным, и результирующие комбинации будут близки к симметричным и антисимметричным состояниям (10,40). В случае полного вырождения $\Delta = 0$ будет полное совпадение.

Этот метод применим в общем случае d -кратного вырождения или в случае d близколежащих уровней $|1\rangle, \dots, |d\rangle$. Предварительная диагонализация полного гамильтониана \hat{H} в этом подпространстве даёт d надлежащих линейных комбинаций нулевого порядка, которые можно использовать в качестве отправной точки для подмешивания удалённых состояний с использованием теории возмущений. Эти комбинации будут взаимно ортогональны и стабильны с точки зрения \hat{H}' . Из-за расталкивания уровней, изначальное их вырождение исчезает, а новые начальные уровни расщепляются, как минимум частично. Часто нет возможности выполнить предварительную диагонализацию и правильные линейные комбинации могут быть найдены на основании имеющихся *симметрий* системы. Мы увидим примеры этому при обсуждении множества конкретных задач.

4.5 Адиабатическое приближение

Если степени свободы системы можно разбить на две группы, *медленные* и *быстрые*, то можно применить специальную форму теории возмущений. Если система состоит из частиц с сильно различающимися массами, как, например, в молекулах или твёрдых телах, такое разбиение вполне естественно. Мы качественно обсуждали это в гл. 5.7 и пришли к выводу, что в молекулах существует чёткая классификация возможных возбуждений (электронных, колебательных и вращательных), энергии которых уменьшаются пропорционально параметру $\sqrt{m/M}$, где m — масса электрона, а $M \gg m$ — масса ядра. Аналогичное разбиение, на электронные и фононные возбуждения (колебания решетки, гл. 44), подходит для твёрдых тел.

В *приближении Борна*—*Оппенгеймера*, координаты ядра $X = \{\mathbf{R}_A\}$ сначала фиксируются и рассматриваются как параметры, а движение электронов (быстрых переменных $x = \{\mathbf{r}_a\}$) рассматривается в поле неподвижных

(вообще говоря, необязательно находящихся в положении равновесия) ядер. Электроны в молекулах и твёрдых телах движутся относительно быстро, и их волновые функции могут приспособиться к медленно меняющимся положениям ядер. «Быстрый» гамильтониан $\hat{H}_f(x; X)$ в первом приближении включает в себя кинетическую энергию \hat{K}_x быстрых степеней свободы x и их взаимодействие $\hat{U}(x, X)$ с медленными переменными X , которые входят в $\hat{H}_f(x; X)$ как параметры. Это приводит к *адиабатическому* уравнению Шрёдингера

$$\hat{H}_f(x; X)\psi_\alpha(x; X) = E_\alpha(X)\psi_\alpha(x; X) \quad (4.32)$$

с собственными значениями, *электронными термами* $E_\alpha(X)$, определёнными для различных фиксированных значений медленных переменных (координат ядер в случае молекул или твёрдых тел). Собственные функции $\psi_\alpha(x; X)$ образуют полную ортонормированную систему для каждого значения X (функции для различных X в общем случае не ортогональны).

Параметрическое уравнение (4.32) приводит к полезным точным соотношениям для матричных элементов

$$M_{\beta\alpha}(X) \equiv \left\langle \beta; X \left| \frac{\partial}{\partial X} \right| \alpha; X \right\rangle. \quad (4.33)$$

Беря производную (4.32) по X , мы получаем ($\hat{H} = \hat{H}_f(x; X)$)

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial X} |\alpha; X\rangle + \hat{H} \frac{\partial}{\partial X} |\alpha; X\rangle = \frac{\partial E_\alpha}{\partial X} |\alpha; X\rangle + E_\alpha \frac{\partial}{\partial X} |\alpha; X\rangle, \quad (4.34)$$

или, для матричного элемента (4.33),

$$\left\langle \beta; X \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial X} \right| \alpha; X \right\rangle + E_\beta M_{\beta\alpha}(X) = \frac{\partial E_\alpha}{\partial X} \delta_{\beta\alpha} + E_\alpha M_{\beta\alpha}(X). \quad (4.35)$$

Для $\beta \neq \alpha$ и для невырожденных $E_\beta(X)$ и $E_\alpha(X)$, мы находим

$$M_{\beta\alpha}(X) = \frac{\left\langle \beta; X \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial X} \right| \alpha; X \right\rangle}{E_\alpha(X) - E_\beta(X)}, \quad (4.36)$$

и для $\beta = \alpha$,

$$\left\langle \alpha; X \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial X} \right| \alpha; X \right\rangle = \frac{\partial E_\alpha}{\partial X}. \quad (4.37)$$

Согласно последнему уравнению, производная собственного значения по параметру равна среднему значению производной гамильтониана (производные бра- и кет-векторов сокращаются) — *теорема Паули*, которую иногда приписывают *Фейнману и Хеллману*. Равенство (4.37) согласуется с поправкой первого порядка (4.10) при бесконечно малом изменении гамильтониана.

Задача 4.4

Используя теорему Паули и предыдущие результаты (*Задачи 17.3, 17.15, 18.7*), вычислите средние значения $\langle r^{-2} \rangle$ и $\langle r^{-3} \rangle$ для стационарного связанного состояния ψ_{nl} в кулоновском поле.

Решение Из уравнения движения для радиального импульса \hat{p}_r мы находим связь между двумя средними значениями (условие стационарной орбиты)

$$Ze^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{m} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad (4.38)$$

динамическое равновесие кулоновской и центробежной сил. С другой стороны, мы можем применить теорему Паули к радиальному гамильтониану, записанному в виде, справедливом для состояний с заданным орбитальным моментом ℓ ,

$$\hat{H}_\ell = \hat{K}_r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + U(r). \quad (4.39)$$

Рассматривая ℓ как параметр, получаем

$$\frac{\hbar^2(2\ell+1)}{2m} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{\partial E}{\partial \ell}. \quad (4.40)$$

Для данного радиального квантового числа N уровни энергии водородоподобного атома даются формулой

$$E_{n\ell} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 (N + \ell + 1)^2}, \quad (4.41)$$

и (4.40) даёт

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a^2 n^3 (\ell + 1/2)}, \quad (4.42)$$

тогда как (4.38) определяет

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a^3 n^3 \ell(\ell+1)(\ell+1/2)}. \quad (4.43)$$

Полный гамильтониан содержит также «медленную» часть $\hat{H}_s(X)$,

$$\hat{H} = \hat{H}_f(x; X) + H_s(X), \quad (4.44)$$

В молекулах или твёрдых телах, $\hat{H}_s(X)$ включает в себя кинетическую энергию ядер и межъядерных взаимодействий. Стационарное решение полного уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}\Psi(x, X) = E\Psi(x, X), \quad (4.45)$$

может быть найдено с помощью разложения по полному набору функций быстрых переменных, найденному в (4.32), с амплитудами, зависящими от X ,

$$\Psi(x, X) = \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}(X) \psi_{\alpha}(x; X). \quad (4.46)$$

Медленная часть \hat{H}_s содержит производные по X и, следовательно, действует не только на $\varphi_{\alpha}(X)$, но и на параметры X в функциях ψ_{α} . Теперь (4.45) принимает форму

$$\sum_{\alpha} (E - E_{\alpha}(X)) \varphi_{\alpha}(X) \psi_{\alpha}(x; X) = \sum_{\alpha} \hat{H}_s \cdot (\varphi_{\alpha}(X) \psi_{\alpha}(x; X)). \quad (4.47)$$

Функции $\psi_{\alpha}(x; X)$ ортонормированы как функции от x при любом X , так что проекция (4.47) на произвольную функцию $\psi_{\beta}(x; X)$ даёт

$$(E - E_{\beta}(X)) \varphi_{\beta}(X) = \sum_{\alpha} \int dx \psi_{\beta}^*(x; X) \hat{H}_s \cdot (\varphi_{\alpha}(X) \psi_{\alpha}(x; X)). \quad (4.48)$$

Член в операторе \hat{H}_s , который содержит энергию взаимодействия $U_s(X)$ медленных переменных, даёт снова $\delta_{\alpha\beta}$. Следовательно, $U_s(X)$, вместе с энергией $E_{\beta}(X)$ быстрых переменных для фиксированной конфигурации β медленных переменных, определяет *эффективную потенциальную энергию*

$$U_{\beta}(X) = U_s(X) + E_{\beta}(X). \quad (4.49)$$

Этот потенциал можно объединить с кинетической энергией \hat{K}_X медленных переменных [часть правой стороны равенства (4.48), где оператор \hat{K}_X действует *только* на функцию $\varphi_\alpha(X)$], что даст эффективный гамильтониан медленных переменных, включающий в себя вклад быстрых переменных, усредненный по их движению,

$$\hat{H}_\beta^{\text{eff}} = \hat{K}_X + U_\beta(X). \quad (4.50)$$

Окончательно, (всё ещё точная) система уравнений может быть записана в виде

$$(E - \hat{H}_\beta^{\text{eff}})\varphi_\beta(X) = \sum_\alpha I_{\beta\alpha}(X)\varphi_\alpha(X). \quad (4.51)$$

Интегралы $I_{\beta\alpha}$ содержат только те части медленной кинетической энергии, которые один или два раза дифференцируют функции $\psi_\alpha(x; X)$ по параметрам X ,

$$I_{\beta\alpha}(X) = \int dx \psi_\beta^*(x; X) \left\{ \hat{K}_X (\varphi_\alpha(X) \psi_\alpha(x; X)) - (\hat{K}_X \varphi_\alpha(X)) \psi_\alpha(x; X) \right\}. \quad (4.52)$$

Интегралы $I_{\beta\alpha}$ с $\beta \neq \alpha$ связывают различные уравнения набора (4.51). Без этой связи (первое *адиабатическое приближение*) каждый электронный терм даст набор независимых уравнений для медленных движений, возможных для данной электронной конфигурации. Тогда мы получили бы стационарные состояния $\Psi_\beta^{(n)}$ как собственные состояния $\hat{H}_\beta^{\text{eff}}$,

$$\hat{H}_\beta^{\text{eff}} \Psi_\beta^{(n)}(X) = E_\beta^{(n)} \Psi_\beta^{(n)}(X). \quad (4.53)$$

Как обычно в теории возмущений, поправки к $\Psi_\beta^{(n)}(X)$ от $I_{\beta \neq \alpha}$ будут порядка отношения

$$\zeta = \left| \frac{\langle \Psi_\beta^{(n)} | I_{\beta\alpha} | \Psi_\alpha^{(n')} \rangle}{E_\beta^{(n)} - E_\alpha^{(n')}} \right|. \quad (4.54)$$

Сделаем грубую оценку, чтобы показать, что в типичной адиабатической ситуации эти поправки могут быть действительно небольшими. В молекуле с характерным разделением частот ε/\hbar быстрого (электронного) движения и ω медленных (ядерных) колебаний, гл. 5.7, мы ожидаем, $\zeta \sim \hbar\omega/\varepsilon \ll 1$.

Главный член в $I_{\beta\alpha}$ соответствует действию одного градиента ∇_X оператора кинетической энергии $\hat{K}_X = -\hbar^2 \nabla_X^2 / 2M$ на параметры в электронной функции $\psi_\alpha(x; X)$, а второй ∇_X действует снаружи на подмешанную колебательную функцию $\Psi_\alpha^{(n')}(X)$. Используя (4.36), мы перенесём градиент внутри электронного матричного элемента на гамильтониан H_f , так что

$$|I_{\beta\alpha}(X)| \sim \frac{\hbar^2}{2M} \left| \frac{\langle \beta | (\nabla_X \hat{H}_f) | \alpha \rangle}{E_\alpha(X) - E_\beta(X)} \cdot \nabla_X \right|. \quad (4.55)$$

Так как \hat{H}_f описывает электрон—ядерное взаимодействие, первый градиент даёт силу, действующую на ядро; для почти гармонических колебаний эта сила равна $F \sim M\omega^2 X$, если координаты X есть отклонения ионов от положений равновесия. Внешний $\hbar \nabla_X$ можно оценить как равный импульсу ядра P . Знаменатель в (4.55) есть типичная энергия возбуждения электронов ε , в то время как в (4.54) знаменатель $\geq \hbar\omega$. Эта очень консервативная оценка даёт для основного или низколежащего состояния, когда $\langle XP \rangle \sim \hbar$,

$$\zeta \leq \left| \frac{\omega \langle XP \rangle}{\varepsilon} \right| \sim \frac{\hbar\omega}{\varepsilon} \ll 1. \quad (4.56)$$

Таким образом, мы ожидаем, что приближение, когда для каждой электронной конфигурации у нас есть независимая группа колебательных состояний, может служить хорошей отправной точкой, при этом небольшие эффекты смешивания электронных конфигураций рассматриваются как возмущение.

4.6 Молекулярный ион водорода

Мы можем проиллюстрировать общие соображения предыдущих разделов приближённым рассмотрением иона H_2^+ , системы одного электрона в поле двух протонов, рис. 19.3. Для того чтобы связать протоны, электрон должен создать отрицательно заряженное облако, которое будет притягивать оба протона.

Полный гамильтониан системы равен

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2M} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - e^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} - \frac{1}{R} \right), \quad (4.57)$$

где m и M есть массы электрона и протона, соответственно, $r_{1,2} = |\mathbf{r} - \mathbf{R}_{1,2}|$ - расстояние между электроном и протоном, в то время как R - расстояние между протонами, то есть наш медленный параметр X ; градиент ∇ действует на координаты электронов, и $\nabla_{1,2}$ действуют на координаты протонов.

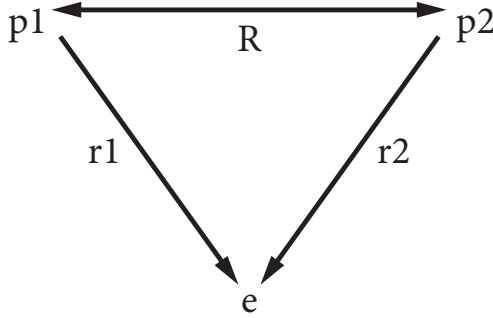


Рис. 4.3. Конфигурация молекулярного иона водорода

Хотя задача может быть решена точно с использованием эллиптических координат [16], мы применим методы, объединяющие вариационный подход и адиабатическое приближение.

При фиксированном расстоянии R быстрая часть гамильтониана равна

$$\hat{H}_f(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - e^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \equiv \hat{K}_f + U_1 + U_2. \quad (4.58)$$

Как подсказывает наш опыт работы с задачей двух центров, гл. 17.8, разумный вариационный подход соответствует образу электрона, общего для обоих центров. Мы ищем решение уравнения (4.32) в виде суперпозиции двух $1s$ -функций атома водорода, локализованных возле каждого центра,

$$\psi(\mathbf{r}) = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad \psi_{1,2} = \psi_{1s}(r_{1,2}). \quad (4.59)$$

Можно ожидать, что лучшее приближение получится с учётом возможной деформации каждой $1s$ орбиты в направлении к другому центру. Этого можно достичь путём включения $2p$ и высших водородоподобных орбиталей с выделенными направлениями, или, что даже лучше, не фиксируя форму орбиталей, а рассматривая их как неизвестные пробные функции. Для иллюстрации мы ограничимся здесь простейшей версией (4.59) с $1s$ орбиталями.

Функции $\psi_{1,2}$, локализованные вокруг разных центров, не ортогональны. Их перекрытие фактически есть основная сила, связывающая молекулу. Нам нужно сейчас решить задачу диагонализации с неортогональными пробными функциями, как в *Задаче 10.7*. В 2×2 -мерном пространстве, натянутом на функции $\psi_{1,2}$, адиабатическое уравнение

$$\hat{H}_f \psi = E(R) \psi, \quad (4.60)$$

сводится к системе двух связанных уравнений для амплитуд $c_{1,2}$ суперпозиции (4.59):

$$(\varepsilon + (U_2)_{11})c_1 + ((U_1)_{12} + \varepsilon O_{12})c_2 = 0, \quad (4.61)$$

$$(\varepsilon + (U_1)_{22})c_2 + ((U_2)_{21} + \varepsilon O_{21})c_1 = 0. \quad (4.62)$$

Здесь $\varepsilon = E_{1s} - E$ есть сдвиг энергии основного состояния молекулярного иона по сравнению с энергией отдельного атома водорода. Мы ввели обозначения для перекрытия

$$O_{12} = O_{21} = \int d^3r \psi_1(r)\psi_2(r) \equiv O, \quad (4.63)$$

волновых функций, матричные элементы

$$(U_2)_{11} = (U_1)_{22} = \int d^3r \frac{e^2}{r_2} \psi_1^2 \equiv V, \quad (4.64)$$

потенциальной энергии, создаваемой другим центром, и

$$(U_1)_{12} = (U_2)_{21} = \int d^3r \frac{e^2}{r_1} \psi_1\psi_2 \equiv \tilde{V} \quad (4.65)$$

амплитуды перескока от одного центра к другому, индуцированные потенциалом второго центра (в нашем случае все функции и матричные элементы действительны).

Задача 4.5

Рассчитайте величины (4.63-4.65) с $1s$ волновыми функциями водорода. Удобно использовать безразмерные *эллиптические координаты* [16],

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad \varphi, \quad (4.66)$$

где азимутальный угол φ отсчитывается от оси, соединяющей центры. Эти координаты изменяются в пределах

$$1 \leq \xi \leq \infty, \quad -1 \leq \eta \leq +1, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad (4.67)$$

и элемент объёма равен

$$d^3r = \frac{1}{8}R^3(\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\varphi. \quad (4.68)$$

Решение Для интеграла перекрытия мы находим ($X = R/a$, a - борковский радиус),

$$O = \frac{1}{\pi a^3} \int d^3r e^{-(r_1+r_2)/a} = \frac{X^3}{8\pi} \int_1^\infty d\xi e^{-X\xi} \int_{-1}^1 d\eta (\xi^2 - \eta^2) \cdot 2\pi, \quad (4.69)$$

или, после несложных расчётов,

$$O = \left(1 + X + \frac{X^2}{3}\right) e^{-X}. \quad (4.70)$$

Как и ожидалось, перекрытие уменьшается экспоненциально с увеличением расстояния между центрами. Аналогично находим

$$\tilde{V} = \frac{e^2}{a} (1 + X) e^{-X}, \quad (4.71)$$

$$V = \frac{e^2}{aX} \left(1 - (1 + X) e^{-2X}\right). \quad (4.72)$$

Перекрёстный член (4.71) спадает так же, как и перекрытие, в то время как энергия взаимодействия электронного облака, локализованного на одном центре, со вторым ионом быстро переходит к классическому пределу точечного заряда, e^2/R .

Благодаря симметрии уравнений (4.61, 4.62) мы можем сложить или вычесть эти уравнения и получить симметричное

$$c_1 = c_2, \quad \varepsilon = \frac{V + \tilde{V}}{1 + O}, \quad (4.73)$$

и антисимметричное

$$c_1 = -c_2, \quad \varepsilon = \frac{\tilde{V} - V}{1 - O}, \quad (4.74)$$

решения. Во втором случае имеется узел посередине между центрами и, следовательно, малая вероятность для электронного облака, которое является единственным переносчиком притяжения между протонами. Основное состояние с максимальным притяжением соответствует симметричному решению. После нормировки правильная волновая функция есть

$$\psi_{\text{sym}} = \frac{\psi_1 + \psi_2}{\sqrt{2(1 + O)}}, \quad (4.75)$$

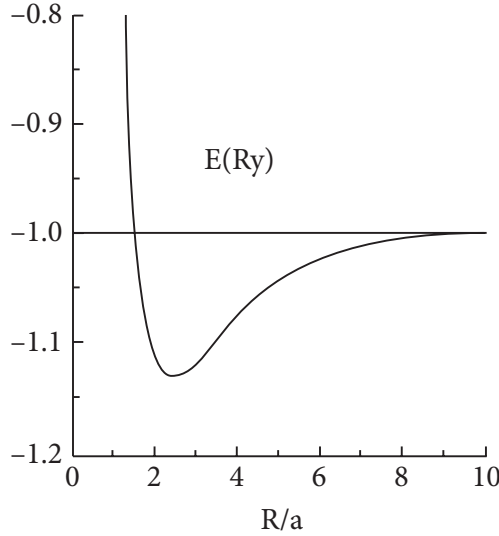


Рис. 4.4. Эффективный потенциал как функция расстояние между центрами, в единицах e^2/a

и эффективный потенциал между протонами, с добавлением отталкивания e^2/R , является *притягивающим*,

$$U^{\text{eff}}(R) = E_{1s} + f(X) \frac{e^2}{R}, \quad (4.76)$$

где, в соответствии с (4.71), (4.72) и (4.73),

$$f(X) = \frac{(1 - 2X^2/3)e^{-X} + (1 + X)e^{-2X}}{1 + (1 + X + X^2/3)e^{-X}}. \quad (4.77)$$

При малых расстояниях между центрами $X \ll 1$ эта функция близка к потенциалу центра с зарядом 2, $f(X) \approx 2(1 - X)$; при очень больших расстояниях $f(X) \approx -(2/3)X^2e^{-X}$ и стремится к нулю снизу. Минимум эффективного потенциала при $X \approx 2.5$, рис. 4.4, соответствующий $R \approx 1.3 \text{ \AA}$, даёт равновесное расстояние между протонами (экспериментальное значение равно 1.06 \AA), и согласие может быть улучшено при помощи выбора более подходящей пробной функции. Заметим, что для более тяжёлой частицы, такой, как отрицательный мюон, $m_\mu = 206 m_e$, вместо электрона (но всё ещё $m_\mu \ll M$ для того, чтобы сохранить адиабатическое приближение), размер молекулы будет меньше на два порядка. Это значительно увеличит вероятность термоядерной реакции между ядрами (*мюонный катализ*).

Задача 4.6

Опишите приближённо эффективный потенциал вблизи положения равновесия потенциалом гармонического осциллятора, найдите частоту колебаний и подтвердите оценки гл. 5.7 и справедливость адиабатического приближения.

4.7 Взаимодействия атомов на больших расстояниях

Химическая связь объясняется в основном взаимодействием атомов на сравнительно коротких расстояниях, когда электронные облака взаимодействующих атомов значительно перекрываются. Такие силы спадают экспоненциально вместе с волновыми функциями электронов. Существуют слабые притягивающие *силы Ван-дер-Ваальса* (иногда называемые *дисперсионными силами Лоренца*), которые спадают по степенному закону и действуют поэтому на больших расстояниях. Будучи обусловленными взаимодействием флуктуирующих электрических диполей, они отвечают за связывание молекулярных кристаллов и за отклонения уравнения состояния газов от простых законов идеальных газов.

В *Задаче 3.6* мы видели, что атомные электроны создают флуктуирующее дипольное электрическое поле, которое, в отличие поля средней электронной плотности, падает $\sim R^{-3}$ на расстояниях R больших, чем радиус атома. Взаимодействие двух диполей описывается гамильтонианом [3], eq. (42.7)

$$\hat{H}_{dd} = \frac{1}{R^3} \left[(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2) - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \mathbf{n})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \mathbf{n}) \right] \equiv \frac{\hat{W}}{R^3}, \quad (4.78)$$

где дипольные операторы двух нейтральных атомов с зарядами ядра Z_1 и Z_2 равны

$$\hat{\mathbf{d}}_{1,2} = e \sum_{a=1}^{Z_{1,2}} (\hat{\mathbf{r}}_a - \mathbf{R}_{1,2}), \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2, \quad (4.79)$$

а \mathbf{n} есть единичный вектор вдоль \mathbf{R} . Координаты ядра фиксированы в адиабатическом приближении.

Слабые диполь-дипольные силы можно рассматривать по теории возмущений. Для основных состояний двух атомов средние значения дипольных операторов исчезают, гл. 8.5. В первом порядке взаимодействие \hat{W} подмешивает к основному состоянию $|0_1 0_2\rangle$ состояния $|n_1 n_2\rangle$ с одним электроном

в каждом атоме, возбуждённым на следующие доступные орбитали противоположной чётности. Поправка к энергии основного состояния всегда отрицательна, (4.18),

$$\Delta E_{dd}(R) = \frac{1}{R^6} \sum_{n_1 n_2} \frac{|\langle 0_1 0_2 | \hat{W} | n_1 n_2 \rangle|^2}{E(0, 0) - E(n_1, n_2)}, \quad (4.80)$$

где $E(n_1, n_2)$ есть невозмущённые уровни энергии изолированных атомов. Эта функция определяет притягивающий потенциал двух атомов на больших расстояниях,

$$\Delta E_{dd}(R) = -\frac{C}{R^6}. \quad (4.81)$$

Задача 4.7

Оцените константу C в (4.81) для двух атомов водорода в основном состоянии.

Решение Ряды (4.80) можно просуммировать [17]. Мы ограничимся простой оценкой (*приближение полноты*). Если средняя энергия возбуждения в знаменателе (4.80) равна ε , мы можем оценить результат с помощью суммирования по полному набору состояний $|n_1 n_2\rangle$,

$$C \approx \frac{1}{\varepsilon} \sum_{n_1 n_2} |\langle 0_1 0_2 | \hat{W} | n_1 n_2 \rangle|^2 = \frac{\langle 0_1 0_2 | W^2 | 0_1 0_2 \rangle}{\varepsilon}. \quad (4.82)$$

Промежуточные энергии начинаются с $2p$ состояний, $E(1_1 1_2) = -2 \times (e^2/2a_0) \times (1/4)$, т.е. энергия возбуждения $(3/4)(e^2/a_0)$. Средняя энергия возбуждения, по соображениям размерности, должна быть $\varepsilon = \xi(e^2/a_0)$ с численным множителем $\xi \sim 1$. При вычислении $\langle W^2 \rangle$ мы можем выбрать ось z вдоль R , тогда

$$W^2 = e^4(x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2)^2, \quad (4.83)$$

и среднее значение для основного состояния равно

$$\langle 0_1 0_2 | W^2 | 0_1 0_2 \rangle = 6e^4 a_0^4. \quad (4.84)$$

В результате

$$\Delta E_{dd}(R) = -\frac{6}{\xi} \frac{e^2}{a_0} \left(\frac{a_0}{R}\right)^6. \quad (4.85)$$

| Точный расчёт даёт $\xi = 0.93$.

Это рассмотрение справедливо, если большое расстояние R между атомами не превышает длину волны $\lambda_0 \sim \hbar c/\varepsilon$ типичных атомных переходов. При $R > \lambda_0$ становятся важными эффекты запаздывания, и закон взаимодействия изменяется с (4.81) на $\sim R^{-7}$ [18], § 85.

Новые эффекты появляются для двух *тождественных атомов*, один из которых находится в возбуждённом состоянии $|n\rangle$ с чётностью, противоположной чётности основного состояния. Здесь мы должны использовать теорию возмущений для вырожденных состояний. Действительно, состояния $|0_1 n_2\rangle$ и $|n_1 0_2\rangle$ имеют одинаковую невозмущённую энергию. Диполь-дипольное взаимодействие (4.78) имеет ненулевой матричный элемент для передачи возбуждения между вырожденными состояниями,

$$W_n \equiv \langle n_1 0_2 | \hat{W} | 0_1 n_2 \rangle = \langle n_1 | \hat{\mathbf{d}}_1 | 0_1 \rangle \cdot \langle 0_2 | \hat{\mathbf{d}}_2 | n_2 \rangle - 3 \langle n_1 | (\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \mathbf{n}) | 0_1 \rangle \langle 0_2 | (\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \mathbf{n}) | n_2 \rangle, \quad (4.86)$$

или, поскольку атомы тождественны,

$$W_n = |\langle n_1 | \hat{\mathbf{d}}_1 | 0_1 \rangle|^2 - 3 |\langle n_1 | (\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \mathbf{n}) | 0_1 \rangle|^2. \quad (4.87)$$

Правильные линейные комбинации нулевого порядка, как мы знаем из гл. 10.4-10.6, равны

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1 0_2\rangle \pm |0_1 n_2\rangle). \quad (4.88)$$

Они расщепляются матричным элементом (4.87),

$$E_{\pm} = E_0 + E_n \pm \frac{W_n}{R^3}. \quad (4.89)$$

Если атомы медленно приближаются друг к другу в начальном состоянии $|n_1 0_2\rangle$, в результате последующей эволюции, описываемой таким же образом, как и в гл. 10.6, будет периодически возникать состояние $|0_1 n_2\rangle$ с *резонансной передачей* возбуждения второму атому. Частота передачи определяется матричным элементом W_n/R^3 и зависит от расстояния R . Так как расстояние меняется со временем, лучшим подходом будет включение в рассмотрение адиабатической фазы, см. ниже, гл. 25.5.

Электрон – это точка, ничто в нем не вращается. Спин – это такое же внутреннее свойство электрона как и масса.

С. Газиорович, *Квантовая физика*

Глава 5

Спин 1/2

5.1 $SU(2)$ группа

Как отмечалось в гл. 3.5, существуют наблюдаемые спектроскопические эффекты, связанные с электронными и ядерными спинами; спины играют быстро возрастающую роль в области нанонауки и технологических применений. Наименьшее нетривиальное значение спина $1/2$, и, используя частицы со спином $1/2$ в качестве строительных блоков — электроны, кварки и нейтрино — природа конструирует практически все вещества (объединяя составные части со спином $1/2$ можно получить произвольного угловой момент J). Поэтому спин $1/2$ заслуживает особого внимания.

Существует значительная геометрическая разница между целым и полуцелым значениями углового момента. Орбитальный угловой момент $\vec{\ell}$ генерирует мультиплеты с *целым* $J = \ell$. Спиновый угловой момент s может принимать как целое, так и полуцелое значение. Мы можем понять, физические причины этого различия. При вращении (16.2) вокруг оси квантования z , волновые функции состояния $|JM\rangle$ с определенной проекцией M на ту же ось, просто приобретает фазу,

$$\hat{R}_z(\alpha)|JM\rangle = e^{-i\hat{J}_z\alpha}|JM\rangle = e^{-iM\alpha}|JM\rangle. \quad (5.1)$$

Рассмотрим поворот на угол $\alpha = 2\pi$. Состояния с целыми J не изменяются, $\exp(-i2\pi M) = 1$, а состояния с полуцелым J получают множитель -1 . Как мы видели в разделе 1.1, орбитальный момент преобразует явную координатную зависимость волновых функций. Так как направления обозначаемые углами 0 и 2π физически совпадают, *однозначных волновой функции* должно быть *периодической* функцией углов с периодом 2π , то есть она может иметь только *целые* значения M and J . Другой аргумент происходит от эквивалентности, раздел 2.5, полных наборов функций, плоских волн и

сферических функций только с целыми значениями ℓ . Спинные волновые функции не являются явными функциями координат, таким образом требование периодичности отсутствует. Поскольку физические предсказания даны в терминах амплитуд, которые билинейны по волновым функциям, то допустимо *двузначное* представление группы вращений соответствующей полуцелому спину.

С математической точки зрения, общие коммутационные соотношения (1.21) определяют группу $SU(2)$, которая является так называемой группой *покрытия* по отношению к трехмерной группе вращений $\mathcal{R}(3)$. *Специальная унитарная группа* $SU(n)$ являются группой унитарных $n \times n$ матриц с определителем, равным 1. Такие матрицы образуют группу, потому что результатом их перемножения является новая матрица того же класса. Количество различных *генераторов* равно $n^2 - 1$ число независимых бесследовых матриц (единичная матрица дополняет этот набор линейно независимых матриц до общего числа n^2). В случае $n = 2$, число генераторов, три и алгебраическая структура такая же как для $\mathcal{R}(3)$ и $SU(2)$ групп. Однако, это всего лишь локальная структура вблизи единичного оператора, уравнение (1.1). Различные глобальные структуры (топологии) проявляются в том, что две разные $SU(2)$ матрицы (они отличаются знаком полуцелого спина) соответствуют одному и тому же вращению. Физически идентичные повороты, отличающиеся на 2π , согласно (5.1), дают $+1$ и -1 , соответственно. Невозможно избавиться от этой двузначности просто выбрав ветвь $+1$, поскольку тогда получается разрыв представления в точке $\alpha = 0 (= 2\pi)$.

Задача 5.1

Покажите, что генераторы \hat{J}_k алгебры $SU(2)$ представлены бесследовыми матрицами.

Решение Утверждение следует из коммутационных соотношений (16.21), так как в любом представлении конечной размерности след коммутатора исчезает в силу его (следа) циклической инвариантности,

$$\text{tr } \hat{J}_n = -\frac{i}{2} \varepsilon_{jkn} \text{tr } [\hat{J}_j, \hat{J}_k] = 0. \quad (5.2)$$

Для данной системы, все возможные состояния имеют либо только целые значения углового момента либо только полуцелые. В противном случае можно было бы построить, согласно принципу квантовой суперпозиции, состояние, которое будет линейной комбинацией $\psi = \psi_{\text{int}} + \psi_{\text{half}}$. Суперпозиции имеет физический смысл только, если оператор O изменяющий угловой

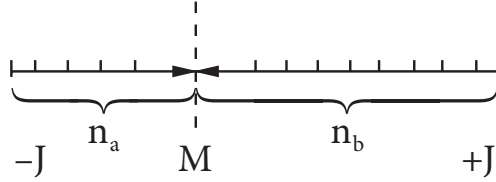


Рис. 5.1. Конструкция Швингеровского представления

момент на полуцелую величину, существует; его отсутствие означало бы, что целая и полуцелая подсистемы состояний никогда не интерферируют и на самом деле нужно рассматривать их как различных систем (*super otbor*). Поворот на 2π преобразует волновую функцию в $\psi_{\text{int}} - \psi_{\text{half}}$. После такого поворота, физические измерения с переменной O давали бы результаты противоположного знака из-за интерференционного члена $\langle \psi_{\text{int}} | O | \psi_{\text{half}} \rangle$. Это несовместимо с идеей вращения системы как целого на угол 2π , без изменения во внутренней структуре.

5.2 Спин 1/2: алгебра

Объекты со спином $1/2$ реализуют низшее нетривиальное представление $SU(2)$ группы размерности $2s + 1 = 2$. В общей $SU(n)$ группе, *фундаментальные* представления размерности n описывают подобные базовые составляющие (простейший нетривиальный набор объектов, несократимые при всех преобразованиях группы).

Задача 5.2

Представление Швингера Введите два типа операторов рождения и уничтожения, \hat{a}^\dagger, \hat{a} и \hat{b}^\dagger, \hat{b} , которые создают и уничтожают "частицы" со спином $s = 1/2$ и проекцией $s_z = 1/2$ и $-1/2$, для a -типа и b -типа, соответственно. С помощью этих операторов, сконструируйте определенные состояниях с данным *общим* моментом J и его проекцией M .

Решение В представлении Гольштейна-Примакова, *Задача 1.8*, мы использовали операторы спиновых отклонений начиная с низшего состояния $J_z = -J$ мультиплета. Назовем n_a числом шагов, необходимых для достижения проекция M . Таким же образом мы могли бы начать с высшего состояния и придти к тому же значению $J_z = M$ за n_b шагов, рис. 1.1.

Поэтому, мы определим

$$M = -J + n_a = J - n_b. \quad (5.3)$$

Эти два числа, n_a и n_b , полностью определяют мультиплет, J [представление $SU(2)$ группы], и состояние внутри мультиплета,

$$J = \frac{1}{2}(n_a + n_b) \equiv \frac{n}{2}, \quad M = \frac{1}{2}(n_a - n_b). \quad (5.4)$$

Если бы мы могли интерпретировать n_a и n_b как число частиц типа a и b , соответственно, выражение (5.4) для M показало бы, что эти частицы несут проекции спина $1/2$ и $-1/2$. Такая интерпретация действительно, возможна. Матричные элементы (1.51) теперь выглядят следующим образом [сравнить с уравнением (1.59)]:

$$\mu_-(JM) = \sqrt{n_a(n_b + 1)}, \quad \mu_+(JM) = \sqrt{(n_a + 1)n_b}. \quad (5.5)$$

Эти комбинации точно соответствовать матричным элементам Гейзенберга-Вейля (11.119) для двух типов операторов создания и уничтожения частиц двух типов a и b . В соответствии с формулой (5.5), мы отождествляем

$$\hat{J}_+ = \hat{a}^\dagger \hat{b}, \quad \hat{J}_- = \hat{a} \hat{b}^\dagger. \quad (5.6)$$

Если оператор \hat{b} уничтожает частицы с $s_z = -1/2$ в то время как \hat{a}^\dagger создает частицы с $s_z = +1/2$, их произведение увеличивает общую проекцию J_z системы на 1, как и должно быть для \hat{J}_+ . Число шагов $n_{a,b}$ являются собственными числами операторов $\hat{N}_{a,b}$ для двух видов квантов, а их разность дает оператор \hat{J}_z ,

$$\hat{N}_a = \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad \hat{N}_b = \hat{b}^\dagger \hat{b}, \quad \hat{J}_z = \frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{b}^\dagger \hat{b}). \quad (5.7)$$

Новый аспект этого представления, чего отсутствовал раньше то, что сейчас мы получили еще и оператор \hat{J} максимальной проекции, «фамилии» мультиплета, который равен половине от общего количества квантов, а не только квадрату оператора Казимира $\hat{C} = \hat{\mathbf{J}}^2$ $C = BFJ^2$ только

$$\hat{J} = \frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{b}^\dagger \hat{b}) = \frac{1}{2}(\hat{N}_a + \hat{N}_b) = \frac{\hat{N}}{2}. \quad (5.8)$$

Легко показать прямым вычислением, что операторы \hat{J}_\pm , уравнение (5.6), и \hat{J}_z , уравнение (5.7), подчиняются нормальным коммутационным соотношениям (1.25, 1.26) и оператор Казимира \hat{C} равен $(\hat{N}/2)[(\hat{N}/2) + 1]$, в согласии с (5.8). Состояния с всех неотрицательными квантовыми числами

n_a и n_b один-к-одному в соответствии (5.4) со множеством всех разрешенных мультиплетов $|JM\rangle$. Вакуумные состояния (I.11.112) по отношению к обоим типам квантов $n_a = n_b = 0$, описывают скалярный мультиплет $|J = M = 0\rangle$ и удовлетворяют

$$\hat{a}|00\rangle = \hat{b}|00\rangle = 0, \quad (5.9)$$

и произвольное состояние $|n_a n_b\rangle$ построена аналогично (I.11.121):

$$|n_a n_b\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^{n_a} (\hat{b}^\dagger)^{n_b}}{\sqrt{n_a! n_b!}} |00\rangle. \quad (5.10)$$

Перевод на язык группы $\mathcal{SU}(2)$ обеспечивает последовательное построение произвольных мультиплетов $|JM\rangle$:

$$|JM\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^{J+M} (\hat{b}^\dagger)^{J-M}}{\sqrt{(J+M)!(J-M)!}} |00\rangle. \quad (5.11)$$

Согласно (5.8), даже четное число частиц приводит к целому J , в то время как нечетное n соответствует полуцелым J . Откуда, Швингеровская конструкция обеспечивает всех унитарные неприводимые представления группы $\mathcal{SU}(2)$, используя спины 1/2 фундаментального представления как элементарные строительные блоки. Оператор \hat{a}^\dagger добавляет один спин вверх и увеличивает сумму $J+M$ оставляя разницу $J-M$ нетронутой, то есть и J и M увеличиваются на 1/2. Операторы \hat{J}_\pm , уравнение (5.6), действует внутри мультиплета просто заменяя одну частицу другой, противоположного типа.

Канонический базис для спина 1/2, $\chi_M = |J = 1/2, M\rangle$ состоит из двух базисных векторов, $M = \pm 1/2$. Иногда удобно называть их «повышающим», $\chi_{1/2} \equiv \chi_+ \equiv \uparrow$, и «понижающим», $\chi_{-1/2} \equiv \chi_- \equiv \downarrow$. Все операторы в этом пространстве - матрицы 2×2 . Алгебра (16.22) выполняется при $\hat{s} = (1/2)\vec{\sigma}$, где компоненты $\vec{\sigma}$ может быть выбрана в качестве *матрицы Паули*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -ii & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Легко проверить коммутационные соотношения (1.21) и матричные элементы (1.50"—1.55); матрицы бесследовые в соответствии с общими результатами задачи 5.1. Три матрицы имеют квадраты, равные единичной матрице, и каждая пара из них *антикоммутирует*, см. ниже (5.14).

| Задача 5.3

Покажите, что Швингеровское представление может быть записано в виде

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_{m,m'=\pm 1/2} \hat{a}_m^\dagger \mathbf{s}_{mm'} \hat{a}_{m'}, \quad (5.13)$$

где мы переименовали $\hat{a} \rightarrow \hat{a}_{1/2}$, $\hat{b} \rightarrow \hat{a}_{-1/2}$, и $\mathbf{s}_{mm'} = \langle \chi_m | \hat{\mathbf{S}} | \chi_{m'} \rangle$ стандартные матричные элементы момента импульса для $J = 1/2$. Это частный случай формы *вторичного квантования*, которая очень полезно для формализма многих тел, раздел 41.

Вместе с единичной матрицей, матрицы (5.12) образуют полный набор из четырех независимых матриц в пространстве 2×2 . В частности, их произведения тоже являются матрицами из того же набора. Это позволяет объединить всю алгебру спина в тождестве

$$\sigma_k \sigma_l = \delta_{kl} + i \varepsilon_{kl n} \sigma_n. \quad (5.14)$$

Отсюда следует, что любой оператор функции матриц Паули σ_k может быть приведен к линейному выражению, частному случаю *Задачи I.6.7*. Первый слагаемое (5.14) эрмитово и *симметричной* относительно векторных индексы k, l , второе антиэрмитово и *антисимметрично*. Часто приходится иметь дело со скалярными произведениями $(\mathbf{a} \cdot \vec{\sigma})$ матриц Паули с *не матричными* векторами. Тогда (5.14) дает

$$(\mathbf{a} \cdot \vec{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \vec{\sigma}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + i[\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \cdot \vec{\sigma}. \quad (5.15)$$

В соответствии с уравнением (5.15),

$$(\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = \mathbf{n}^2 = 1 \quad (5.16)$$

для любого единичного вектора \mathbf{n} .

Задача 5.4

Покажите, что оператор конечного вращения (16.2) для спина 1/2 может быть представлен в виде линейной формы

$$\hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha) = \exp[-i(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n})\alpha] = \exp[(-i/2)(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})\alpha] = \cos(\alpha/2) - i(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \sin(\alpha/2). \quad (5.17)$$

Решение Выполните суммирование четных и нечетных слагаемых ряда (1.5) по отдельности.

Задача 5.5

Найдите коэффициенты A (перед единичной матрицей) и $\mathbf{B} = \{B_k\}$ в разложении произвольной 2×2 матрицы \mathcal{M} на полный набор $\{\sigma_k, 1\}$,

$$\mathcal{M} = A + (\mathbf{B} \cdot \vec{\sigma}). \quad (5.18)$$

Решение Как следует из (5.14),

$$\text{tr}(\sigma_k \sigma_l) = 2\delta_{kl}. \quad (5.19)$$

Поэтому

$$A = \frac{1}{2} \text{tr} \mathcal{M}, \quad B_k = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathcal{M} \sigma_k). \quad (5.20)$$

Отсюда легко получить разложение (5.18) любой (не особой) матричной функции $f(a + \mathbf{b} \cdot \vec{\sigma})$. В этом случае

$$A = \frac{1}{2} [f(a + b) + f(a - b)], \quad \mathbf{B} = \frac{\mathbf{b}}{2b} [f(a + b) - f(a - b)], \quad (5.21)$$

где b это длина вектора \mathbf{b} .

Задача 5.6

Найдите собственные значения оператора $\hat{O} = (\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{\ell}})$, где $\hat{\vec{\ell}}$ — орбитальный момент оператора.

Решение Рассмотрим оператор \hat{O}^2 и применим алгебру (5.15),

$$\hat{O}^2 = \hat{\ell}_i \hat{\ell}_j \sigma_i \sigma_j = \hat{\ell}^2 + i \varepsilon_{ijk} \hat{\ell}_i \hat{\ell}_j \sigma_k. \quad (5.22)$$

Теперь мы должны принять во внимание, что компоненты $\hat{\vec{\ell}}$ не коммутируют. Из-за антисимметрии ε_{ijk} ,

$$\hat{O}^2 = \hat{\ell}^2 + \frac{i}{2} \varepsilon_{ijk} [\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] \sigma_k = \hat{\ell}^2 + \frac{i}{2} \varepsilon_{ijk} i \varepsilon_{ijn} \hat{\ell}_n \sigma_k = \hat{\ell}^2 - (\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{\ell}}). \quad (5.23)$$

Поскольку $\hat{\ell}^2$ коммутирует со скалярным оператором \hat{O} , можно подставить его вместе с собственным значением и получить квадратное уравнение,

$$\hat{O}^2 + \hat{O} - \ell(\ell + 1) = 0, \quad (5.24)$$

с корнями (собственные значения \hat{O} при заданном ℓ),

$$O_+ = \ell, \quad O_- = -(\ell + 1). \quad (5.25)$$

5.3 Спиноры

В представлении (5.12), матрица $\sigma_z = 2s_z$ диагональная. Принимая базисные состояния χ_{\pm} в качестве собственных состояний σ_z с собственными значениями ± 1 , получаем наш канонический базис углового момента с z в качестве оси квантования. В представление соответствующим матрицам (5.12), базисные состояния $|s = 1/2, s_z = m = \pm(1/2)\rangle$ являются двухкомпонентными столбцами

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$

В то время, как вращательное преобразование *векторных* компонент соответствующих спину $s = 1$ было дано в *Задаче 1.2* и гл. 1.8, состояния (5.26) преобразуются при вращениях оператором (5.17). Такие объекты включающие фундаментальное представление алгебры $SU(2)$ называются *спинорами*. Любое состояние со спином $1/2$ может быть представлено в виде суперпозиции

$$\chi = \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} = a_+ \chi_+ + a_- \chi_- \quad (5.27)$$

базовых спиноров (5.26) с верхней (нижней) компонентой a_+ (a_-) дающей амплитуду нахождения величины s_z равна $1/2$ ($-1/2$). Начиная с состояния χ_+ (спин *поляризованный* вдоль оси z) и применения различных вращений (5.17), можно получить состояния с любой ориентацией спина.

Задача 5.7

Построить состояние со спином $1/2$ поляризованное вдоль оси \mathbf{n} , который определяется полярным углом θ и азимутальный углом φ .

Решение Используя геометрическую картину вращений, применим последовательные вращения $\hat{R}_z(\varphi)\hat{R}_y(\theta)$ в состояние χ_+ . Мы ожидаем, что эта операция изменит направление вектора спина от оси z к оси \mathbf{n} . С матрицами вращения (5.17) в явной форме получаем

$$\chi_{\mathbf{n}} \equiv \hat{R}_z(\varphi)\hat{R}_y(\theta) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \theta/2 \\ e^{i\varphi/2} \sin \theta/2 \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

Как легко проверить непосредственным вычислением, что это, действительно, состояние со спином ориентированным в направлении $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$:

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})\chi_{\mathbf{n}} = \chi_{\mathbf{n}}. \quad (5.29)$$

Вместо вращения, можно прямо решить задачу нахождения собственных значений (5.29).

Любой нормированный спинор χ характеризуется двумя комплексными амплитудами a_{\pm} с $|a_+|^2 + |a_-|^2 = 1$, то есть тремя вещественными параметрами. Они всегда могут быть выбраны в терминах углов θ и φ , так что спинор приобретают вид (5.28) и бесполезную общую фазу. Изменив формулировку этого результата, мы приходим к важному выводу: для любого спинора существует направление \mathbf{n} такое, что спинор удовлетворяет уравнению (5.29). Это означает, что частицы со спином $1/2$ всегда *полностью поляризованного* в некотором направлении. (Такое утверждение не верно на высших спинах.) Согласно (5.28), для состояния, поляризованного вдоль \mathbf{n} , анализатор, ориентированный вдоль оси z , обнаружит интенсивность, доля которой составляет $\cos^2 \theta/2$ от полной интенсивности.

Задача 5.8

Используя общий результат *Задачи 6.11*, найти проекционные операторы $\hat{\Lambda}_{\pm}$, которые проектируют из любого спинора χ компоненту с $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \pm 1$.

Решение

$$\hat{\Lambda}_{\pm}(\mathbf{n}) = \frac{1}{2}(1 \pm \vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}). \quad (5.30)$$

Эти операторы удовлетворяют общие свойства проекторов, раздел I.6.11,

$$\hat{\Lambda}_{\pm}^2 = \hat{\Lambda}_{\pm}, \quad \hat{\Lambda}_+ \hat{\Lambda}_- = \hat{\Lambda}_- \hat{\Lambda}_+ = 0, \quad (5.31)$$

и

$$\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n} (\hat{\Lambda}_{\pm}(\mathbf{n}) \chi) = \pm (\hat{\Lambda}_{\pm}(\mathbf{n}) \chi). \quad (5.32)$$

Задача 5.9

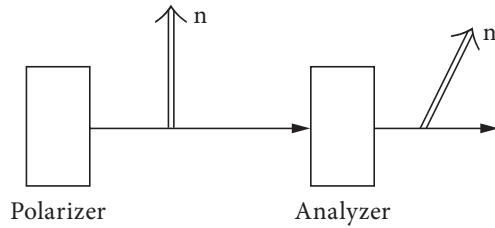
Пучок частиц со спином $1/2$ поляризованный в направлении $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$ проходит через анализатор, который пропускает только частицы поляризованные вдоль направления $\mathbf{n}'(\theta', \varphi')$, рис. 5.2. Найти коэффициент прохождения (доля передаваемой интенсивности).

Решение Коэффициент прохождения определяется как

$$T_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} = \left| \langle \chi_{\mathbf{n}'} | \chi_{\mathbf{n}} \rangle \right|^2, \quad (5.33)$$

где спиноры поляризованных частиц даются уравнением (5.28). Прямое перемножение спиноров дает

$$T_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} = \frac{1}{2} [1 + \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')] \equiv \frac{1 + (\mathbf{n}' \cdot \mathbf{n})}{2}. \quad (5.34)$$

Рис. 5.2. Схема эксперимента для *Задачи 5.9*

Конечно, прохождение не может изменяться при вращении всего устройства, поляризатор + анализатора, как единого целого. Поэтому это должна быть функция только доступных в задаче *скаляров*, а именно $(\mathbf{n}' \cdot \mathbf{n})$, зависящая от относительный угол между векторами \mathbf{n} и \mathbf{n}' . Для совпадающей поляризации, $\mathbf{n}' = \mathbf{n}$, мы должны иметь $T = 1$ в то время как передача обращается в нуль при $\mathbf{n}' = -\mathbf{n}$, когда поляризатор и анализатор состояний ортогональны. Будучи зависимым только от угла γ между поляризатором и анализатором, результат (5.34) можно записать в виде

$$T_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} = \cos^2 \frac{\gamma}{2}. \quad (5.35)$$

Обратите внимание, что для фотонов ответ на подобный вопрос будет $\cos^2 \gamma$. Это отражает геометрическую разницу между частицами со спином 1/2 и спином 1 (фотоны). Только скалярные и векторные операторы могут иметь ненулевое среднее значение для состояний со спином 1/2, см. далее, гл. 22. Поэтому векторы \mathbf{n} и \mathbf{n}' могут входить в ответ (5.34) только линейно. Результат (5.34) может быть угадан немедленно при сравнении со стандартным представлением (5.28), что дает вероятность $\cos^2(\theta/2)$ для анализатора, ориентированного вдоль оси z ; поскольку выбор квантования оси произволен, то результат (5.35) очевиден.

Задача 5.10

Найдите матричные элементы $\langle \chi_m | \hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha) | \chi_{m'} \rangle$ оператора конечных поворотов, уравнение (5.17) на угол α вокруг оси \mathbf{n} , характеризующейся полярным углом θ и азимутальный угол φ .

Решение m и m' принимают значения $\pm 1/2$, а соответствующие спиноры - столбцы (5.26). Удобно записать скалярного произведения $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})$ в операторе

вращения как

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = \sigma_z n_z + \frac{1}{2}(\sigma_+ n_- + \sigma_- n_+), \quad (5.36)$$

где

$$\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y, \quad n_{\pm} = n_x \pm in_y = \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \quad n_z = \cos \theta. \quad (5.37)$$

Диагональные матричные элементы равны

$$\begin{aligned} \langle \chi_m | \hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha) | \chi_m \rangle &= \cos(\alpha/2) - in_z \sin(\alpha/2) \langle \chi_m | \sigma_z | \chi_m \rangle \\ &= \cos(\alpha/2) \mp i \sin(\alpha/2) \cos \theta, \quad m = \pm \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Недиагональные матричные элементы содержат операторы $\sigma_{\pm} = 2s_{\pm}$;

$$\langle \chi_+ | \hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha) | \chi_- \rangle = -i \sin(\alpha/2) \sin \theta e^{-i\varphi}, \quad (5.39)$$

$$\langle \chi_- | \hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha) | \chi_+ \rangle = -i \sin(\alpha/2) \sin \theta e^{i\varphi}. \quad (5.40)$$

Матрица вращения *Задачи 5.10* отвечает на все возможные вопросы связанные с геометрией спина $1/2$. Таким образом, для получения результата *Задачи 20.9*, нам нужна амплитуда вероятности нахождения проекции m' на оси \mathbf{n}' для состояния с проекцией m на оси \mathbf{n} . Предполагая, что плоскость, определяемая этими двумя направлениями - это плоскость xz , мы может вращаться на угол γ вокруг оси y объединяя направления поляризатора и анализатора. Использование в уравнениях (5.38)-(5.40) $\theta = \pi/2$ and $\varphi = \pi/2$ как углов оси вращения и $\alpha = \gamma$, мы приходим к вероятностям $\cos^2(\gamma/2)$, $m \rightarrow m$, and $\sin^2(\gamma/2)$, $m \rightarrow -m$.

Задача 5.11

В эксперименте Штерна-Герлаха анализируется пучок атомов со спином J путем его разложения на $(2J+1)$ компонентов с различными проекциями M' на направление неоднородного магнитного поля, рис. 5.3. Первоначально, все атомы были в состоянии с максимальной проекцией $M = J$ на оси z .

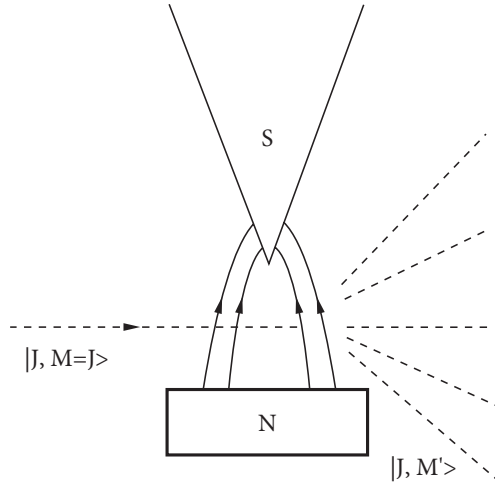


Рис. 5.3. Эксперимент Штерна-Герлаха

Каковы относительные интенсивности расщепленного пучка, если полярный угол направления магнитного поля θ ?

Решение Как упоминалось ранее, любое состояние момента J можно построить с помощью $2J$ частиц со спином $1/2$. В исходном состоянии пучка все составляющие имеют проекции $s_z = 1/2$ выровненные вдоль оси z так, что $J_z = (2J) \times (1/2) = J$. Для каждой из них вероятность иметь проекцию $s_{z'} = +1/2$ на ось поля равна $\cos^2(\theta/2)$, в то время как вероятность $s_{z'} = -1/2$ равна $\sin^2(\theta/2)$. Чтобы получить полную проекцию M' , среди $2J$ частиц $(J + M')$ из них должны иметь $s_{z'} = +1/2$, а $(J - M')$ должны иметь $s_{z'} = -1/2$. Чтобы получить общую вероятность определенного значения M' мы должны принять во внимание количество возможных способов для выбора $(J + M')$ или $(J - M')$ частицами от полного число $(2J)$. В результате, интенсивность пучка с проекцией M' равна

$$T(M'|M = J) = \frac{(2J)!}{(J + M')!(J - M')!} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} \right)^{J+M'} \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} \right)^{J-M'}. \quad (5.41)$$

Легко проверить, что эти интенсивности правильно нормированы,

$$\sum_{M'=-J}^J T(M'|M = J) = 1, \quad (5.42)$$

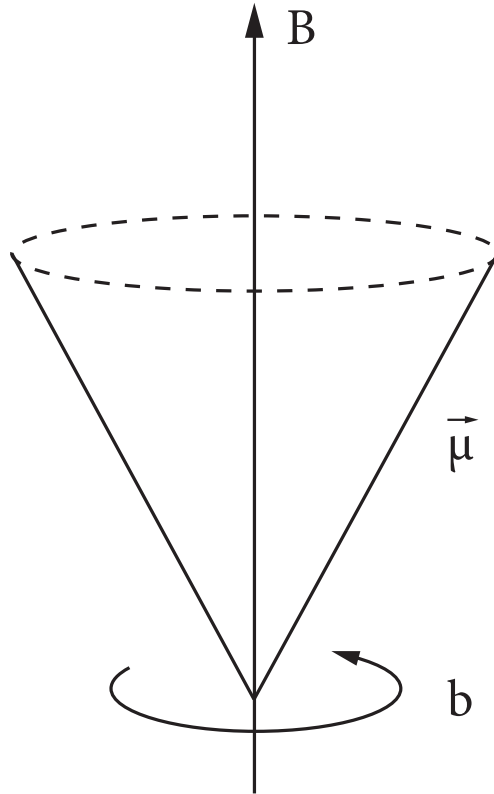


Рис. 5.4. Магнитный резонанс — конфигурация поля

и наши предыдущие результаты для $J = 1/2$ и для $J = 1$ являются частными случаями этого, более общего утверждения.

5.4 Магнитный резонанс

Во внешнем магнитном поле спин ведет себя как любой другой вектор углового движения с магнитным моментом, раздел 1.11. Теперь рассмотрим более сложное расположение *зависящих от времени* магнитных полей.

Пусть система спином $1/2$ помещена в статическое поле B_z и *вращающееся* поле B_{\perp} в поперечной плоскости (xy) , рис. 5.4,

$$B_x = b \cos(\omega t), \quad B_y = b \sin(\omega t). \quad (5.43)$$

Частицы взаимодействуют с магнитным полем посредством их магнитного момента

$$\hat{\vec{\mu}} = g_s \hbar \hat{\vec{s}} = \frac{g_s}{2} \hbar \vec{\sigma} \equiv \mu \vec{\sigma}, \quad (5.44)$$

где гиромагнитное отношение g_s , или эффективный магнитный момент $\mu = g_s \hbar/2$, является внутренним свойством системы. Время-зависимый Гамильтониан (1.159), действующий на спиновые переменные равен

$$\hat{H}(t) = -(\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}) = -\mu\{\sigma_z B_z + \sigma_x b \cos(\omega t) + \sigma_y b \sin(\omega t)\}. \quad (5.45)$$

Волновая функция частицы, спинор $\chi(t)$ с верхней компонентой $a_+(t)$ и нижней компонентой $a_-(t)$, которые дают амплитуды вероятности нахождения в момент t проекции спина $s_z = \pm(1/2)$ на направление статического поля B_z . Простая картина прецессии больше неверна поскольку проекция s_z больше не сохраняется: поперечная составляющая магнитного поля может *изменять* спин между состояниями $s_z = \pm(1/2)$ в результате действия крутящего момента $[\vec{\mu} \times \vec{B}_\perp]$.

Уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi(t) = \hat{H}(t) \chi(t) \quad (5.46)$$

для компонент спинора $a_\pm(t)$, после использования явного вид матриц Паули, приводит к системе двух связанных линейных дифференциальных уравнений,

$$i\hbar \dot{a}_+ = -\mu B_z a_+ - \mu b e^{-i\omega t} a_-, \quad i\hbar \dot{a}_- = \mu B_z a_- - \mu b e^{i\omega t} a_+. \quad (5.47)$$

Задача 5.12

Решите уравнения (5.47) с начальным условием, что при $t = 0$, мы начинаем со спина вверх, $s_z = 1/2$.

Решение Самый простой способ точного решения связан с заменой переменных, которая устраняет явную зависимость от времени коэффициентов в уравнении (5.46),

$$a_\pm(t) = e^{\mp(i/2)\omega t} c_\pm(t), \quad (5.48)$$

путем перехода к «вращающейся» системе координат, вспомните теорему Лармора классической электродинамики [3], § 45. Эта трансформация приводит к системе линейных уравнений с *постоянными* коэффициентами,

$$i\dot{c}_+ = -\omega' c_+ - \omega_\perp c_-, \quad i\dot{c}_- = \omega' c_- - \omega_\perp c_+, \quad (5.49)$$

где мы используем короткие обозначения для различных частот, частоты прецессии в статическом поле

$$\omega_z = \frac{\mu \mathcal{B}_z}{\hbar}, \quad (5.50)$$

характерная частота прецессии вокруг поперечного поля,

$$\omega_{\perp} = \frac{\mu b}{\hbar}, \quad (5.51)$$

и эффективная частота вращающейся системы координат,

$$\omega' = \omega_z + \frac{\omega}{2}. \quad (5.52)$$

Теперь мы можем искать частное решение системы (5.49) как

$$c_+(t) = X e^{-i\Omega t}, \quad c_-(t) = Y e^{-i\Omega t} \quad (5.53)$$

и находим две собственные частоты,

$$\Omega_{\pm} = \pm \sqrt{\omega'^2 + \omega_{\perp}^2} \equiv \pm \Omega, \quad (5.54)$$

и отношение амплитуд для двух мод (5.54),

$$Y_{\pm} = -\frac{\omega_{\perp}}{\Omega_{\pm} - \omega'} X_{\pm}. \quad (5.55)$$

Фактическое решение представляет собой суперпозицию двух нормальных мод с амплитудами удовлетворяющими начальным условиям. Если изначально $a_+(0) = 1$ и $a_-(0) = 0$, тогда

$$c_+(t) = \frac{\Omega - \omega'}{2\Omega} e^{-i\Omega t} + \frac{\Omega + \omega'}{2\Omega} e^{i\Omega t}, \quad c_-(t) = i \frac{\omega_{\perp}}{\Omega} \sin(\Omega t). \quad (5.56)$$

Вероятность нахождения спина с поляризацией противоположной исходной, равна

$$w_-(t) = |a_-(t)|^2 = |c_-(t)|^2 = \frac{\omega_{\perp}^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t) = \frac{\omega_{\perp}^2}{\omega'^2 + \omega_{\perp}^2} \sin^2(\Omega t). \quad (5.57)$$

Эта вероятность меньше единицы, за исключением случая *резонанса*,

$$\omega' = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \hbar\omega = -2\hbar\omega_z = \Delta E, \quad (5.58)$$

когда частота переменного поля совпадает с частотами переходов между уровнями расщепленными основным статическим полем B_z .

Поглощение энергии поперечного поля как функции от его частоты ω имеет типичную форму резонанса шириной ω_\perp . Резонанс очень узкий, когда $b \ll B_z$, типичная ситуация для электронного спинового резонанса и ядерного магнитного резонанса. Таким образом, центр тяжести этой узкой кривой определяет магнитный момент системы μ .

5.5 Преобразование обращения времени и теорема Крамера

Для частиц с внутренними степенями свободы такими, как спин, необходимо определить унитарную матрицу \hat{U}_T , которая бы обеспечила правильное преобразование таких переменных при обращении времени, раздел 8.2. Любой оператор углового момента \mathbf{J} является \mathcal{T} -нечетным,

$$\hat{\hat{\mathbf{J}}} = \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{U}_T\hat{\mathbf{J}}^*\hat{U}_T^{-1} = -\hat{\mathbf{J}}. \quad (5.59)$$

Для орбитального момента, $\hat{\vec{\ell}}$, это следует из преобразования импульса $\hat{\mathbf{p}}$, уравнение (8.12). Но нам нужно дополнительный оператор \hat{U}_T правильно преобразовывающий спиновую часть углового момента.

В стандартное представление матриц Паули (5.12), только одна из них, σ_y , мнимая, в то время σ_x и σ_z являются вещественными. Это соответствует обычному выбору фазы матричных элементов углового момента (1.52)-(1.54), когда понижающая, $\hat{J}_x - i\hat{J}_y$, и повышающая, $\hat{J}_x + i\hat{J}_y$, комбинации имеют вещественные матричные элементы (16.51). В этом представлении можно получить

$$\hat{U}_T = \eta_T \sigma_y \quad (5.60)$$

с произвольный фазовым множителем η_T , $|\eta_T|^2 = 1$, в качестве унитарного оператора выполняющего обращение времени. Используя тождество (5.14) включающее всю алгебру матриц Паули, легко проверить, что

$$\hat{\hat{\mathbf{s}}} = \hat{U}_T\hat{\mathbf{s}}^*\hat{U}_T^{-1} = -\hat{\mathbf{s}}, \quad (5.61)$$

как это должно быть при обращении времени (5.59).

Рассмотрим систему из N частиц со спином $1/2$. Естественным обобщением (5.60) должно быть

$$\hat{U}_T = (\eta_T)^N \sigma_y(1) \cdots \sigma_y(N), \quad (5.62)$$

поскольку спиновые переменные всех частиц будут обращены. Принимая во внимание, что матрица σ_y мнимая и $\sigma_y^2 = 1$, найдем для этой системы

$$\hat{T}^2 = \hat{U}_T \hat{K} \hat{U}_T \hat{K} = (-)^N. \quad (5.63)$$

Пусть система с \mathcal{T} -инвариантным гамильтонианом находится в стационарном состоянии Ψ . Если это состояние не вырождено, оно может быть изменено при обращении времени не более чем на фазовый множитель, $\hat{T}\Psi = \exp(i\alpha)\Psi$. Но тогда

$$\hat{T}^2\Psi = \hat{T}(e^{i\alpha}\Psi) = e^{-i\alpha}\hat{T}\Psi = e^{-i\alpha}e^{i\alpha}\Psi = \Psi. \quad (5.64)$$

Следовательно, для невырожденных состояний $\hat{T}^2 = 1$ независимо от числа частиц. Согласно (5.63), это означает, что система с *нечетным* числом частиц со спином $1/2$ не может иметь невырожденные стационарные состояния. Мы пришли к *теореме Крамера*: стационарные состояния \mathcal{T} -инвариантной системы из нечетного числа частиц со спином $1/2$ являются *вырожденными*, по крайней мере двукратно. В простейшем случае одной частицы, при отсутствии спин-зависимых сил, это всего лишь вырождение спиновых состояний χ_{\pm} .

Вырождение Крамера может быть снято внешним полем нарушающим инвариантность относительно обращения времени. Внешнее *электрическое* поле оставляет минимум двукратное вырождение. Однако, *магнитное* поле изменяет знак при обращении времени. Система во внешнем магнитном поле \vec{B} не инвариантна относительно обращения времени и вырождение снимается. Если источник (ток) создающий магнитное поле \vec{B} является частью рассматриваемой системы, так что полная операция обращения времени включает в себя $\vec{B} \rightarrow -\vec{B}$, вся система снова становится \mathcal{T} -инвариантной. Тогда вырождение восстанавливается, потому что для каждого состояния $|\Psi; \vec{B}\rangle$ есть сопряженное состояние $|\tilde{\Psi}; -\vec{B}\rangle$ с такой же энергии. Если система закручена извне, угловая скорость $\vec{\Omega}$ также меняет знак при обращении времени, и ситуация такая же, как для магнитного поля.

5.6 Состояния сопряженные по времени

Как мы видели в предыдущем разделе, поведение волновой функции при обращении времени зависит от спина состояния и от представления. Мы

будем использовать представление, где спиноры преобразуются согласно матрице \hat{U}_T уравнения (5.60) с фазовым множителем $\eta_T = -i$. Для частиц со спином 1/2, оператор поворота на угол α вокруг оси \mathbf{n} был найден в экв. (5.17). Таким образом, при нашем выборе η_T , оператор обращения времени совпадает с вращением вокруг оси y на угол 180° ,

$$\hat{U}_T = \hat{\mathcal{R}}_y(\pi). \quad (5.65)$$

Действуя на спинор χ_m с $s_z = m = \pm(1/2)$, оператор \hat{U}_T изменяет $m \rightarrow -m$, а фазовый множитель дает

$$\hat{U}_T \chi_+ = \chi_-, \quad \hat{U}_T \chi_- = -\chi_+, \quad (5.66)$$

который может быть выражен как

$$\hat{U}_T \chi_m = (-)^{1/2-m} \chi_{-m}. \quad (5.67)$$

Мы знаем, что, по отношению к вращениям, система с угловым моментом J можно считать как изготовленную из $2J$ спинов 1/2. Изучая поведение при обращении времени, мы должны, как и при доказательстве теоремы Крамера, выполнить преобразование (5.67) для каждого спина. В результате, состояние $|JM\rangle$ изменяет знак M и приобретает фазовый множитель с показателем $\sum(1/2 - m) = J - M$. Таким образом, определение время-сопряженного состояния, в соответствии с (5.67), следующее

$$|\widetilde{JM}\rangle = U_T |JM\rangle = (-)^{J-M} |J - M\rangle. \quad (5.68)$$

Заметим, что второе обращение времени восстановило бы первоначальное состояние $|JM\rangle$ с фазовым множителем $(-)^{2J}$ равна 1 для целого J и -1 для полуцелого J , в согласии с теоремой Крамера (5.63). Это может быть записано в виде

$$\mathcal{T}^2 = (-)^{2J}. \quad (5.69)$$

Мы увидим появление фазы (5.68) в векторной связи углового момента, когда это имеет отношение к обращенному движению, $\mathbf{J} \rightarrow -\mathbf{J}$. Определение (5.68) согласуется с вариантами выбора фазы матричных элементов углового момента и коэффициентов векторной связи, раздел 7.5. К сожалению, традиционное определение сферических функций $Y_{\ell m}$ отличается от предложенного формулой (5.68). Поскольку $Y_{\ell m}$ функции координат,

они подвергаются комплексному сопряжению при обращении времени, и множитель относительной фазы равен $(-)^m$,

$$Y_{\ell m}(\mathbf{n}) \Rightarrow Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}) = (-)^m Y_{\ell -m}(\mathbf{n}), \quad (5.70)$$

вместо $(-)^{\ell-m}$ как это было бы в соответствии с правилом (5.68). Это было причиной для изменения определения сферических гармоник, использованных многими авторами, например, в [12], где дополнительный фактор i^ℓ добавлен к обычному выражению $Y_{\ell m}$. Тогда комплексное сопряжение согласуется с уравнением (5.68), так как $(i^\ell)^* = (-)^{\ell} i^\ell$. Необходимо быть осторожным в использовании фазовых конвенций различных авторов.

5.7 Спиноры как кубиты

Квантовая информация и квантовые системы связи, одна из наиболее быстро развивающихся областей применения для квантовой физики. Бинарная система построена из чисел 0 и 1 используется для классических вычислений. Мы можем установить соответствие между этими двумя числами и двумя возможными состояниями χ_{\pm} спина 1/2 определена в некотором представлении характеризующимся выбором осей квантования. Выбранное представление обычно называется *вычислительным базисом*. Физическая реализация спиноров не ограничена частицами со спином 1/2. Элементарная двойная система может быть реализована очень различающимися физическими системами, которые имеют два квантовых состояний достаточно изолированных от других состояний; алгебра Паули универсальна.

Произвольное состояние спинора представляет собой суперпозицию (5.27) и, следовательно, содержит *одновременно* обе возможности, 0 и 1, с различными вероятностями, которые могут быть выявлены при проведении измерений. До того, как измерение сделано, мы можем манипулировать со спинорами различными внешними полями сохранив оба возможных результата. Расширяя эту идею на множество N связанных спиноров, где в общей сложности 2^N состояний возможны, мы бы манипулировали ими всеми одновременно, необычайно сильно увеличивая вычислительную мощь. Индивидуальный спинор играет роль элементарного вычислительного блока, квантового бита (*кубита*). Эволюция спинора(-ов) осуществляется за счет применения унитарных операторов; как мы знаем из предыдущих разделов, все они могут быть сведены к комбинации матриц Паули, и достаточно рассмотреть их действие в вычислительном базисе. В унитарной эволюции, норма волновой функция сохраняется — это именно то, что мы хотели бы, для управления всеми квантовыми вероятностями одновременно.

Язык квантовых вычислений был создан под сильным влиянием математической информатики, хорошо развитой для классических компьютеров. Унитарные операторы изменяющие состояния кубита называется *логическими вентилями*. Самые простые классические вентилями — *NOT*, которые изменяют значение кубита на противоположное, $0 \Leftrightarrow 1$. Для спинорам используемых в вычислительном базисе, аналогичная операция выполняется матрицей Паули σ_x ,

$$\sigma_x \begin{pmatrix} a_+ a_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_- a_+ \end{pmatrix}. \quad (5.71)$$

В частности, базисные состояния преобразуются как $\chi_{\pm} \leftrightarrow \chi_{\mp}$, как в классическом компьютере. В информатике, вместо $\sigma_{x,y,z}$, используются обозначения X, Y, Z , но здесь нам не нужно отказываться от нашей старой системы обозначений. Таким образом, σ_x может быть названа квантовым *NOT* вентилем. Поскольку квантовое состояние любого спинора описывается соответствующим вектором поляризации $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$, иногда полезно использовать эти углы, описывающая квантовые эволюции как движение этого *вектора Блоха* по сфере единичного радиуса. Операция σ_x изменяет $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\varphi \rightarrow 2\pi - \varphi$.

Еще один широко используемый *вентиль Адамара* дается матрицей

$$\mathcal{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x + \sigma_z). \quad (5.72)$$

Из-за того, что σ_z и σ_x антикоммутируют, $\mathcal{H}^2 = 1$. Легко видеть, что оператор \mathcal{H} преобразует произвольные спиноры $a_+ \chi_+ + a_- \chi_-$, где использован вычислительный базис с осью квантования z , в той же суперпозиции $a_+ \chi_x + a_- \chi_{-x}$ состояний, поляризованных вдоль оси x и в противоположном направлении.

Задача 5.13

Опишите действие вентиля Адамара на состояние χ_x в терминах вектора Блоха на единичной сфере.

Идея возможных операций для системы из нескольких кубитов может быть проиллюстрирована примером двух спиноров. У нас есть четыре доступных комбинированных состояния, которые могут быть помечены, в вычислительном базисе, как

$$|++\rangle, \quad |+-\rangle, \quad |-+\rangle, \quad |--\rangle. \quad (5.73)$$

Общая волновая функция этой системы в виде линейной комбинации из состояний (5.73) не может быть выражена как произведение $|\chi_1\rangle \cdot |\chi_2\rangle$

двух независимых волновых функций: подсистемы *запутаны* (подробнее о запутанности будет сказано в последней главе, раздел IV.15.1). Теперь мы можем построить оператор называемый *Контролируемый NOT вентиль*, или, короче, *CNOT* (иногда также называется *Контролируемый-X*), действующий в четырехмерном пространстве (5.73):

$$\hat{U}_{CNOT} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.74)$$

В этой матрице базисные состояния отсортированы в соответствии с линией (5.73), а оператор не может быть представлена как произведение операторов действующих независимо на первом и втором кубитах.

Назовем, с помощью обычного языка, первый кубит «управление» а второй «цель». Теперь мы можем видеть, как оператор \hat{U}_{CNOT} действует: если элемент управляющий кубит находится в состоянии $|1\rangle$, что означает $|+\rangle_1$, спин вверх, тогда \hat{U}_{CNOT} не изменит состояние кубита-цели, так что

$$|++\rangle \Rightarrow |++\rangle, \quad |+-\rangle \Rightarrow |+-\rangle. \quad (5.75)$$

Более того,

$$\hat{U}_{CNOT}|++\rangle = \hat{U}_{CNOT} \begin{pmatrix} 1000 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1000 \end{pmatrix} = |++\rangle, \quad (5.76)$$

и

$$\hat{U}_{CNOT}|+-\rangle = \hat{U}_{CNOT} \begin{pmatrix} 0100 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0100 \end{pmatrix} = |+-\rangle, \quad (5.77)$$

В отличии от этого, если спин управляющего кубита направлен вниз, $|-\rangle_1$, действие \hat{U}_{CNOT} переворачивает состояния кубита-мишени,

$$\hat{U}_{CNOT}| - + \rangle = | - - \rangle, \quad \hat{U}_{CNOT}| - - \rangle = | - + \rangle. \quad (5.78)$$

Используя один кубит контроля и несколько кубитов целей, можно генерировать произвольную эволюцию состояний кубита. Для этой цели, в принципе, достаточно использовать *CNOT* вентиль и вентили, действующие на единичные кубиты. По аналогии с *CNOT* можно сконструировать *Контролируемую- \hat{U}* операцию для произвольного унитарного оператора \hat{U} таким образом, что для состояния вверх кубита управления ничего не

изменится в целевых кубитов, в то время как для состояния вниз кубита управления, операция \hat{U} будет воздействовать на цели.

Задача 5.14

Покажите, что оператор

$$\hat{U}_{SWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.79)$$

обменивает состояния двух кубитов: в том же самом базисе (5.73)

$$\hat{U}_{SWAP}|++\rangle = |++\rangle, \quad \hat{U}_{SWAP}|--\rangle = |--\rangle, \quad \hat{U}_{SWAP}|\pm\mp\rangle = |\mp\pm\rangle. \quad (5.80)$$

Поскольку квантовая информатика стала почти отдельной сложной и быстро развивающаяся отраслью квантовой науки, мы не можем углубляться здесь в подробности оставляя продолжение для *Дополнительной литературы*. Тем не менее имеет смысл упомянуть, что есть не только преимущества квантовых вычислений, но и серьезные (не только технические) проблемы.

Один из примеров может быть дан с помощью так называемой *теореме о невозможности клонирования квантового состояния* [19]. В то время как возможно сделать практически полную копию классического объекта («распечатать новую копию» любой, изначально подготовленной книги, на том же принтере), в квантовой механике это не всегда разрешено. Простое доказательство состоит в следующем. Попробуем сделать вторую копию квантового состояния $|\psi_1\rangle$. Мы имеем систему цели в произвольном начальном (нормированный) состоянии $|\psi_0\rangle_t$, и наша задача заключается в использовании унитарной эволюции \hat{U} , чтобы получить в качестве выходного преобразования $|\psi_0\rangle_t \Rightarrow |\psi_1\rangle_t$. Затем состояние двух наших систем развивается как

$$\hat{U}|\psi_1\rangle \cdot |\psi_0\rangle_t = |\psi_1\rangle \cdot |\psi_1\rangle_t. \quad (5.81)$$

Предположим, что нам нужно скопировать другое состояние, $|\psi_2\rangle$, с тем же копирующим аппаратом, \hat{U} ,

$$\hat{U}|\psi_2\rangle \cdot |\psi_0\rangle_t = |\psi_2\rangle \cdot |\psi_2\rangle_t. \quad (5.82)$$

Поскольку эволюция унитарна, $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$, и норма перекрытия сохраняется,

$$\mathcal{N} \equiv {}_t\langle\psi_0| \cdot \langle\psi_1|\hat{U}^\dagger \hat{U}|\psi_2\rangle \cdot |\psi_0\rangle_t = {}_t\langle\psi_0| \cdot \langle\psi_1|\psi_2\rangle \cdot |\psi_0\rangle_t = \langle\psi_1|\psi_2\rangle. \quad (5.83)$$

С другой стороны, мы знаем результаты эволюции (5.81, 5.82), так, что

$$\mathcal{N} = {}_t\langle\hat{U}\psi_0| \cdot \langle\psi_1\hat{U}\psi_2\rangle|\psi_0\rangle_t = {}_t\langle\psi_1|\psi_2\rangle_t \langle\psi_1\psi_2\rangle = \mathcal{N}^2. \quad (5.84)$$

Поэтому мы должны иметь $\mathcal{N} = 1$ или 0 , а это возможно только для клонирования именно ортогональных состояний. Другими словами, если процедура клонирования работает для двух различных состояний базиса $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$, оно не будет работать для их произвольной суперпозиции, $|\alpha\psi_1 + \beta\psi_2\rangle$. *точную* клонирование не представляется возможным даже для смешанных состояний описываемой матрицей плотности, раздел 47, а не чистой волновой функцией. Только после полной декогеренции, которая эквивалентна возврату к мир без когерентной суперпозиции состояний, мы вновь приобретем точное классическое копирование.

Еще один аспект может быть упомянуты здесь. Физики работают в поисках *масштабируемых* кубитовых систем с большим количеством составляющих, которые в принципе позволили бы нам насладиться всеми теоретическими преимуществами реалистичных квантовых вычислений. Для того, чтобы передавать и обрабатывать информацию, т.е. выполнять сложную работу, входящие в состав кубиты должны взаимодействовать. Однако взаимодействие в системе многих тел, с высокой плотностью уровней быстро приводит к *квантовому хаосу многих тел*, раздел IV.14, когда уже нет смысла говорить о квантовых состояниях отдельных кубитов. Вместо этого мы можем прийти к чрезвычайно сложным волновым функциям многих тел, которые сделают проблему распутывания необходимой информации неразрешимой. Это означает, что должны быть разработаны специальные сложные схемы для изоляции кубитов и включения их взаимодействия только на короткие временные интервалы, когда это необходимо для вычислений.

Теория углового момента по существу очень формальна. Её основными составляющими являются некоторые разделы теории групп и тензорной алгебры. На этих страницах, однако, изложение гораздо менее абстрактно, чем подразумевают эти грозные термины.

М.Е. Роуз, *Элементарная теория Углового Моментa.*

Глава 6

Конечные вращения и тензорные операторы

6.1 Матрицы конечных вращений

Любое вращение может быть представлено как экспоненциальная функция (1.2) от генераторов, компонент углового момента $\hat{\mathbf{J}}$. Никакое из них не может изменить величину J : начиная с состояния $|JM\rangle$ и совершая различные повороты, мы всегда получим набор состояний с разными M (различные ориентации конуса прецессии) и тем же самым J . Поэтому любое состояние $|JM\rangle$ преобразуется при вращении $\hat{\mathcal{R}}$ в суперпозицию состояний, принадлежащих тому же мультиплету $|JM\rangle$. Математически это может быть записано как

$$\hat{\mathcal{R}}|JM\rangle = \sum_{M'} D_{M'M}^J(\mathcal{R})|JM'\rangle, \quad (6.1)$$

где

$$D_{M'M}^J(\mathcal{R}) = \langle JM'|\hat{\mathcal{R}}|JM\rangle \quad (6.2)$$

есть матричные элементы *конечных вращений* $\hat{\mathcal{R}}$ в данном *представлении*. Здесь мы учли, что состояния $|JM\rangle$ с разными величинами M ортогональны и считали, что они нормированы, (1.48). Унитарность вращений (1.4) влечет унитарность матриц (6.1),

$$D^J(D^J)^\dagger = (D^J)^\dagger D^J = 1, \quad (6.3)$$

или, в явном виде для матричных элементов,

$$\sum_M D_{KM}^J(\mathcal{R}) D_{K'M}^{J*}(\mathcal{R}) = \delta_{KK'}, \quad \sum_K D_{KM}^{J*}(\mathcal{R}) D_{KM}^J(\mathcal{R}) = \delta_{M'M}. \quad (6.4)$$

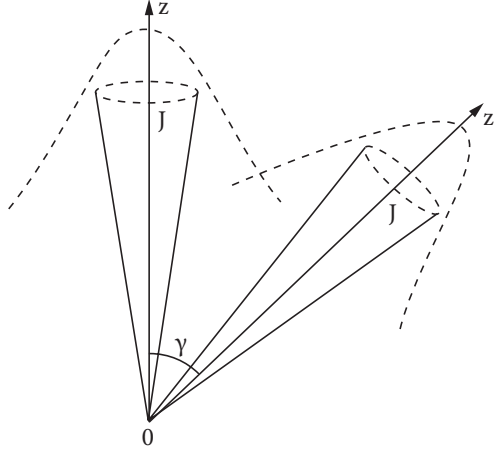


Рис. 6.1. Иллюстрация к Задаче 6.1

В задачах 5.9, 5.10 мы рассчитали эти матричные элементы для спина $1/2$; они образуют матрицу $D_{mm'}^{1/2}$.

Задача 6.1

Для системы с угловым моментом J , найти перекрытие $|\langle \psi | \psi' \rangle|$ волновых функций $|\psi\rangle$ и $|\psi'\rangle$ с максимальными проекциями $J_z = J_{z'} = J$, если угол между осями z и z' равен γ , Рис. 6.1. Рассмотрите предел очень больших J .

Решение Рассматриваемые функции связаны вращением $\hat{R}_y(\gamma)$ на угол γ вокруг оси y , перпендикулярной к плоскости (zz') . Соответствующая D -матрица обычно обозначается как $d^J(\gamma)$. Для нашей задачи,

$$\langle \psi_M | \psi_{M'} \rangle = d_{MM'}^J(\gamma). \quad (6.5)$$

Используя представление Швингера, мы видим, что для $M = M' = J$ все $2j$ составляющих спина ориентированы одинаково, так что нам нужно повернуть их все,

$$d_{JJ}^J(\gamma) = \left[\cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) \right]^{2J}. \quad (6.6)$$

В пределе $J \gg 1$ это выражение становится очень малым (произведение очень большого числа перекрытий отдельных спинов). Перекрытие может стать заметным только для очень близких направлений, $\gamma\sqrt{J} \ll 1$, как ожидается при переходе к классическому случаю.

6.2 Сферические функции как матричные элементы конечных вращений

На алгебраическом языке, матрицы (6.2) дают *унитарное представление* группы вращений размерности $(2J + 1)$. Это означает, что для вращения, выполняемого в два приема, $\hat{\mathcal{R}} = \hat{\mathcal{R}}_2 \hat{\mathcal{R}}_1$, соответствующая матрица (6.2), $D^J(\mathcal{R})$ есть произведение матриц, представляющих индивидуальные вращения, взятых в том же порядке,

$$D^J(\mathcal{R}) = D^J(\mathcal{R}_2) D^J(\mathcal{R}_1). \quad (6.7)$$

Все геометрические свойства вращений однозначно отражены в соотношениях между соответствующими матрицами. Поэтому единичная матрица соответствует вращению на нулевой угол, а для обратного вращения $D^J(\mathcal{R}^{-1}) = (D^J(\mathcal{R}))^{-1}$. Матричный элемент удовлетворяет соотношению

$$D_{M'M}^J(\mathcal{R}^{-1}) = (D^J(\mathcal{R}))_{M'M}^\dagger = D_{MM'}^{J*}(\mathcal{R}). \quad (6.8)$$

Представление D^J *неприводимо*: мультиплет $|JM\rangle$ размерности $2J + 1$ не содержит никакого подмножества состояний, которое преобразуется само через себя при *всех* вращениях. То обстоятельство, что унитарные представления являются многомерными, за исключением случая скаляра $J = 0$, есть следствие некоммутативности генераторов (группа $SU(2)$ *неабелева*). Как мы помним, унитарные представления абелевых групп, например, группы трансляций, одномерны.

Конечные вращения могут быть параметризованы различными способами как непрерывные функции углов. Две часто используемые параметризации есть (i) в терминах оси поворота $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$ и угла α поворота вокруг этой оси, и (ii) при помощи *углов Эйлера* [4], в этом случае D -матрицы называются *функциями Вигнера*. В любом случае, вращения трехмерного пространства требуют для своего описания трёх независимых углов [в d -мерном пространстве число независимых плоскостей вращения равно $d(d - 1)/2$, числу генераторов \hat{J}_k группы вращения $\mathcal{SO}(d)$]. Мы увидим, что сферические функции $Y_{\ell m}$ можно рассматривать как частный случай матриц конечных вращений.

6.2 Сферические функции как матричные элементы конечных вращений

Сферические гармоники $Y_{\ell m}(\mathbf{n})$ есть волновые функции состояний $|\ell m\rangle$ (описываемых в системе координат с фиксированной осью квантования) в координатном представлении,

$$Y_{\ell m}(\mathbf{n}) \equiv \langle \mathbf{n} | \ell m \rangle. \quad (6.9)$$

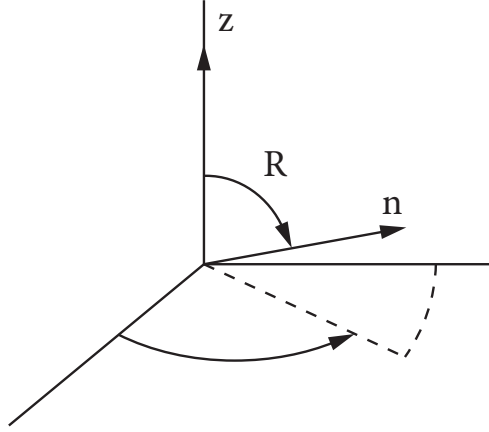


Рис. 6.2. Вращение, определяющее сферическую функцию

Пусть $\hat{\mathcal{R}}$ есть вращение, Рис. 6.2, которое переводит вектор \mathbf{e}_z оси квантования в новое направление \mathbf{n} ,

$$\hat{\mathcal{R}}\mathbf{e}_z = \mathbf{n}(\theta, \varphi). \quad (6.10)$$

Вращение $\hat{\mathcal{R}}^{-1}$, обратное к (6.10), действуя на состояние $|\ell m\rangle$, переводит его в суперпозицию состояний мультиплетта в соответствии с общим правилом (6.1):

$$\hat{\mathcal{R}}^{-1}|\ell m\rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^{\ell}(\mathcal{R}^{-1})|\ell m'\rangle. \quad (6.11)$$

Координатное представление этого равенства получается проектированием вектора \mathbf{n}_0 локализованного состояния,

$$\langle \mathbf{n}_0 | \hat{\mathcal{R}}^{-1} | \ell m \rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^{\ell}(\mathcal{R}^{-1}) \langle \mathbf{n}_0 | \ell m' \rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^{\ell}(\mathcal{R}^{-1}) Y_{\ell m'}(\mathbf{n}_0). \quad (6.12)$$

Используя унитарность вращений, запишем левую часть этого равенства как

$$\langle \mathbf{n}_0 | \hat{\mathcal{R}}^{-1} | \ell m \rangle = \langle \hat{\mathcal{R}}\mathbf{n}_0 | \ell m \rangle = Y_{\ell m}(\mathcal{R}\mathbf{n}_0). \quad (6.13)$$

Направление \mathbf{n}_0 произвольно. Беря значение функции в направлении полярной оси, $\mathbf{n}_0 \rightarrow \mathbf{e}_z$, мы приходим к $Y_{\ell m}(\mathcal{R}\mathbf{e}_z)$, т. е. сферической функции исходных углов θ, φ , (6.10). В правой части равенства (6.12) мы можем

6.2 Сферические функции как матричные элементы конечных вращений

использовать результат (1.143) для $Y_{\ell m'}(\mathbf{e}_z)$. Это приводит к искомому соотношению

$$Y_{\ell m}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} D_{0m}^{\ell}(\mathcal{R}^{-1}) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} D_{m0}^{\ell*}(\mathcal{R}), \quad (6.14)$$

где $D(\mathcal{R}^{-1})$ есть матричный элемент вращения, который, в противоположность (6.10), поворачивает вектор \mathbf{n} в направлении полярной оси, а второе равенство использует связь между $D(\mathcal{R})$ и $D(\mathcal{R}^{-1}) = D^{\dagger}(\mathcal{R})$, см. (6.8). Полиномы Лежандра (16.141) вещественны и

$$P_{\ell}(\cos \theta) = D_{00}^{\ell}(\mathcal{R}^{-1}) = D_{00}^{\ell}(\mathcal{R}). \quad (6.15)$$

Как уже упоминалось ранее, общее трёхмерное вращение задается тремя углами. Сферические функции связаны с особым типом вращений (6.14), и зависят от двух углов; полиномы Лежандра зависят только от одного угла. Это можно понять, пользуясь физической интерпретацией сферических функций как описывающих угловую часть *одночастичных волновых функций* $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \mathbf{n})$. В соответствии с нашим выводом, сферическая функция относится к амплитуде вращения, которое связывает направление \mathbf{r} с осью квантования. Можно сказать, что вектор \mathbf{r} является единственным направлением в пространстве, которое выделено наличием в нём частицы. Следовательно, естественно выбрать это направление в качестве оси квантования. Для того чтобы сделать это, нужно, в противоположность Рис. 6.2, сначала повернуть вектор \mathbf{r} на угол $-\varphi$ вокруг лабораторной (произвольной) z -оси в xz -плоскость, а затем на угол $-\theta$ вокруг оси y . Эти два вращения отвечают оператору $\hat{\mathcal{R}}^{-1}$ в равенствах (6.14) и (6.15). Третий угол, отсутствующий в этом преобразовании, описывает вращение вокруг оси \mathbf{r} , которое не меняет любые физические величины, и, следовательно, оказывается избыточным. Ситуация меняется в *многочастичном* случае, когда возможно связать *три* оси с переменными системы и определить таким образом внутреннюю, *связанную с телом* систему координат, в отличие от внешней, *связанной с пространством* системы координат. Преобразование между этими системами играет важную роль в молекулярной и ядерной физике, когда приходится иметь дело с несферическими объектами. [?, 16].

Задача 6.2

Выберем в многочастичной системе три ортогональных вектора $\mathbf{e}^{(k)}$, $k = 1, 2, 3$, которые являются функциями переменных частиц и образуют правую тройку, $[\mathbf{e}^{(j)} \times \mathbf{e}^{(k)}] = \varepsilon_{jkl} \mathbf{e}^{(l)}$ (например, но необязательно, они могут быть

естественным образом связаны с главными осями плотности распределения). Введем три скалярных произведения,

$$\hat{I}^k = (\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{e}^{(k)}), \quad (6.16)$$

проекции полного углового момента вдоль внутренних осей. Докажите, что \hat{I}^k коммутирует со всеми компонентами \hat{J}_i , и найдите $\sum_k (\hat{I}^k)^2$ и коммутаторы $[\hat{I}^j, \hat{I}^k]$.

Решение Компоненты \hat{I}^k являются *скалярами*, поскольку векторы $\mathbf{e}^{(k)}$ вращаются вместе с системой. Сумма квадратов этих величин равна квадрату углового момента,

$$\sum_k (\hat{I}^k)^2 = \hat{\mathbf{J}}^2 = J(J+1), \quad (6.17)$$

где последнее равенство даёт математическое ожидание для собственного состояния $\hat{\mathbf{J}}^2$. Коммутатор даётся соотношением

$$[\hat{I}^j, \hat{I}^k] = -i\varepsilon_{jkl}\hat{I}^l, \quad (6.18)$$

с *обратным знаком* по сравнению с обычными компонентами \hat{J}_k углового момента в *лабораторной* системе координат.

D -функция в (6.14) зависит от квантовых чисел m и 0 , что соответствует преобразованию между лабораторной системой (проекция орбитального момента m) и внутренней системой, в которой проекция орбитального момента на новую полярную ось, в направлении \mathbf{r} , исчезает. Действительно, имеем тождественно

$$(\mathbf{l} \cdot \mathbf{r}) = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{l}) = 0. \quad (6.19)$$

Это кинематическое ограничение запрещает вращение вокруг \mathbf{r} , оставляя только два угла динамическими переменными. Конечно, точно такую же ситуацию имеем и в импульсном представлении,

$$(\mathbf{l} \cdot \mathbf{p}) = (\mathbf{p} \cdot \mathbf{l}) = 0. \quad (6.20)$$

Задача 6.3

Установите *ортogonalность* матричных элементов конечных вращений, рассматриваемых как функции углов поворота,

$$\int d\mathcal{R} D_{KM}^{J*}(\mathcal{R}) D_{K'M'}^{J'}(\mathcal{R}) = \delta_{JJ'} \delta_{KK'} \delta_{MM'} \frac{8\pi^2}{2J+1}. \quad (6.21)$$

Здесь интегрирование производится по всем возможным направлениям, описываемым тремя углами. Это дает множитель $8\pi^2$ («объем» группы вращений), например, 4π для различных вариантов выбора направления оси вращения и 2π для возможных поворотов вокруг этой оси; тот же объем возникает при параметризации с помощью углов Эйлера.

Решение Повторим вывод гл. 8.12, используя интегрирование по углам вместо суммирования по элементам группы; размерность представления D^J есть $n = 2J + 1$. Как частный случай, отсюда следует ортогональность сферических функций $Y_{\ell m}$ и полиномов Лежандра (а также полнота D -функций как функций параметров группы).

6.3 Теорема сложения

Часто приходится иметь дело со скалярной функцией от угла γ между двумя направлениями, $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$ и $\mathbf{n}'(\theta', \varphi')$. Будучи скаляром, такая функция зависит только от скалярного произведения $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')$ и может быть разложена с помощью полиномов Лежандра $P_\ell(\cos \gamma)$, где

$$\cos \gamma = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi') + \cos \theta \cos \theta'. \quad (6.22)$$

В то же время, рассматривая $P_\ell(\cos \gamma)$ как функцию отдельно углов \mathbf{n} или \mathbf{n}' , мы можем записать её в виде ряда по $Y_{\ell' m'}(\mathbf{n})$ или $Y_{\ell' m'}(\mathbf{n}')$. Однако функция в целом, а также скалярное произведение $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')$ инвариантны при *одновременных* поворотах \mathbf{n} и \mathbf{n}' . Беря вращение, в котором вектор \mathbf{n}' направлен по z , мы можем представить $P_\ell(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')$ как сферическую функцию $Y_{\ell 0}(\mathbf{n})$. Это означает, что как функция \mathbf{n} , исходная функция двух единичных векторов преобразуется по представлению с орбитальным моментом ℓ . Поэтому ряд может содержать только функции $Y_{\ell' m'}$ с $\ell' = \ell$. Ситуация симметрична для \mathbf{n} и \mathbf{n}' , так что разложение должно иметь вид

$$P_\ell(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \sum_{mm'} A_{mm'}^\ell Y_{\ell m}(\mathbf{n}) Y_{\ell m'}(\mathbf{n}'). \quad (6.23)$$

При общем вращении \mathbf{n} и \mathbf{n}' на угол β вокруг полярной оси функция (6.23) не меняется, но каждое слагаемое приобретает фазу $\exp[-i(m + m')\beta]$. Следовательно, фактически имеются только члены с $m' = -m$, как это можно видеть также из (6.22), так как функция зависит от разницы $\varphi - \varphi'$, а не от углов φ и φ' по отдельности. Используя (16.90), мы получаем

$$P_\ell(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \sum_m B_m^\ell Y_{\ell m}(\mathbf{n}) Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}') \quad (6.24)$$

с новыми коэффициентами $B_m^\ell = (-)^m A_{m-m}^\ell$.

Мы всё ещё использовали не все следствия инвариантности $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')$ относительно вращения. Применим произвольное вращение $\hat{\mathcal{R}}^{-1}$ одновременно к \mathbf{n} и \mathbf{n}' . Принимая во внимание унитарность $\hat{\mathcal{R}}^{-1} = \hat{\mathcal{R}}^\dagger$ и правило преобразования (6.11), мы имеем

$$Y_{\ell m}(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{n}) = \langle \hat{\mathcal{R}}^{-1}\mathbf{n} | \ell m \rangle = \langle \mathbf{n} | \hat{\mathcal{R}} | \ell m \rangle = \sum_{\mu} D_{\mu m}^\ell(\mathcal{R}) Y_{\ell \mu}(\mathbf{n}). \quad (6.25)$$

Произведя те же самые преобразования для сопряжённой функции в (6.24), мы получаем

$$P_\ell(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \sum_{m\mu\mu'} B_m^\ell D_{\mu m}^\ell(\mathcal{R}) D_{\mu' m}^{\ell*}(\mathcal{R}) Y_{\ell \mu}(\mathbf{n}) Y_{\ell \mu'}^*(\mathbf{n}'). \quad (6.26)$$

Теперь сравним этот результат с выражением (6.24) для той же функции до вращения. Сферические функции линейно независимы. Переобозначая в (6.24) $m \rightarrow \mu$ и сравнивая выражения, получаем соотношение для коэффициентов

$$\sum_m B_m^\ell D_{\mu m}^\ell(\mathcal{R}) D_{\mu' m}^{\ell*}(\mathcal{R}) = B_\mu^\ell \delta_{\mu\mu'}, \quad (6.27)$$

где \mathcal{R} всё ещё произвольно. Очевидно, что решение $B_m^\ell = B^\ell$ не зависит от m , потому что (6.27) есть не что иное как соотношение унитарности (6.4). Это решение *единственно*, так как (6.27) может быть записано в матричной форме $D(\mathcal{R}) B D^\dagger(\mathcal{R}) = B$, где B есть диагональная (в m -представлении) матрица с элементами B_m^ℓ . Благодаря унитарности $D^\dagger(\mathcal{R}) = D^{-1}(\mathcal{R})$, что означает, что матрица B *коммутирует со всеми матрицами* $D(\mathcal{R})$ неприводимого представления, $D(\mathcal{R})B = BD(\mathcal{R})$. Такая матрица должна быть пропорциональна единичной матрице (так называемая лемма Шура, гл. 8.12), т. е. матричные элементы B_m^ℓ с данным ℓ все равны. Постоянная B^ℓ может быть найдена, например, если выбрать \mathbf{n}' вдоль оси z . Тогда обе части (6.15) должны дать $P_\ell(\cos \theta)$. Используя (16.141) и (16.143), мы видим, что $B^\ell = (2\ell + 1)/4\pi$. В конечном итоге, мы получили *теорему сложения* для сферических гармоник,

$$P_\ell(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_m Y_{\ell m}(\mathbf{n}) Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}'). \quad (6.28)$$

В частности, для совпадающих \mathbf{n} и \mathbf{n}' ,

$$\sum_m |Y_{\ell m}(\mathbf{n})|^2 = \frac{2\ell + 1}{4\pi}. \quad (6.29)$$

Заметим также, что для единичных векторов равенство (6.22) есть просто частный случай теоремы сложения (6.28) для $\ell = 1$. Мы провели вывод во всех деталях для того, чтобы показать силу соображений симметрии, которые позволили нам избежать явных вычислений. Теорема сложения (6.28) позволяет нам переписать разложение плоской волны (17.106) в форме (17.98), симметричной по \mathbf{k} и \mathbf{r} ,

$$C_{\ell m}(\mathbf{k}) = 4\pi i^\ell Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}_\mathbf{k}), \quad \mathbf{n}_\mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad (6.30)$$

$$e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} = 4\pi \sum_{\ell m} i^\ell Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}_\mathbf{k}) Y_{\ell m}(\mathbf{n}) j_\ell(kr). \quad (6.31)$$

6.4 Преобразование операторов

Напомним (гл. 6.9), что если векторы состояний $|\psi\rangle$ преобразуются при помощи унитарного преобразования \hat{U} в $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ и операторы \hat{O} преобразуются по правилу

$$\hat{O} \Rightarrow \hat{O}' = \hat{U} \hat{O} \hat{U}^{-1}, \quad (6.32)$$

то все физические амплитуды не меняются,

$$\langle \psi'_2 | \hat{O}' | \psi'_1 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{U}^{-1} \hat{U} \hat{O} \hat{U}^{-1} \hat{U} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{O} | \psi_1 \rangle. \quad (6.33)$$

Это означает, что новые операторы \hat{O}' действуют после преобразования точно так же, как старые операторы \hat{O} до преобразования. Другими словами, в применении к вращению $\hat{U} = \hat{\mathcal{R}}$, операторы повернулись вместе с системой, так что физические измерения с помощью повернутых приборов дали те же самые результаты.

Операторы можно классифицировать по их поведению при вращениях точно так же, как векторы состояний были разбиты на мультиплеты в соответствии с их трансформационными свойствами. Про набор $2J + 1$ операторов \hat{T}_{JM} , где J есть целое или полуцелое и $M = -J, -J + 1, \dots, J$, говорят, что они образуют *тензорный оператор* ранга J , если операторы набора преобразуются при вращениях по таким же правилам (6.1), как и векторы состояний $|JM\rangle$,

$$\hat{\mathcal{R}} \hat{T}_{JM} \hat{\mathcal{R}}^{-1} = \sum_{M'} D_{M'M}^J(\mathcal{R}) \hat{T}_{JM'}. \quad (6.34)$$

Для целого $J = \ell$ тензорные операторы $\hat{T}_{\ell m}$ должны преобразовываться как сферические функции $Y_{\ell m}$. В случае бесспиновой частицы тензорные

операторы $\hat{T}_{\ell m}(\mathbf{r})$, которые являются функциями координат, должны иметь такую же угловую зависимость, как $Y_{\ell m}(\mathbf{n})$,

$$\hat{T}_{\ell m}(\mathbf{r}) = t_{\ell}(r)Y_{\ell m}(\mathbf{n}), \quad (6.35)$$

где множитель $t_{\ell}(r)$ одинаков для всех m . В этом случае легко проверить непосредственно, что правило преобразования (6.34) сохраняет амплитуды, равенство (6.33). Действительно, как мы знаем из (4.65), преобразование (6.34) для функции от координат (6.35) должно давать $T_{\ell m}(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{n})$. [Напомним, что здесь мы преобразуем оператор; первый множитель $\hat{\mathcal{R}}$ в левой стороне равенства (6.34) преобразует только \hat{T}_{JM} и сокращается с $\hat{\mathcal{R}}^{-1}$, так что все функции после \hat{T}_{JM} не затрагиваются]. Преобразованный матричный элемент будет отличаться от оригинала просто заменой угловых переменных $\mathbf{n} \rightarrow \hat{\mathcal{R}}^{-1}\mathbf{n}$ под знаком интеграла, что не может изменить интеграла. То же самое справедливо для функций импульса, которые будут пропорциональны $Y_{\ell m}(\mathbf{n}_{\mathbf{p}})$, где $\mathbf{n}_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$.

Задача 6.4

Покажите, что для любой пары $A_{\ell m}$ и $B_{\ell m}$ тензорных операторов одинакового ранга ℓ *свёртка*, образованная по такому же правилу суммирования как (16.120),

$$S = \sum_m (-)^m A_{\ell m} B_{\ell -m}, \quad (6.36)$$

есть скаляр (инвариант вращения).

В соответствии с разделом 1.8, любой *векторный* оператор есть тензор ранга 1. Далее векторы подразделяются по поведению по отношению к пространственной инверсии. Вектор координаты \mathbf{n} есть пример *полярного* вектора. Его компоненты, как и сферические функции Y_{1m} , изменяют знак при пространственной инверсии. Любой оператор углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ ведёт себя как вектор при вращении, но как псевдовектор при инверсии (*аксиальный вектор*).

Задача 6.5

Докажите, что спиновый угловой момент ведёт себя точно так же (псевдовектор), как орбитальный момент: его компоненты преобразуются как у вектора при вращении, сохраняя тот же знак при пространственной инверсии.

Решение Пространственная инверсия не действует на спиновые операторы. По отношению к вращениям, в соответствии с общим законом преобразова-

ния, преобразованный вектор спина есть

$$\hat{\mathbf{s}}' = \frac{1}{2} \hat{\mathcal{R}} \vec{\sigma} \hat{\mathcal{R}}^{-1}. \quad (6.37)$$

Подставляя оператор спина $\hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha)$ из (20.17), мы получаем

$$\hat{\mathbf{s}}' = \frac{1}{2} [\cos(\alpha/2) - i(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \sin(\alpha/2)] \vec{\sigma} [\cos(\alpha/2) + i(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \sin(\alpha/2)]. \quad (6.38)$$

Как и ожидалось, проекция спина на ось вращения \mathbf{n} не меняется,

$$(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}') = (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}(\alpha) \hat{\mathcal{R}}_{\mathbf{n}}^{-1}(\alpha) = (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}). \quad (6.39)$$

Чтобы упростить выражение (6.38), мы используем алгебру матриц Паули (20.14). Например, для произведения трёх σ -матриц, это даёт

$$\sigma_j \sigma_i \sigma_k = \delta_{ij} \sigma_k + \delta_{ik} \sigma_j - \delta_{jk} \sigma_i + i \varepsilon_{jik}. \quad (6.40)$$

Конечный результат есть

$$\hat{s}'_i = \frac{1}{2} \{ \sigma_i \cos \alpha - [\mathbf{n} \times \vec{\sigma}]_i \sin \alpha + 2n_i (\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin^2(\alpha/2) \}, \quad (6.41)$$

или, в векторной форме

$$\hat{\mathbf{s}}' = \hat{\mathbf{s}} \cos \alpha - [\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{s}}] \sin \alpha + \mathbf{n} (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}) 2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \quad (6.42)$$

Это правильное преобразование вектора при конечном вращении; возьмите предел малых α , получите для $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$

$$\hat{s}'_x = \hat{s}_x + \alpha \hat{s}_y, \quad \hat{s}'_y = \hat{s}_y - \alpha \hat{s}_x, \quad \hat{s}'_z = \hat{s}_z, \quad (6.43)$$

и сравните это с преобразованием координат, гл. 16.1. Если наш векторный оператор преобразуется так же, как в (6.43), он будет соответствовать измерению такой же величины после вращения, в соответствии с определением (6.33) преобразования операторов. Это преобразование является обратным к преобразованию вектора в (16.16).

6.5 Введение в правила отбора

Тензорные свойства операторов играют важную роль в расчётах физических амплитуд, пропорциональных матричным элементам $\langle \psi'_{J_2 M_2} | \hat{T}_{JM} | \psi_{J_1 M_1} \rangle$. Для заданных начальных и конечных мультиплетов состояний, мы имеем здесь $(2J_2 + 1)(2J + 1)(2J_1 + 1)$ различных матричных элементов. Однако, как мы увидим позже, только одно число имеет отношение к физике. Остальные не зависят от природы системы, полностью определяясь геометрическими соображениями. Некоторые матричные элементы исчезают благодаря осевой симметрии состояний и операторов, другие оказываются тесно взаимосвязаны.

Простейшие *правила отбора* могут быть установлены непосредственно из определения тензорных операторов (6.34). Рассмотрим бесконечно малый поворот на угол $\delta\alpha$ вокруг оси \mathbf{n} . Соответствующий оператор есть $\hat{\mathcal{R}} = 1 - i(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n})\delta\alpha$, (16.1). Удерживая линейные члены в $\delta\alpha$, выразим левую сторону (6.34) через коммутатор тензора \hat{T}_{JM} с угловым моментом,

$$\hat{\mathcal{R}}\hat{T}_{JM}\hat{\mathcal{R}}^{-1} = \hat{T}_{JM} - i\delta\alpha[(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n}), \hat{T}_{JM}]. \quad (6.44)$$

В данном представлении матричные элементы этого вращения есть

$$D_{M'M}^J(\mathcal{R}) = \delta_{M'M} - i\delta\alpha\langle JM' | (\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n}) | JM \rangle. \quad (6.45)$$

Так как направление оси \mathbf{n} является произвольным, формулы (6.44) и (6.45) приводят к соотношению коммутации, действительному для любого тензорного оператора

$$[\hat{J}_m, \hat{T}_{JM}] = \sum_{M'} \langle JM' | \hat{J}_m | JM \rangle \hat{T}_{JM'}, \quad (6.46)$$

где \hat{J}_m может быть и декартовой, и сферической компонентой.

Для $\hat{J}_z = \hat{J}_0$ компоненты в (6.46) имеем

$$[\hat{J}_z, \hat{T}_{JM}] = M\hat{T}_{JM}. \quad (6.47)$$

Это типичное *лестничное соотношение*, см. раздел I.11.6. Мы заключаем, что, действуя на состояние с определенной z -проекцией полного углового момента системы, тензорный оператор \hat{T}_{JM} *увеличивает* эту проекцию на M . Мы получили простое *правило отбора*: в переходах $\langle a_2 J_2 M_2 | \hat{T}_{JM} | a_1 J_1 M_1 \rangle$, где a_1 и a_2 обозначают все дополнительные (не относящиеся к вращениям)

квантовые числа, единственными отличными от нуля амплитудами будут такие, для которых $\Delta J_z \equiv M_2 - M_1 = M$,

$$\hat{T}_{JM} : \Delta J_z = M. \quad (6.48)$$

Наши обозначения в уравнениях (16.99) для сферических компонент векторов согласуются с этим общим правилом. Результат не зависит от конкретных величин J_1, J_2 и дополнительных квантовых чисел a_1, a_2 .

Повышающая, $m = +1$, компонента соотношения (6.46) содержит в правой части только член $M' = M + 1$. Мы видим, что *произведение операторов* \hat{J}_{+1} , имеющих правило отбора $\Delta J_z = +1$, и \hat{T}_{JM} , создаёт новый оператор с $\Delta J_z = M + 1$. Для понижающей компоненты в (6.46) $m = -1$ и $\Delta J_z = M - 1$. В произведении операторов правила отбора для проекции J_z просто складываются *алгебраически*. Позже мы увидим, что для абсолютной величины углового момента ситуация более сложна.

В применении к векторному оператору, $\hat{T}_{1M} \rightarrow \hat{V}_M$, общее соотношение (6.47) даёт $[\hat{J}_z, \hat{V}_{\pm 1}] = \pm \hat{V}_{\pm 1}$. Очевидно, вращение вокруг оси z не меняет z -компоненту вектора, $[\hat{J}_z, \hat{V}_z] = 0$. В декартовых координатах такие соотношения эквивалентны коммутаторам, сравните с *задачей I.4.5*,

$$[\hat{J}_k, \hat{V}_l] = i\epsilon_{klm}\hat{V}_m \quad (6.49)$$

что обобщает алгебру углового момента (16.21) на произвольный вектор. Все эти правила коммутации имеют чисто геометрическое происхождение и, следовательно, универсальны, будучи справедливыми независимо от природы или поведения при инверсии тензорного оператора. Они могут быть получены с помощью простых наглядных образов вращающихся векторов, хотя данная выше формулировка является более общей. В частности, соотношение (6.49) эквивалентно соотношениям (6.41) и (6.42), взятым в пределе малых углов, где спин \hat{s} должен быть заменен произвольным вектором \hat{V} .

6.6 Электромагнитные мультиполи

Электромагнитные мультиполи дают один из наиболее важных примеров тензорных операторов. Они возникают в электродинамике в результате *мультипольного разложения* полей, создаваемых ограниченной системой зарядов и токов.

Рассмотрим систему точечных классических частиц с электрическими зарядами e_a , находящимися в точках \mathbf{r}_a , Рис. 21.3. Электростатический

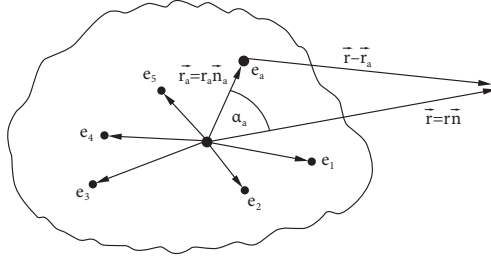


Рис. 6.3. Электростатический потенциал за пределами системы зарядов

потенциал этой системы, измеряемый в точке \mathbf{r} даётся законом Кулона,

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_a \frac{e_a}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|}. \quad (6.50)$$

Функция

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \gamma}} \quad (6.51)$$

зависит от длин r, r' двух векторов и угла γ между ними, а не от углов векторов \mathbf{r} и \mathbf{r}' по отдельности. Если $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, эта функция не имеет особенностей и может быть выражена с помощью бесконечного разложения в ряд по полиномам Лежандра, с коэффициентами, зависящими от r и r' ,

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_{\ell}(\cos \gamma) f_{\ell}(r, r'). \quad (6.52)$$

Электростатический потенциал (6.52) как функция от \mathbf{r} удовлетворяет уравнению Лапласа всюду, за исключением особой точки $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Два линейно независимых решения уравнения Лапласа для угловой симметрии, задаваемой сферической функцией $Y_{\ell m}$, есть $r^{\ell} Y_{\ell m}$ и $r^{-(\ell+1)} Y_{\ell m}$, как следует из (17.51,52). Теорема сложения (6.28) показывает, что полином Лежандра в (6.52) есть суперпозиция сферических функций $Y_{\ell m}(\mathbf{n}_r)$. Следовательно, f_{ℓ} может зависеть от r как r^{ℓ} , либо как $r^{-(\ell+1)}$, и мы можем переписать (6.52) как

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{\ell} P_{\ell}(\cos \gamma) \left\{ r^{\ell} g_{\ell}(r') + \frac{1}{r^{\ell+1}} h_{\ell}(r') \right\}. \quad (6.53)$$

Функции g_ℓ и h_ℓ определяются, с точностью до постоянных множителей, размерностью общего выражения $1/[\text{длина}]$, так что

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{\ell} P_{\ell}(\cos \gamma) \left(g_{\ell} \frac{r^{\ell}}{r'^{\ell+1}} + h_{\ell} \frac{r'^{\ell}}{r^{\ell+1}} \right). \quad (6.54)$$

Рассматривая (6.52) для частного значения γ , а именно для параллельных векторов, $\cos \gamma = 1$, когда все $P_{\ell} = 1$, мы получаем

$$\frac{1}{|r - r'|} = \sum_{\ell} \left(g_{\ell} \frac{r^{\ell}}{r'^{\ell+1}} + h_{\ell} \frac{r'^{\ell}}{r^{\ell+1}} \right). \quad (6.55)$$

Из-за особенности при $r = r'$ нам нужно рассмотреть две области. Если $r > r'$,

$$\frac{1}{|r - r'|} = \frac{1}{r - r'} = \frac{1}{r(1 - r'/r)} = \sum_{\ell} \frac{r'^{\ell}}{r^{\ell+1}}. \quad (6.56)$$

Это значит, что в области $r > r'$ мы имеем $h_{\ell} = 1$ и $g_{\ell} = 0$. Этот результат вполне естественен, потому что мы можем положить $r' \rightarrow 0$ и получить нефизическую особенность в сумме, содержащей g_{ℓ} в (6.55). Аналогично, мы должны положить $h_{\ell} = 0$ и $g_{\ell} = 1$ для $r < r'$. С естественными обозначениями $r_{<}$ и $r_{>}$ для меньшего и большего из этих двух радиусов, соотношение (6.54) принимает форму

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{\ell} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} P_{\ell}(\cos \gamma). \quad (6.57)$$

В приложениях мультипольного разложения обычно рассматривают потенциал (6.50) *вне системы*, т.е. в точке \mathbf{r} с $r > r_a$. В этом случае мы можем использовать разложение (6.57) и теорему сложения (6.28), и получить

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell m} \frac{4\pi}{2\ell + 1} \frac{1}{r^{\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}) \mathcal{M}(E\ell, m). \quad (6.58)$$

Здесь *электрический мультипольный момент* ранга $\ell = 0, 1, \dots$ определён для системы точечных зарядов $a = 1, 2, \dots, A$ как набор $(2\ell + 1)$ величин

$$\mathcal{M}(E\ell, m) = \sum_{a=1}^A e_a r_a^{\ell} Y_{\ell m}(\mathbf{n}_a), \quad m = -\ell, -\ell + 1, \dots, +\ell, \quad (6.59)$$

где сумма берётся по всем зарядам e_a , расположенным в $\mathbf{r}_a = (r_a, \theta_a, \varphi_a) \equiv (r_a, \mathbf{n}_a)$. Точно таким же образом можно определить, вместо моментов для распределения зарядов, мультипольные моменты для любой аддитивной характеристики частиц, например, для распределения массы $e_a \Rightarrow m_a$.

В *квантовой теории* мультипольные моменты следует рассматривать как операторы, действующие на переменные частиц. Оператор $\hat{\mathcal{M}}(E\ell, m)$, содержащий явно сферические функции, обладает свойствами, необходимыми для тензорного оператора ранга ℓ . Вводя оператор *зарядовой плотности*

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_a e_a \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_a), \quad (6.60)$$

мы приходим к более общему выражению для мультипольного момента,

$$\hat{\mathcal{M}}(E\ell, m) = \int d^3r \hat{\rho}(\mathbf{r}) r^\ell Y_{\ell m}(\mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (6.61)$$

При записи в таком виде нет даже необходимости делать предположение о существовании точечных частиц в системе; например, в ядре заряженные пионы и другие переносчики ядерных сил включаются здесь вместе с нуклонами, если $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ есть полный оператор плотности электрического заряда. Как и ожидалось, мы можем разделить геометрию мультипольных операторов и их динамическую природу. Из любого распределения $\hat{\rho}(\mathbf{r})$, оператор (6.61) извлекает неприводимый тензор ранга ℓ , т.е. выделяет часть с определёнными свойствами относительно вращения.

Наименьший мультипольный момент $\ell = 0$ есть *монополь*. Он определяет скалярную часть, полный электрический заряд Ze ,

$$\hat{\mathcal{M}}(E0, 0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_a e_a = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d^3r \hat{\rho}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Ze. \quad (6.62)$$

Следующий член, $\ell = 1$, определяет вектор *дипольного* момента

$$\hat{\mathbf{d}} = \sum_a e_a \hat{\mathbf{r}}_a = \int d^3r \hat{\rho}(\mathbf{r}) \mathbf{r}. \quad (6.63)$$

Принимая во внимание соотношение (16.100) между векторами и сферическими функциями ранга $\ell = 1$, мы получаем

$$\hat{\mathcal{M}}(E1, m) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_a e_a \hat{r}_a (n_a)_m = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{d}_m. \quad (6.64)$$

Следующие члены мультипольного разложения определяют квадруполь ($\ell = 2$), *октуполь* ($\ell = 3$), *гексадекаполь* ($\ell = 4$) и высшие моменты. Физические свойства квадрупольного тензора (16.129) играют важную роль в молекулярной и ядерной структуре.

Аналогичным образом можно определить *магнитные мультиполи* $\hat{\mathcal{M}}(M\ell, m)$, связанные с распределением *токов*. Конвекционный ток, связанный с орбитальным движением, и ток намагниченности, генерируемый спиновыми магнитными моментами, определяют соответствующие вклады в магнитный мультипольный момент ранга ℓ [?],

$$\hat{\mathcal{M}}(M\ell, m) = \sum_a \left(g_a^s \hat{\mathbf{s}}_a + \frac{2}{\ell + 1} g_a^\ell \hat{\ell}_a \right) \cdot \nabla \left(r_a^\ell Y_{\ell m}(\mathbf{n}_a) \right). \quad (6.65)$$

Здесь $\hat{\mathbf{s}}_a$ и $\hat{\ell}_a$ означают спин и орбитальный момент частицы a , соответственно; g_a^s и g_a^ℓ есть соответствующие *гиромагнитные отношения*. [Мы всегда измеряем все угловые моменты в единицах \hbar , а гиромагнитные отношения g_a в магнетонах $e\hbar/(2m_a c)$]. Выражение (6.65) зануляется при $\ell = 0$, показывая, что магнитных монополей не существует. При $\ell = 1$ мы приходим к сферическим компонентам $\hat{\mu}_m$ *магнитного момента* $\hat{\vec{\mu}}$,

$$\hat{\mathcal{M}}(M1, m) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{\mu}_m, \quad (6.66)$$

$$\hat{\vec{\mu}} = \sum_a (g_a^s \hat{\mathbf{s}}_a + g_a^\ell \hat{\ell}_a). \quad (6.67)$$

Члены высшего порядка определяют магнитный квадруполь, $\ell = 2$, магнитный октуполь $\ell = 3$, и так далее.

Когда я считаю, нас двое, ты да я
вместе.

Т.С. Элиот, *Бесплодная земля*, пер. Я.
Пробштейна

Глава 7

Сложение угловых моментов

7.1 Две подсистемы

При вычислениях часто приходится иметь дело с угловым моментом, общим для нескольких составных частей или подсистем одной системы. Прототипом этого является задача двух тел.

Рассмотрим две подсистемы с моментами j_1 и j_2 . Общее квантовое пространство содержит $d = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ состояний, полученных путем комбинаций различных членов мультиплетов $|j_1 m_1\rangle$ и $|j_2 m_2\rangle$ с проекциями $m_1 = -j_1, \dots, j_1$ и $m_2 = -j_2, \dots, j_2$, соответственно. Эти базисные состояния могут быть определены как

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle. \quad (7.1)$$

Если подсистемы не взаимодействуют, все четыре квантовых числа j_1, j_2, m_1, m_2 сохраняются (мы предполагаем инвариантность относительно вращений для всей системы). Тогда удобно использовать базисные состояния независимых подсистем. Каждая система может вращаться *по отдельности* при помощи операторов угловых моментов $\hat{\mathbf{j}}_1$ и $\hat{\mathbf{j}}_2$, генерирующих соответствующие преобразования. Можно вообразить себе картину отдельной прецессии составляющих угловых моментов вокруг общей оси квантования, *несвязанное* представление, Рис. 22.1а.

Мы можем описывать систему по-другому, изучая её поведение при *общем* вращении, когда подсистемы вращаются вместе. Генератор таких вращений есть полный угловой момент

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2. \quad (7.2)$$

В предыдущей картине отдельных прецессий оператор $\hat{\mathbf{J}}$ не имеет определённого значения, так как результат сложения векторов (7.2) зависит от

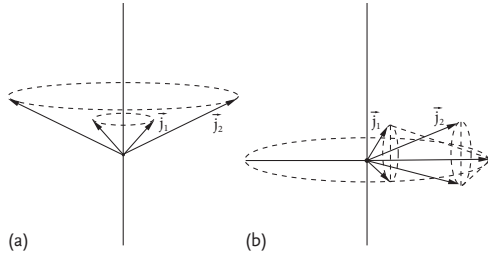


Рис. 7.1. Представления сложения двух векторов: несвязанное (a) и связанное (b)

мгновенной взаимной ориентации \mathbf{j}_1 и \mathbf{j}_2 . Состояния (7.1) есть суперпозиции состояний с различными определёнными значениями \mathbf{J}^2 . В случае взаимодействующих подсистем отдельные вращения в общем случае нарушают структуру, что делает состояния (7.1) нестационарными, в то время как общие вращения сохраняют внутреннюю структуру. Поэтому более удобно описывать состояния квантовыми числами J и M , относящимися к генератору (7.2) общих вращений (*связанное* представление, Рис. 22.1b), хотя оба описания используют полный набор состояний, будучи, следовательно, математически эквивалентными.

По отношению к общим вращениям, когда относительная ориентация подсистем не затрагивается и они вращаются как целое, полный набор состояний (7.1) *приводим*. Любая возможная *относительная* ориентация будет порождать мультиплет $|JM\rangle$ состояний, преобразующихся только сами через себя при произвольном вращении. Это показано на Рис. 22.1b: сначала мы определяем относительную ориентацию и соответствующий полный угловой момент \mathbf{J} (угловые моменты подсистем прецессируют вокруг \mathbf{J}), а затем разрешаем всей конструкции вращаться вокруг фиксированной в пространстве оси квантования, что определяет общую проекцию M . z -проекции m_1 и m_2 перестают сохраняться (но абсолютные значения j_1 и j_2 всё ещё сохраняются, потому что мы не меняем внутреннюю структуру подсистем), так что мы получаем новый набор состояний

$$|j_1 j_2; JM\rangle, \quad (7.3)$$

которые образуют мультиплеты, *неприводимые* при произвольных вращениях. Для отдельных угловых моментов подсистем действительной осью квантования становится теперь ось полного вектора \mathbf{J} . Действительно, как видно из квадрата равенства (7.2), состояние (7.3) имеет определённые

проекции

$$(\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}) = \frac{J(J+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{2}, \quad (7.4)$$

и аналогично для $(\hat{\mathbf{j}}_2 \cdot \hat{\mathbf{J}})$.

Относительные ориентации, допускаемые в квантовой механике, квантованы в пространстве. Следовательно, возможный полный импульс J , (7.2), может принимать лишь конечное дискретное множество (положительных) значений. В любом случае, набор новых состояний (7.3), где каждый мультиплет содержит $2J + 1$ членов, должен быть таким же полным, как и прежний набор (7.1), так что их размерности должны совпадать:

$$d = \sum_J (2J + 1) = d_1 d_2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \quad (7.5)$$

Задача 7.1

Частица со спином $s = 1/2$ и орбитальным угловым моментом ℓ может быть описана, в связанном представлении, общим угловым моментом

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\vec{\ell}} + \hat{\mathbf{s}}. \quad (7.6)$$

Найти возможные значения полного углового момента j .

Решение Возводя в квадрат определение (7.6), получаем, что

$$j(j+1) = \ell(\ell+1) + s(s+1) + 2(\hat{\vec{\ell}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) = \ell(\ell+1) + \frac{3}{4} + (\hat{\vec{\ell}} \cdot \vec{\sigma}). \quad (7.7)$$

Используя результат *Задачи 20.6*, мы имеем две возможности, *параллельной* и *антипараллельной* ориентации спинов относительно орбитального момента. Соответственно, равенство (7.7) определяет два возможных значения полного углового момента,

$$j(j+1) = \ell^2 + 2\ell + \frac{3}{4} \rightsquigarrow j = \ell + \frac{1}{2} \quad (7.8)$$

и

$$j(j+1) = \ell^2 - \frac{1}{4} \rightsquigarrow j = \ell - \frac{1}{2}. \quad (7.9)$$

Полнота (7.5) выполняется:

$$d = 2 \left(\ell + \frac{1}{2} \right) + 1 + 2 \left(\ell - \frac{1}{2} \right) + 1 = 4\ell + 2 = 2(2\ell + 1). \quad (7.10)$$

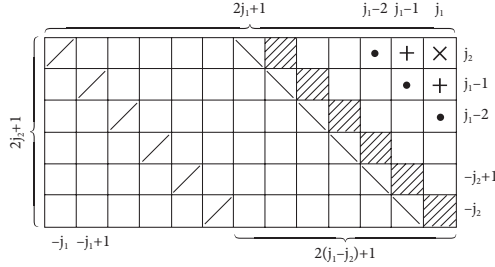


Рис. 7.2. Гильбертово пространство двух связанных мультиплетов

7.2 Разложение приводимых представлений

Для общего случая двух произвольных подсистем мы должны найти все *неприводимые* представления, которые, взятые вместе, в связанном представлении растягивают всё пространство (7.1). Это может быть сделано с помощью простой конструкции, которая эквивалентна стандартной процедуре нахождения характеров представлений в теории групп (следов матриц D^J).

Расположим все базисные состояния несвязанного представления (7.1) в $d_1 \times d_2$ таблице Рис. 22.2, которая имеет d_1 столбцов, пронумерованных числом m_1 , $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$, и d_2 строк, пронумерованных m_2 , $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$. Для определённости будем считать, что $j_1 \geq j_2$. Каждое состояние (клетка таблицы) имеет определённое значение

$$M = m_1 + m_2 \quad (7.11)$$

полной проекции $\hat{J}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$, равенство (7.2). Любое состояние $|JM\rangle$ набора (7.3) будет суперпозицией состояний, лежащих на диагональной линии, соответствующих данному значению M (7.11). Число квадратов на этой линии равно числу мультиплетов (7.3), которые имеют это значение проекции, т.е. с угловым моментом $J \geq M$.

Начнём с верхнего правого угла, $M = j_1 + j_2$. Это максимально возможная полная проекция. Она строится однозначно (*параллельность* составляющих моментов). Существует только один мультиплет, где присутствует это значение M , дающее максимальную проекцию, так что это состояние имеет наибольшее возможное значение $J_{\max} = M_{\max} = j_1 + j_2$. Этот наивысший мультиплет должен также содержать все другие члены, $M = J - 1, J - 2, \dots, -J = -(j_1 + j_2)$.

Давайте перейдем к следующей диагональной линии $M = J_{\max} - 1$. Имеются два таких состояния. Они могут образовывать две линейно независи-

мых комбинации. Одна из них принадлежит наивысшему мультиплету, как было упомянуто в предыдущем абзаце. Эта комбинация $|J_{\max} M = J_{\max} - 1\rangle$ может быть получена действием понижающего оператора

$$\hat{J}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-} \quad (7.12)$$

на максимально упорядоченное состояние (напомним, что компоненты $\hat{\mathbf{J}}$ действуют только внутри мультиплета). В соответствии с (16.49) и (16.51), результат может быть записан в виде симметричной комбинации

$$\sqrt{2j_1} |j_1 j_1 - 1; j_2 j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1 j_1; j_2 j_2 - 1\rangle. \quad (7.13)$$

С другой стороны, это должно быть равнозначно действию полного \hat{J}_- ,

$$\hat{J}_- |J = j_1 + j_2 M = j_1 + j_2\rangle = \sqrt{2(j_1 + j_2)} |J = j_1 + j_2 M = j_1 + j_2 - 1\rangle. \quad (7.14)$$

Сравнение двух последних выражений даёт

$$|J = j_1 + j_2 M = j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1 - 1; j_2 j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1; j_2 j_2 - 1\rangle. \quad (7.15)$$

Вторая возможная комбинация вдоль той же короткой диагонали с $M = j_1 + j_2 - 1$ является наивысшей для второго мультиплета. Поэтому мы открываем новый мультиплет, то есть значение полного углового момента $J = j_1 + j_2 - 1$ также возможно. Это состояние с другим J должно быть ортогональным состоянию (7.14), хотя они имеют одно и то же значение M . Используя ортогональность, мы находим

$$|J = j_1 + j_2 - 1 M = j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1 - 1; j_2 j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1; j_2 j_2 - 1\rangle. \quad (7.16)$$

Здесь мы можем добавить дополнительные произвольные фазы, например, изменить общий знак $-$, это вопрос соглашения.

Следующий шаг на пути вниз обнаруживает три состояния с $M = j_1 + j_2 - 2$. Две из трёх комбинаций принадлежат предыдущим мультиплетам, а третья открывает новый мультиплет $J = j_1 + j_2 - 2$. Эта процедура является очевидной и регулярной. Каждый шаг к более низкой диагональной линии добавляет новый мультиплет с постоянно уменьшающимся

угловым моментом. Это произойдет в последний раз, когда мы достигнем диагонали, соответствующей $M = j_1 - j_2$. На этом шаге мы открываем мультиплет с *наименьшим* возможным угловым моментом $J_{\min} = j_1 - j_2$. После этого количество возможных проекций M не увеличивается, что означает, что мы не встречаемся с новыми мультиплетами, а просто заполняем имеющиеся. Наинизший мультиплет будет заполнен на линии, проходящей через левый верхний угол таблицы. Позже на каждом следующем шаге мы завершаем один из мультиплетов, пока не придём к левому нижнему углу с только одним состоянием $M = -M_{\max} = -j_1 - j_2$, которое завершает наибольший мультиплет $J = j_1 + j_2$.

Мы можем подвести итог этого упражнения, сказав, что возможные значения полного углового момента J при сложении векторов подсистем с моментами j_1 и j_2 есть

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2. \quad (7.17)$$

Каждое значение J появляется только один раз, и легко проверить выполнение (7.5): мы использовали все квадраты нашей таблицы при перегруппировке приводимого пространства несвязанного представления (7.1) в неприводимые мультиплеты связанного представления (7.3). В то время как проекции (7.11) складываются алгебраически, величины угловых моментов складываются *векторно*; неравенства (7.17) дают точно такие же ограничения, которые будут справедливыми при сложении двух евклидовых векторов (*условия треугольника*). Однако квантовая механика накладывает дополнительное ограничение пространственного квантования для полного углового момента, допустимые значения (7.17) которого, в соответствии с общими правилами для группы $SU(2)$, являются целыми или полуцелыми, в зависимости от значений j_1 и j_2 . Результаты явного вычисления в *Задаче 22.1* находятся в согласии с этими общими рассуждениями.

7.3 Две частицы спина 1/2

Здесь мы рассмотрим более подробно простой пример двух частиц со спином 1/2, $s_1 = s_2 = 1/2$. Одночастичные спиноры χ_m , $m = \pm 1/2$, рассматривались в гл. 20.3. Два состояния каждой частицы порождают четыре состояния $\chi_m(1)\chi_{m'}(2)$ несвязанного представления (7.1). Теперь мы можем следовать схеме, набросанной в предыдущем пункте, Рис. 22.3.

Согласно нашим правилам, векторное сложение двух спинов определяет два мультиплета, *триплет* и *синглет*, с величинами полного спина

$$\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2 \quad (7.18)$$

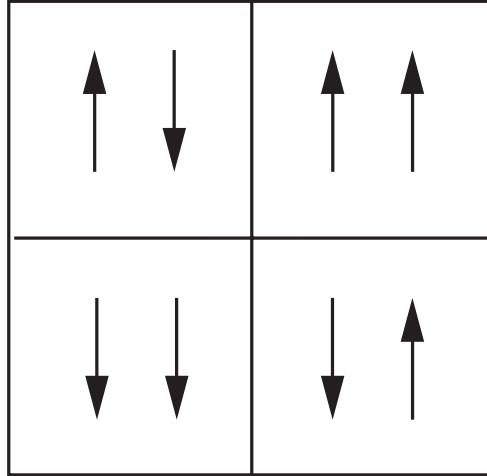


Рис. 7.3. Состояния системы двух спинов

равными $S = 1$ (три состояния, $S_z \equiv M = \pm 1, 0$) и $S = 0$ (одно состояние $M = 0$), соответственно. Наивысшее, $M = 1$, и наинизшее, $M = -1$, состояния, принадлежащие триплету, строятся однозначно по углам диаграммы,

$$|1/2, 1/2; 11\rangle = \uparrow\uparrow = \chi_+(1)\chi_+(2), \quad |1/2, 1/2; 1-1\rangle = \downarrow\downarrow = \chi_-(1)\chi_-(2). \quad (7.19)$$

Два состояния с $M = 0$ должны быть объединены в правильные линейные комбинации с $S = 1$ и $S = 0$. Повторяя вычисления предыдущего параграфа для $j_1 = j_2 = 1/2$ и $J = S = 1$, мы приходим к аналогу соотношения (7.15), триплетной комбинации с $M = 0$,

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)). \quad (7.20)$$

Ортогональная комбинация с $M = 0$, (7.16),

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)), \quad (7.21)$$

принадлежит синглету $S = 0$. Легко видеть, что попытка понизить проекцию S_z последующим действием оператора \hat{S}_- даёт состояние $|1-1\rangle$, (7.19), для триплет (7.20), в то время как попытка сделать то же самое для синглета (7.21) даёт нуль.

| Задача 7.2

Для системы из двух частиц со спином $1/2$ найти общие собственные векторы операторов S_x^2, S_y^2 и S_z^2 .

Решение Используя (7.18) и алгебру матриц Паули, мы докажем, что эти три оператора коммутируют, их собственные значения есть 0 или 1, поскольку возможны только проекции 0 и ± 1 . Один общий собственный вектор очевиден, синглетное состояние $|00\rangle$, (7.21). Также очевидно, что состояние $|10\rangle$, (7.20), соответствует определённым значениям $S_z^2 = 0$, $S_x^2 = S_y^2 = 1$. Две другие комбинации могут быть получены перестановкой осей; в базисе $|SS_z\rangle$ это

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|11\rangle + |1-1\rangle), \quad S_x^2 = S_z^2 = 1, \quad S_y^2 = 0, \quad (7.22)$$

и

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|11\rangle - |1-1\rangle), \quad S_y^2 = S_z^2 = 1, \quad S_x^2 = 0. \quad (7.23)$$

Отметим, что все три триплетных состояния, (7.19) и (7.20), *симметричны* по отношению к перестановке спинов $1 \leftrightarrow 2$, тогда как синглетное состояние (7.21) *антисимметрично*. Мы уже упоминали, рассматривая чётность и разложение тензора второго ранга, что внутренняя симметрия, соответствующая преобразованию, коммутирующему с вращением, должна быть одинаковой для всех членов мультиплетта. Пусть оператор *спинового обмена* $\hat{\mathcal{P}}^\sigma$ переставляет спиновые переменные пары. Тогда он может быть выражен через полный спин S пары,

$$\mathcal{P}^\sigma = (-)^{S+1}. \quad (7.24)$$

Другое выражение можно получить с помощью матриц Паули. Используя

$$(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) = 4(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2) = 4 \frac{\mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_1^2 - \mathbf{s}_2^2}{2} \quad (7.25)$$

и заменяя квадраты угловых моментов их собственными значениями, мы получаем

$$(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) = 2S(S+1) - 3 = \begin{cases} -3 & (S=0, \text{ синглет}) \\ 1 & (S=1, \text{ триплет}) \end{cases} \quad (7.26)$$

Следовательно, оператор обмена (7.24) может быть записан в виде

$$\hat{\mathcal{P}}^\sigma = \frac{1 + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)}{2}. \quad (7.27)$$

Задача 7.3

В некоторых намагниченных телах взаимодействие соседних спинов 1/2, $\vec{\sigma}_1$ и $\vec{\sigma}_2$, даётся формулой

$$H = A(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) + (\mathbf{B} \cdot [\vec{\sigma}_1 \times \vec{\sigma}_2]), \quad (7.28)$$

где скаляр A и вектор \mathbf{B} определяются структурой материала (*взаимодействие Дзялошинского*– Мория). Найти стационарные состояния системы двух спинов и их энергии.

Решение Удобно выбрать направление вектора \mathbf{B} в качестве оси z . Триплетные состояния $\psi_{1\pm 1} = \psi(S = 1, S_z = \pm 1)$ с полной проекцией спина $S_z = \pm 1$ стационарны и вырождены, второй член в (7.28) не даёт вклада в их энергию (он исчезает для параллельных спинов),

$$\psi_{11} = \chi_+(1)\chi_+(2), \quad \psi_{1-1} = \chi_-(1)\chi_-(2), \quad E_{11} = E_{1-1} = A. \quad (7.29)$$

Триплетное и синглетное состояния с $S_z = 0$ смешаны,

$$\psi_0^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+(1)\chi_-(2) \pm e^{-i\alpha} \chi_-(1)\chi_+(2) \right), \quad (7.30)$$

где фаза смешивания определяется из соотношения $\tan \alpha = B/A$, и соответствующие уровни энергии расщепляются,

$$E^{(\pm)} = -A \pm 2\sqrt{A^2 + B^2}. \quad (7.31)$$

Можно проверить правильность в пределе $B = 0$: состояние $\psi^{(-)}$ становится синглетом, $E = -3A$, а три оставшихся состояния образуют вырожденный триплет, $E = A$.

Задача 7.4

Обобщите свойство симметрии (7.23) для системы двух частиц с произвольными равными угловыми моментами $j_1 = j_2 \equiv j$. Найдите общее число симметричных, N_+ , и антисимметричных, N_- , состояний.

Решение Наивысшее состояние (с полным угловым моментом $J = J_{\max} = 2j$ и $M_{\max} = 2j$) является уникальным и, очевидно, симметричным. Поскольку понижающий оператор $J_- = j_{1-} + j_{2-}$ также симметричен, все состояния одного и того же мультиплетта имеют одинаковую симметрию, как и должно быть, так как обмен частиц является внутренней операцией, коммутирующей с вращениями системы как целого. Из двух состояний с

$M = M_{max} - 1$ одно, симметричное, принадлежит к тому же наивысшему мультиплету, а другое имеет $J = 2j - 1$ и, с учётом ортогональности к первому, антисимметрично, соотношение (7.16). Поэтому все состояния в мультиплете $J = 2j - 1$ антисимметричны. Рассматривая далее триплет состояний $M = 2j - 2$ и отделяя одно симметричное и одно антисимметричное состояние, принадлежащие предыдущим мультиплетам, мы находим, что третье состояние, которое открывает мультиплет $J = 2j - 2$, опять симметрично. Таким образом, мы находим, что симметрия является переменной,

$$: J = 2j, 2j - 2, \dots; \quad : J = 2j - 1, 2j - 3, \dots \quad (7.32)$$

Таким образом, все состояния $|JM\rangle$ обладают определённой обменной симметрией $(-)^{2j+J}$, которая определяется значением полного углового момента J . Этот результат справедлив для всех значений j , целых и полуцелых.

Общее число состояний каждой симметрии может быть вычислено из кратности $(2J + 1)$ мультиплетов (7.32), но проще заметить, что все $n = 2j + 1$ состояний на диагонали $m_1 = m_2$ таблицы, квадратной в случае $j_1 = j_2$, симметричны, а остальные $n^2 - n$ недиагональные состояния могут быть сгруппированы в симметричные и антисимметричные комбинации. В результате,

$$N_+ = n + \frac{n(n-1)}{2} = \frac{n(n+1)}{2} = (j+1)(2j+1), \quad N_- = \frac{n(n-1)}{2} = j(2j+1). \quad (7.33)$$

Задача 7.5

Покажите, что нормированная волновая функция системы двух частиц с $j_1 = j_2$ и $J = 0$ может быть записана в виде

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_m (-)^{j-m} |jm; j-m\rangle. \quad (7.34)$$

Решение Состояние $|00\rangle$ инвариантно относительно вращений (*скаляр*). Мы уже указывали (*Задача 21.4*) правила построения скаляра с помощью свёртки двух тензорных операторов одинакового ранга. В данном случае мы имеем, по сути, такую же задачу (обобщённую для полуцелых спинов

подсистем). Так как $J = 0$ влечёт также $M = 0$, требуемая комбинация с необходимостью имеет вид

$$|00\rangle = \sum_m X_m |jm; j-m\rangle, \quad \sum_m |X_m|^2 = 1. \quad (7.35)$$

Если это связанное состояние имеет $J = 0$, оно должно уничтожаться при действии \hat{J}_+ или \hat{J}_- . Действуя как в (7.12), мы видим, что результат зануляется, если $X_{m+1} = -X_m$. Это означает, что все коэффициенты X_m имеют одинаковую абсолютную величину и знакопеременны, так что решение, учитывая нормировку (7.35), может быть записано в виде

$$X_m = e^{i\alpha} (-)^{j-m} \frac{1}{\sqrt{2j+1}}. \quad (7.36)$$

Удобно выбрать коэффициенты вещественными, $\alpha = 0$. Как и в декартовом скалярном произведении, все проекции $m_1 = -m_2 = m$ входят в произведение (7.34) с одинаковым весом.

Задача 7.6

Для двух частиц со спинами $s_1 = s_2 = 1$ постройте оператор $\hat{\mathcal{P}}$ спинного обмена ($1 \leftrightarrow 2$).

Решение В соответствии с *Задачей 22.4*, этот оператор коммутирует с полным спином $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ и имеет в мультиплете со спином $S = 0, 1, 2$ величину $(-)^S$. С тремя возможными значениями спина легко построить многочлен второго порядка по $(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2)$,

$$\hat{\mathcal{P}} = (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2)^2 + (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) - 1. \quad (7.37)$$

7.4 Тензорные операторы и обобщённые правила отбора

Электрические и магнитные мультиполи являются типичными примерами операторов, образующих наборы $(2\lambda + 1)$ величин $T_{\lambda\mu}$, изолированных по отношению к группе вращений. При поворотах $T_{\lambda\mu}$ преобразуются в линейные комбинации величин, принадлежащих тому же набору, и правило преобразования для целого λ в точности такое же, как и для сферических функций $Y_{\lambda\mu}$. Такой набор операторов, реализующих неприводимые представления группы вращений, как было сказано, образует *тензорный*

оператор ранга λ . Физические следствия, которые вытекают из геометрических соображений, одинаковы для всех тензорных операторов одного ранга, независимо от их физической природы.

В случае оператора, пропорционального сферической функции $Y_{\lambda\mu}$, его действие на состояние $|J_1 M_1\rangle$ может рассматриваться как сложение векторов угловых моментов двух «подсистем», \mathbf{J}_1 состояния и $\vec{\lambda}$ оператора. В соответствии с правилами группы вращений, результирующий угловой момент

$$\mathbf{J}_2 = \mathbf{J}_1 + \vec{\lambda} \quad (7.38)$$

может принимать все значения J_2 , с шагом единица, в пределах, установленных условием треугольника (7.17),

$$|J_1 - \lambda| \leq J_2 \leq J_1 + \lambda. \quad (7.39)$$

Проекции угловых моментов суммируются алгебраически, (7.11),

$$M_2 = M_1 + \mu. \quad (7.40)$$

Фактически, условия треугольника (7.39) симметричны по отношению ко всем трём угловым моментам J_1 , J_2 и λ .

Соотношения (7.39) и (7.40) определяют *правила отбора*, гл. 21.5, которые одинаковы для любого тензорного оператора $T_{\lambda\mu}$: матричные элементы $\langle a_2 J_2 M_2 | T_{\lambda\mu} | a_1 J_1 M_1 \rangle$ тензорного оператора для любых состояний с определёнными квантовыми числами углового момента (и произвольными дополнительными квантовыми числами a_1, a_2) могут быть отличны от нуля в том и только том случае, если выполняются условия (7.39) и (7.40). Например, *мультипольные переходы* мультиполярности λ строго запрещены, если $\Delta J = |J_2 - J_1| > \lambda$ или $\lambda > J_1 + J_2$. В частности, правила отбора для углового момента накладывают ограничение на мультипольные моменты, которые могли бы иметь ненулевые *средние* в состоянии с угловым моментом J . Здесь нас интересуют *диагональные* элементы, $J_1 = J_2 = J$. Правило (7.39) показывает, что ранг λ разрешённых мультиполей удовлетворяет условию

$$0 \leq \lambda \leq 2J. \quad (7.41)$$

Как следует из (7.41), система с угловым моментом $J = 0$ имеет только $\lambda = 0$, и, следовательно, может обладать ненулевым зарядом (21.62), но ни одним из высших мультиполей. Грубо говоря, равномерное представление

всех пространственных направлений, специфичное для $J = 0$, усредняет все возможные внутренние неоднородности. Система со спином $1/2$, такая, как нуклон или электрон, может иметь $\lambda = 0$ или 1 , т. е. заряд и дипольный момент, электрический (21.61) или магнитный (21.65). Ненулевой квадрупольный момент, $\lambda = 2$, появляется только для систем с $J \geq 1$. Тензорные операторы могут быть определены также для *полуцелого* ранга λ , и правила отбора (7.40) и (7.41) в точности те же самые. Однако, они вообще не имеют диагональных матричных элементов. На практике такие случаи возникают при создании или уничтожении частиц с полуцелым спином.

7.5 Приложение к электромагнитным мультиполям

Рассматривая свойства тензорных операторов относительно вращений и их поведение при пространственном отражении, мы можем прийти к важным выводам в отношении мультипольных моментов как физических наблюдаемых.

Электрический заряд (21.62) является *скалярным* инвариантом относительно инверсии. Электрический диполь (21.63) меняет знак, как и радиус-вектор, или любой «нормальный» (*полярный*) вектор. Импульс \mathbf{p} есть также полярный вектор, в то время как орбитальный угловой момент (4.34) есть *аксиальный* вектор, его компоненты не меняют знак при инверсии. Как видно из геометрических соображений (вращение не меняет смысла в инвертированной системе координат), любой угловой момент, включая спин, должен быть аксиальным вектором. Скалярное произведение аксиального вектора и полярного вектора есть *псевдоскаляр*. Подобно скалярам, псевдоскаляры инвариантны относительно вращений, но меняют знак при инверсии. Важным примером псевдоскаляра является *спиральность* частицы,

$$h = \left(\mathbf{s} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \right), \quad (7.42)$$

то есть проекция спина на направление движения.

Таким образом, в дополнение к тензорным свойствам относительно вращений, мы можем классифицировать операторы \hat{O} по их поведению при пространственной инверсии \hat{P} , т. е. по их чётности $\Pi(O)$, определяемой оператором преобразования $\hat{O}' = \hat{P}\hat{O}\hat{P} = \pm\hat{O} = \Pi(O)\hat{O}$. Действуя между состояниями $|i\rangle$ и $|f\rangle$ с определённой чётностью, Π_i и Π_f соответственно, оператор \hat{O} имеет дополнительное правило отбора

$$\Pi_f = \Pi(O)\Pi_i, \quad \Delta\Pi = \Pi(O). \quad (7.43)$$

Легко видеть, что правила отбора по чётности для электрических и магнитных мультиполей дополняют друг друга (иногда говорится, что электрические мультиполи имеют *естественную чётность*),

$$\underline{E}\lambda: \quad \Delta\Pi = (-)^{\lambda}, \quad \underline{M}\lambda: \quad \Delta\Pi = (-)^{\lambda+1}. \quad (7.44)$$

Таким образом, средние значения (диагональные матричные элементы, $f = i$) равны нулю для нечётных электрических и чётных магнитных мультиполей, если состояние имеет определённую чётность. В частности, любая система в состоянии с определённой чётностью не может иметь ненулевой электрический дипольный момент.

В таблице 1 приведены разрешённые электромагнитные мультиполи для квантовых систем с различными значениями моментов (спинов). Величины в скобках допускаются симметрией относительно вращений, но подавлены по чётности. Существование гипотетического *магнитного монополя*, $M0$ оператора, строго запрещено, если чётность точно сохраняется. Нуклоны со спином $1/2$ могут иметь электрический заряд и магнитный момент; электрический дипольный момент может возникнуть, если чётность не сохраняется, и стационарные состояния не имеют определённой чётности. Высшие мультиполи для нуклонов строго запрещены симметрией относительно вращений.

Таблица 22.1.

Spin	E0	M0	E1	M1	E2	M2	E3	M3
0	+	—	—	—	—	—	—	—
1/2	+	—	(—)	+	—	—	—	—
1	+	—	(—)	+	+	(—)	—	—
3/2	+	—	(—)	+	+	(—)	(—)	+

Сохранение чётности в сильных и электромагнитных взаимодействиях означает, что соответствующий гамильтониан инвариантен относительно инверсии (истинный скаляр). Тогда его собственные состояния всегда могут быть выбраны таким образом, чтобы они имели определённую чётность. Однако этот выбор не является обязательным. Если некоторые состояния с противоположными чётностями имеют одинаковую энергию (вырождены), любая их линейная комбинация также будет стационарна, но не иметь определённой чётности. Например, круговая поляризация фотона есть его спиральность (7.42). Циркулярно поляризованный фотон не имеет определённой чётности. При инверсии такое состояние превращается в состояние с противоположной круговой поляризацией и той же энергией. Если излучение неполяризованной системы содержит лево- и право- поляризованные

фотоны с *различными* вероятностями, это означает, что чётность в переходе не сохраняется. Аналогичные выводы можно сделать из экспериментов с продольно (вдоль импульса) поляризованными массивными частицами.

7.6 Векторное сложение угловых моментов

Мы нашли, что две подсистемы с квантовыми числами вращения j_1, m_1 и j_2, m_2 , будучи соединены вместе, могут образовывать системы с различными квантовыми числами j_3, m_3 по отношению к их вращению *как целого*. Амплитуды вероятности для различных возможных значений j_3, m_3 при векторном сложении даются *коэффициентами Клебша*–Гордана (CGC), которые часто обозначаются как $\langle j_3 m_3 | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle$:

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle = \sum_{j_3 m_3} \langle j_3 m_3 | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle |(j_1 j_2) j_3 m_3\rangle, \quad (7.45)$$

где скобки в последнем обозначении для связанного состояния напоминают нам о величинах угловых моментов (j_1, j_2) составных частей. Разрешённые значения j_3, m_3 в (7.45) даются правилами отбора (7.39) и (7.40).

CGC описывают преобразование между двумя возможными наборами базисных состояний (две несвязанных подсистемы и объединённая система). Оба набора являются полными, ортонормированными и одинаково хорошими, хотя могут подходить лучше или хуже для данной физической ситуации. Переход от одного набора к другому является *унитарным*, так что коэффициенты $\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle$, которые выполняют обратное преобразование,

$$|(j_1 j_2) j_3 m_3\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle, \quad (7.46)$$

комплексно сопряжены коэффициентам в (7.45). При стандартном выборе фаз для матричных элементов углового момента, CGC *вещественны*, и мы будем использовать для них старомодное обозначение

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3} = \langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle = \langle j_3 m_3 | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle. \quad (7.47)$$

Условия нормировки для обоих наборов состояний дают

$$\sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3} C_{j_1 m_1' j_2 m_2'}^{j_3' m_3'} = \delta_{j_3 j_3'} \delta_{m_3 m_3'} \quad (7.48)$$

и

$$\sum_{j_3 m_3} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3} C_{j_1 m'_1 j_2 m'_2}^{j_3 m_3} = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (7.49)$$

Задача 7.7

Установите рекуррентные соотношения для CGC,

$$\mu_+(j_3 m_3) C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3+1} = \mu_-(j_1 m_1) C_{j_1 m_1-1 j_2 m_2}^{j_3 m_3} + \mu_-(j_2 m_2) C_{j_1 m_1 j_2 m_2-1}^{j_3 m_3}; \quad (7.50)$$

$$\mu_-(j_3 m_3) C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3-1} = \mu_+(j_1 m_1) C_{j_1 m_1+1 j_2 m_2}^{j_3 m_3} + \mu_+(j_2 m_2) C_{j_1 m_1 j_2 m_2+1}^{j_3 m_3}, \quad (7.51)$$

где $\mu_{\pm}(jm)$ есть матричные элементы для повышающей и понижающей компонент углового момента (16.51).

Решение Подействуем операторами $j_{3\pm} = j_{1\pm} + j_{2\pm}$ на обе части разложения (7.46) связанной системы $|j_3 m_3\rangle$, разложим результирующее состояние $|j_3 m_3 \pm 1\rangle$ снова по CGC и сравним с выражением в правой стороне равенства.

Задача 7.8

Покажите, что

$$\frac{C_{j_1 m_1-1 j_2 m_2}^{j_3 j_3}}{C_{j_1 m_1 j_2 m_2-1}^{j_3 j_3}} = -\frac{\mu_-(j_2 m_2)}{\mu_-(j_1 m_1)}. \quad (7.52)$$

Решение Рассмотрим соотношение (7.46) на верхней ступени лестницы, $m_3 = j_3$.

Эти соотношения, вместе с условиями нормировки (7.50) и (7.51), можно использовать для последовательного вычисления CGC. Фазы, которые не могут быть определены таким способом, могут быть фиксированы, например, при помощи *условий Кондона*–*Шортли* [?]. Выбор фаз для CGC,

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3} = (-)^{j_1+j_2-j_3} C_{j_1-m_1 j_2-m_2}^{j_3-m_3} = (-)^{j_1+j_2-j_3} C_{j_2 m_2 j_1 m_1}^{j_3 m_3}, \quad (7.53)$$

связан с операцией *обращения времени*: когда мы меняем знаки всех проекций, это эквивалентно обратному обходу вокруг треугольника. Фазовые соглашения для обращённых во времени состояний обсуждались в гл. 20.6.

Другое свойство, связанное с симметрией, выясняется, когда мы заменяем исходное условие треугольника,

$$\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 = \mathbf{j}_3, \quad (7.54)$$

на, казалось бы, эквивалентное

$$-\mathbf{j}_3 + \mathbf{j}_2 = -\mathbf{j}_1. \quad (7.55)$$

Этот переход есть обращение во времени \mathbf{j}_2 , и даёт соответствующую фазу. Кроме того, нормировка CGC (7.48) была определена по отношению к суммированию по нижним индексам и теперь должна быть изменена. Поскольку геометрический смысл (7.54) и (7.55) одинаков, зависимость от магнитных квантовых чисел (ориентация системы) не может измениться. Поэтому CGC для этих двух представлений должны быть просто пропорциональны,

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3} = x C_{j_3 - m_3 j_2 m_2}^{j_1 - m_1}, \quad (7.56)$$

где x^2 не зависит от проекций. Возводя в квадрат обе части (7.56), выполняя суммирование по всем проекциям и используя нормировку (7.48), мы получаем

$$x^2 = \frac{2j_3 + 1}{2j_1 + 1}. \quad (7.57)$$

С фазовыми множителями, снова определёнными из операции обращения времени, мы можем записать налагаемые симметрией связи между (7.54, 7.55), и аналогичное соотношение при замене $\mathbf{j}_3 \Rightarrow -\mathbf{j}_1$ как

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3} = (-)^{j_2 + m_2} \sqrt{\frac{2j_3 + 1}{2j_1 + 1}} C_{j_3 - m_3 j_2 m_2}^{j_1 - m_1} = (-)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{2j_3 + 1}{2j_2 + 1}} C_{j_1 m_1 j_3 - m_3}^{j_2 - m_2}. \quad (7.58)$$

CGC определены для заданного упорядочения связанных моментов, Рис. 22.4. Но геометрически условие треугольника симметрично по отношению ко всем трём моментам. Взамен CGC можно определить эквивалент $3j$ -символов Вигнера,

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-)^{j_1 - j_2 - m_3}}{\sqrt{2j_3 + 1}} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 - m_3}. \quad (7.59)$$

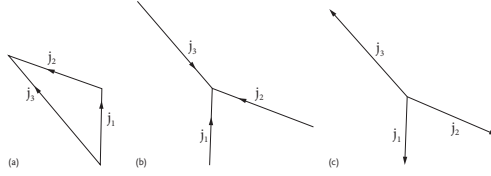


Рис. 7.4. Сложение угловых моментов: $\vec{1} + \vec{2} = \vec{3}$, a ; $\vec{1} + \vec{2} + \vec{3} = 0$, b и c

Как видно из CGC в правой части (7.59), здесь мы имеем $m_1 + m_2 = -m_3$. Определение Вигнера соответствует условию треугольника в симметричной форме

$$\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3 = 0. \quad (7.60)$$

$3j$ -символ имеет более простые свойства: при обмене двух столбцов он приобретает симметричную фазу $(-)^{j_1+j_2+j_3}$.

Условия ортогональности (7.48) и (7.49) принимают для $3j$ -символов (7.59) вид

$$\sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j'_3 \\ m_1 & m_2 & m'_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_3 + 1} \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3}, \quad (7.61)$$

$$\sum_{j_3 m_3} (2j_3 + 1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (7.62)$$

Переход от несимметричного соотношения (7.53) к симметричному (7.61) можно опять рассматривать, Рис. 22.4b, как изменение углового момента \mathbf{j}_3 при обращении времени. Естественное изменение $m_3 \rightarrow -m_3$ сопровождается обычным изменением фазы при обращении времени: $(-)^{j_3-m_3}$. Можно сообразить, что изменение всех трёх проекций эквивалентно общему обращению времени и, поскольку в $3j$ -символе $m_1 + m_2 + m_3 = 0$,

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (7.63)$$

Фаза в (7.63) такая же, как при обмене столбцов, см. выше, потому что, как легко видеть, этот обмен эквивалентен обратному движению вокруг треугольника.

7.7 Теорема Вигнера–Эккарта

Мы вывели правила отбора для тензорных операторов $\hat{T}_{\lambda\mu}$, связанные с инвариантностью относительно вращений. Для угловых моментов J_2 , J_1 и λ , удовлетворяющих (7.39) и (7.41), в общем случае имеется много ненулевых матричных элементов (мы явно указываем другие квантовые числа состояний, которые фиксированы для данного набора матричных элементов)

$$\langle a_2 J_2 M_2 | \hat{T}_{\lambda\mu} | a_1 J_1 M_1 \rangle. \quad (7.64)$$

Все матричные элементы с различными комбинациями проекций отражают одну и ту же физику, различаясь взаимной ориентацией состояний $|a_1 J_1 M_1\rangle$ и $|a_2 J_2 M_2\rangle$, и зонда $\hat{T}_{\lambda\mu}$. Поэтому, например, в таблицах физических величин можно найти только одно число для магнитного момента частицы или ядра вместо множества чисел, соответствующих различным матричным элементам $\langle JM' | \hat{\mu}_\mu | JM \rangle$. Является возможным отделить универсальную геометрическую информацию от специфических внутренних характеристик изучаемой системы.

Рассмотрим действие тензорного оператора $\hat{T}_{\lambda\mu}$ на начальное состояние $|a_1 J_1 M_1\rangle$. В результате векторного сложения угловых моментов (7.38) можно получить для промежуточного состояния единственную проекцию углового момента, $M' = M_1 + \mu$, и множество значений углового момента J' , разрешённых условием треугольника $\mathbf{J}' = \mathbf{J} + \vec{\lambda}$. Относительные амплитуды возможных промежуточных состояний $|J'M'\rangle$ даются CGC, как в (7.46),

$$\hat{T}_{\lambda\mu} |a_1 J_1 M_1\rangle = \sum_{J'M'} C_{\lambda\mu J_1 M_1}^{J'M'} |a_1 (T_\lambda J_1) J'M'\rangle, \quad (7.65)$$

где сумма по M' содержит только один член. Теперь мы должны спроецировать состояние $|J'M'\rangle$ на конечное состояние $|a_2 J_2 M_2\rangle$. Из-за ортогональности собственных функций, соответствующих различным собственным значениям эрмитовых операторов, в сумме (7.65) выживает только член $J' = J_2$, $M' = M_2$. Кроме того, матричный элемент (7.64) не может измениться, если начальное состояние, конечное состояние и оператор подвергаются *общему* вращению. Поэтому результат проекции $\langle a_2 J_2 M_2 | J'M' \rangle$ не зависит от конкретного значения $M_2 = M' = M_1 + \mu$.

Мы пришли к важному выводу: в любом матричном элементе (7.64) тензорного оператора между состояниями с определёнными угловым моментом и его проекцией, вся зависимость от магнитного квантового числа M_1 , μ и M_2 входит только через CGC. Остающийся множитель не зависит от M и даёт физическую амплитуду процесса, независимо от ориентации

системы. Все правила отбора по отношению к вращениям уже включены в CGC. Это суть теоремы Вигнера–Эккарта.

Используя $3j$ -symbol вместо CGC, запишем результат в виде

$$\langle a_2 J_2 M_2 | \hat{T}_{\lambda\mu} | a_1 J_1 M_1 \rangle = (-)^{J_2 - M_2} \begin{pmatrix} J_2 & \lambda & J_1 \\ -M_2 & \mu & M_1 \end{pmatrix} \langle a_2 J_2 || T_\lambda || a_1 J_1 \rangle. \quad (7.66)$$

Здесь не зависящий от M множитель вводится как заключённый в двойные скобки (*редуцированный*) матричный элемент. Фазовый множитель для конечного состояния в (7.66) согласуется с изменением при отражении времени: конечное состояние ($M_2 = \mu + M_1$) должно быть повернуто вспять, чтобы сделать ситуацию симметричной. Мы видим, что геометрическая часть информации отделяется в $3j$ -символ, тогда как внутренняя, не зависящая от ориентации, физика сосредоточена в редуцированном матричном элементе. Как указывалось ранее, достаточно одного числа, чтобы описать весь набор матричных элементов (7.64), если квантовые числа вращения состояний и операторов известны.

В физических таблицах значения для средних значений мультипольных операторов в состоянии с угловым моментом J в соответствии с соглашением приводятся для состояния с максимальной проекцией $M = J$. Тогда $\mu = 0$, и табличное значение

$$T_\lambda(a, J) \equiv \langle a J J | \hat{T}_{\lambda 0} | a J J \rangle. \quad (7.67)$$

Например, векторная ($\lambda = 1$) компонента в (7.67) есть $V_0 = V_z$, см. (21.48). Табличное значение магнитного момента есть, следовательно, среднее значение его проекции на ось квантования z в состоянии с максимальной упорядоченностью системы вдоль z -оси.

7.8 Векторная модель

Теорема Вигнера–Эккарта даёт нам обоснование простой процедуры, которую использовали на заре атомной физики для расчётов средних значений, как, например,

$$\langle a J M' | \hat{\mathbf{V}} | a J M \rangle, \quad (7.68)$$

где начальное и конечное состояния принадлежат одному и тому же мультиплету, но могут отличаться проекцией углового момента, а $\hat{\mathbf{V}}$ есть произвольный векторный оператор.

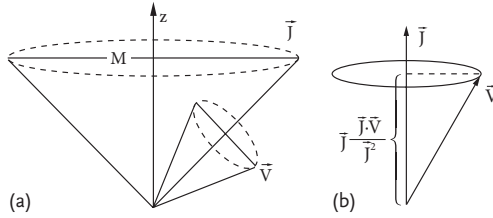


Рис. 7.5. Иллюстрация к векторной модели, а; смысл выражения (7.70), b

Наивный, хотя и правильный способ рассуждения состоит в следующем. Квазиклассический образ, Рис. 22.5a, состояния $|JM\rangle$ есть прецессия. Вектор углового момента \mathbf{J} длины $\sqrt{J(J+1)}$ имеет проекцию M на ось квантования, она прецессирует вокруг этой оси, образуя конус с фиксированным полярным углом θ , $\cos \theta = M/\sqrt{J(J+1)}$. Поперечные компоненты $J_{x,y}$ усредняются и имеют нулевые средние $\langle J_x \rangle$ и $\langle J_y \rangle$, но ненулевые средние квадраты величин $\langle J_x^2 \rangle$ и $\langle J_y^2 \rangle$. Сумма $\langle J_x^2 + J_y^2 \rangle$ дополняет M^2 до полной величины $J(J+1)$ квадрата углового момента, *Задача 16.4*. В этой ситуации любой вектор \mathbf{V} , относящийся к системе, может быть в среднем направлен только вдоль имеющегося выделенного направления, а именно, углового момента \mathbf{J} . Эта пропорциональность двух векторов может быть записана как *векторная модель*

$$\hat{\mathbf{V}} = v(a, J)\hat{\mathbf{J}}, \quad (7.69)$$

где коэффициент пропорциональности есть скаляр $v(a, J)$, который может зависеть от величины углового момента и других характеристик состояния (a) , и равенство следует понимать как эквивалентность двух операторов для любого матричного элемента *внутри мультиплетта*. Мы находим этот множитель, беря проекцию на \mathbf{J} в обеих частях (7.69), Рис. 22.5b:

$$v(a, J) = \frac{\langle (\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}) \rangle}{J^2} = \frac{\langle (\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}) \rangle}{J(J+1)}. \quad (7.70)$$

Вместо этого нестрогого вывода мы можем использовать теорему Вигнера-Эккарта (7.66). Вспоминая, что любой вектор является тензорным оператором ранга 1 и вводя его сферические компоненты V_μ согласно (16.99), мы можем написать матричный элемент (7.67) между состояниями одного мультиплетта как

$$\langle aJM' | \hat{V}_\mu | aJM \rangle = (-)^{J-M'} \begin{pmatrix} J & 1 & J \\ -M' & \mu & M \end{pmatrix} \langle aJ || V || aJ \rangle. \quad (7.71)$$

Точно таким же способом мы находим для углового момента

$$\langle aJM'|\hat{J}_\mu|aJM\rangle = (-)^{J-M'} \begin{pmatrix} J & 1 & J \\ -M' & \mu & M \end{pmatrix} \langle aJ\|J\|aJ\rangle. \quad (7.72)$$

Устраняя $3j$ -символ, мы находим, что матричные элементы любого вектора $\hat{\mathbf{V}}$ и углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ пропорциональны в векторной модели (7.69) с коэффициентом

$$v(a, J) = \frac{\langle aJ\|V\|aJ\rangle}{\langle aJ\|J\|aJ\rangle}. \quad (7.73)$$

Стоит ещё раз подчеркнуть, что вся процедура имеет смысл только для переходов *внутри* мультиплета $|aJM\rangle$. В то время как $\hat{\mathbf{J}}$ действует только внутри мультиплета, произвольный векторный оператор $\hat{\mathbf{V}}$ может иметь также недиагональные по J и a матричные элементы (7.67), которые не связаны с матричными элементами $\hat{\mathbf{J}}$.

Для установления окончательного соответствия уравнений (7.70) и (7.73), вычислим средние значения скалярных величин $\hat{\mathbf{J}}^2$ и $(\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}})$. Расчёт прост: запишем скалярное произведение в сферических компонентах (16.120); выразим искомый матричный элемент в виде произведения матричных элементов отдельных векторов с суммированием по промежуточным проекциям (поскольку по крайней мере один из векторов есть $\hat{\mathbf{J}}$, все промежуточные состояния имеют одинаковые квантовые числа aJ); применим теорему Вигнера-Эккарта (7.66) к каждому множителю; суммируем по промежуточным проекциям с помощью (7.61). В результате получается

$$\langle aJM' | (\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | aJM \rangle = \frac{\delta_{M'M}}{2J+1} \langle aJ\|J\|aJ\rangle \langle aJ\|V\|aJ\rangle. \quad (7.74)$$

Здесь $\hat{\mathbf{V}}$ есть произвольный векторный оператор. Как и должно быть, матричные элементы скалярной величины не зависят от ориентации ($M = M'$). В частном случае $\hat{\mathbf{V}} \Rightarrow \hat{\mathbf{J}}$ левая сторона (7.74) равна $\delta_{M'M} J(J+1)$. Отсюда определяется редуцированный матричный элемент углового момента

$$\langle aJ\|J\|aJ\rangle^2 = J(J+1)(2J+1). \quad (7.75)$$

В конечном итоге, объединяя эти результаты, получаем

$$\langle aJM' | V_\mu | aJM \rangle = \frac{\langle aJ | (\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | aJ \rangle}{J(J+1)} \langle aJM' | J_\mu | aJM \rangle, \quad (7.76)$$

что есть не что иное, как векторная модель (7.69, 7.70). Матричный элемент скаляра $(\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}})$ в (7.76) не зависит от M .

7.9 Электрический дипольный момент и анапольный момент

Зная, что сохранение чётности есть не универсальное правило природы, а также используя векторную модель, мы можем вернуться к вопросу о разрешённых и запрещённых мультиполях. Как видно из таблицы 22.1, существование электрического дипольного момента в системе со спином $\geq 1/2$ допускается, если снять ограничения, связанные с сохранением чётности. Конечно, мы по-прежнему сохраняем ограничения, налагаемые инвариантностью относительно вращений.

На самом деле проблема более сложна. Дипольный оператор \mathbf{d} есть полярный вектор. Его среднее значение может быть вычислено с помощью векторной модели. Это даёт эффективный дипольный оператор для частицы со спином $1/2$:

$$\hat{\mathbf{d}} = \frac{\langle (\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) \rangle}{\hat{s}^2} \hat{\mathbf{s}} = \frac{4}{3} \langle (\mathbf{d} \cdot \mathbf{s}) \rangle \hat{\mathbf{s}}. \quad (7.77)$$

Результат определяется средним значением псевдоскалярной величины $(\mathbf{d} \cdot \mathbf{s})$. Поскольку, в результате слабых взаимодействий, стационарные состояния не имеют определённой чётности, это среднее значение может отличаться от нуля. Однако ненулевое значение этой величины противоречило бы инвариантности относительно обращения времени.

Действительно, спиноры $|1/2, m\rangle$ с проекцией спина m преобразуются в соответствии с (20.67) при обращении времени. Дипольный момент $\hat{\mathbf{d}}$, как и вектор координаты $\hat{\mathbf{r}}$, инвариантен относительно \mathcal{T} -преобразования ("Т-чётен"), тогда как вектор спина $\hat{\mathbf{s}}$, как и любой угловой момент, \mathcal{T} -нечётен. Поэтому скалярное произведение $(\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{s}})$ является \mathcal{T} -нечётным. Если \mathcal{T} -инвариантность имеет место, среднее значение обращённого во времени оператора в обращённом во времени состоянии должно быть таким же, как и до \mathcal{T} -преобразования,

$$\langle 1/2, m | (\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) | 1/2, m \rangle = \langle 1/2, -m | -(\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) | 1/2, -m \rangle^* = -\langle 1/2, -m | (\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) | 1/2, -m \rangle \quad (7.78)$$

(средние значения любого эрмитового оператора вещественны). В то же время величина $(\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{s}})$ является скаляром относительно вращения, и её среднее значение одинаково во всех состояниях мультиплета. Значит, оно равно нулю. Этот вывод справедлив для состояния с любым угловым моментом J (не обязательно со спином $1/2$). Ненулевая спиральность $\propto (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{s}})$,

в противоположность (7.78), может существовать, будучи произведением двух \mathcal{T} -нечётных векторов. \mathcal{T} -инвариантность также не противоречит существованию \mathcal{T} -нечётных векторов, таких как магнитный момент $\vec{\mu}$.

Мы показали, что ненулевой электрический дипольный момент частицы в стационарном состоянии был бы свидетельством комбинации несохранения чётности и нарушения инвариантности относительно обращения времени [?]. Интенсивный экспериментальный поиск дипольного момента частицы пока не дал результата. Текущие данные дают только верхний предел на уровне 10^{-23} е·см для протона, 10^{-25} е·см для нейтрона и 10^{-26} е·см для электрона. Положительный результат имел бы большое влияние на выбор теории за пределами общепринятой в настоящее время *Стандартной Модели* элементарных частиц.

Предсказанный очень давно (*Зельдович, 1958*) *ананольный момент* недавно был открыт экспериментально [20] в ядрах ^{133}Cs . Это количественная характеристика для тока в тороидальной катушке; основной вклад в ананольный момент связан с оператором

$$\hat{\mathbf{a}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{s}}]. \quad (7.79)$$

Мы видим, что $\hat{\mathbf{a}}$ есть полярный \mathcal{T} -нечётный вектор, который может существовать в квантовых состояниях с ненулевым спином J , соответствующий эффективный оператор равняется

$$\hat{\mathbf{a}} = \frac{\langle (\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \rangle}{J(J+1)} \hat{\mathbf{J}}. \quad (7.80)$$

Величина $(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{J}})$ есть \mathcal{T} -чётный псевдоскаляр и требует только несохранения чётности, но не нарушения \mathcal{T} -чётности. Ананольный момент был обнаружен с помощью наблюдения нарушения чётности в атомных радиационных переходах, индуцированных слабыми взаимодействиями между атомными электронами и ядром.

7.10 Ряды Клебша–Гордана

Важные практические применения основаны на рассмотрении вращения связанной системы.

Пусть произвольный оператор вращения \hat{R} действует в соответствии с (21.1) на систему в квантовом состоянии $|JM\rangle$. Если система состоит из двух связанных подсистем с моментами J_1 и J_2 ,

$$|(J_1 J_2) JM\rangle = \sum_{M_1 M_2} C_{J_1 M_1 J_2 M_2}^{JM} |J_1 M_1; J_2 M_2\rangle, \quad (7.81)$$

мы можем применить такое же вращение к правой стороне равенства, действуя на обе части по отдельности

$$\hat{\mathcal{R}}|J_1 M_1; J_2 M_2\rangle = \sum_{M'_1 M'_2} D_{M'_1 M_1}^{J_1}(\mathcal{R}) D_{M'_2 M_2}^{J_2}(\mathcal{R}) |J_1 M'_1; J_2 M'_2\rangle. \quad (7.82)$$

Тогда

$$\hat{\mathcal{R}}|(J_1 J_2) J M\rangle = \sum_{M_1 M_2 M'_1 M'_2} C_{J_1 M_1 J_2 M_2}^{J M} D_{M'_1 M_1}^{J_1}(\mathcal{R}) D_{M'_2 M_2}^{J_2}(\mathcal{R}) |J_1 M'_1; J_2 M'_2\rangle. \quad (7.83)$$

С другой стороны, результат (21.1) эквивалентен

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{R}}|(J_1 J_2) J M\rangle &= \sum_{M'} D_{M' M}^J(\mathcal{R}) |(J_1 J_2) J M'\rangle \\ &= \sum_{M' M'_1 M'_2} C_{J_1 M'_1 J_2 M'_2}^{J M'} D_{M' M}^J(\mathcal{R}) |J_1 M'_1; J_2 M'_2\rangle. \end{aligned} \quad (7.84)$$

Поскольку несвязанные состояния ортонормированы, мы можем сравнить коэффициенты перед ними в (7.83) и (7.84), что даёт

$$\sum_{M_1 M_2} D_{M'_1 M_1}^{J_1}(\mathcal{R}) D_{M'_2 M_2}^{J_2}(\mathcal{R}) C_{J_1 M_1 J_2 M_2}^{J M} = \sum_{M'} D_{M' M}^J(\mathcal{R}) C_{J_1 M'_1 J_2 M'_2}^{J M'}. \quad (7.85)$$

Если мы умножим обе части на $C_{J_1 K_1 J_2 K_2}^{J M}$ и просуммируем по J и M , свойство ортогональности (7.49) приводит к важному результату:

$$D_{M_1 K_1}^{J_1}(\mathcal{R}) D_{M_2 K_2}^{J_2}(\mathcal{R}) = \sum_{J M M'} C_{J_1 M_1 J_2 M_2}^{J M'} C_{J_1 K_1 J_2 K_2}^{J M} D_{M' M}^J(\mathcal{R}), \quad (7.86)$$

где мы переименовали $M'_1, M'_2 \rightarrow M_1, M_2$.

Ряды Клебша – Гордана (7.86) позволяют разложить произведение D -функций в сумму D -функций того же аргумента, подтверждая полноту матричных элементов конечных вращений как функций на группе. Как частный случай, с помощью (21.14) получаем аналог этого соотношения для сферических функций,

$$\frac{Y_{\ell_1 m_1}(\mathbf{n})}{\sqrt{2\ell_1 + 1}} \frac{Y_{\ell_2 m_2}(\mathbf{n})}{\sqrt{2\ell_2 + 1}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{\ell m} C_{\ell_1 m_1 \ell_2 m_2}^{\ell m} C_{\ell_1 0 \ell_2 0}^{\ell 0} \frac{Y_{\ell m}(\mathbf{n})}{\sqrt{2\ell + 1}}, \quad (7.87)$$

где все сферические функции относятся к тем же углам $\mathbf{n} = (\theta, \varphi)$. Конечно, суммирование по m в правой части (7.87) [а также соответствующее суммирование в (7.86)] является избыточным, поскольку выживает только один член $m = m_1 + m_2$, но эта форма является более симметричной. Наконец, для полиномов Лежандра $P_\ell(\cos \theta) = P_\ell(x)$ мы получаем

$$P_{\ell_1}(x)P_{\ell_2}(x) = \sum_{\ell} \left[C_{\ell_1 0 \ell_2 0}^{\ell 0} \right]^2 P_{\ell}(x). \quad (7.88)$$

В уравнениях (7.87) и (7.88), где все угловые моменты ℓ, ℓ_1, ℓ_2 являются целыми, мы видим, что левая сторона имеет чётность $(-)^{\ell_1 + \ell_2}$, тогда как чётность ℓ члена в правой стороне равна $(-)^{\ell}$. Это соотношение имеет место тогда и только тогда, когда члены с неправильной чётностью исчезают,

$$C_{\ell_1 0 \ell_2 0}^{\ell 0} = 0 \quad \ell_1 + \ell_2 + \ell = \text{нечётное}. \quad (7.89)$$

Тот же результат следует и из инвариантности относительно обращения времени, см. первое равенство в (7.53).

Вместе с условием ортогональности (21.21) разложение Клебша-Гордана определяет интеграл от трёх D -функций

$$\int d\mathcal{R} D_{M^* M}^{J^*}(\mathcal{R}) D_{M'_1 M_1}^{J_1}(\mathcal{R}) D_{M'_2 M_2}^{J_2}(\mathcal{R}) = \frac{8\pi^2}{2J+1} C_{J_1 M_1 J_2 M_2}^{J M} C_{J_1 M'_1 J_2 M'_2}^{J M'}. \quad (7.90)$$

Для сферических функций мы получаем отсюда

$$\int d\mathbf{n} Y_{\ell m}^*(\mathbf{n}) Y_{\ell_1 m_1}(\mathbf{n}) Y_{\ell_2 m_2}(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)}{4\pi(2\ell + 1)}} C_{\ell_1 m_1 \ell_2 m_2}^{\ell m} C_{\ell_1 0 \ell_2 0}^{\ell 0}, \quad (7.91)$$

и для полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^1 dx P_{\ell}(x) P_{\ell_1}(x) P_{\ell_2}(x) = \frac{2}{2\ell + 1} \left[C_{\ell_1 0 \ell_2 0}^{\ell 0} \right]^2. \quad (7.92)$$

Соотношения (7.91) и (7.92) определяют угловую часть матричных элементов одночастичных тензорных операторов для движения в центральном поле.

Понадобится сотня лет развития физических и химических наук, чтобы люди узнали, что такое атом.

П.Э.М. Бергло, цит. из книги Р. Эспера, *Из жизни ученых*

Глава 8

Тонкая и сверхтонкая структура

8.1 Спин-орбитальное взаимодействие

В гл. 18.5 мы перечислили физические эффекты, которыми мы пренебрегли при предварительном рассмотрении атома водорода. Эти эффекты, будучи явно малыми по сравнению с основным кулоновским полем ядра, важны сами по себе и ведут к интересным наблюдаемым явлениям, особенно в связи с впечатляющими достижениями современной экспериментальной спектроскопии. Теория возмущений, гл. 19, а также современная алгебра углового момента, включающая спиновые эффекты, гл. 20-22, дают нам возможность рассмотреть сейчас квантовую механику этих эффектов.

Тонкая структура спектра атома водорода возникает в результате снятия «случайного» кулоновского вырождения *релятивистскими поправками* к гамильтониану порядка $(v/c)^2$. Точный расчёт этих поправок будет сделан на основе *уравнения Дирака* позже, гл. 37. Здесь мы рассмотрим *спин-орбитальное взаимодействие* качественно. Соответствующий член гамильтониана частицы должен иметь вид

$$\hat{H}_{\ell s} = W(r)(\vec{\ell} \cdot \hat{s}). \quad (8.1)$$

Действительно, спин электрона может входить только линейно (высшие тензорные конструкции сводятся к линейным выражениям); полный гамильтониан является скаляром, так что \hat{s} должен входить в виде скалярного произведения с другим вектором, и второй вектор должен быть *аксиальным*, если чётность сохраняется. Из пространственных переменных частицы можно сконструировать только один аксиальный вектор, вектор орбитального момента $\vec{\ell}$.

Наличие спин-орбитального взаимодействия (8.1) показывает, что движение по орбите вызывает закручивание спина частицы. Если бы частица

двигалась в однородной среде, то не было бы никакой причины для такого закручивания. Поэтому мы ожидаем, что $W(r)$ связан с изменением потенциала, действующего на частицу, кулоновского для атома водорода. Сила создаёт выделенное направление — радиальное для *градиента* изотропного потенциала.

Механизм возникновения спин-орбитального взаимодействия является общим для любой заряженной частицы со спином $s \neq 0$, движущейся в электрическом поле, которое даётся градиентом электростатического потенциала, $\vec{\mathcal{E}} = -\nabla\varphi$. Произведём классическую оценку эффекта. В системе отсчёта, связанной с частицей, ядро движется со скоростью $-\mathbf{v}$, и его электрическое поле порождает магнитное поле,

$$\vec{\mathcal{B}} = -\frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \vec{\mathcal{E}}] = -\frac{1}{mc} [\mathbf{p} \times \vec{\mathcal{E}}]. \quad (8.2)$$

Поле $\vec{\mathcal{B}}$ взаимодействует со спиновым магнитным моментом частицы, $\vec{\mu}_s = g_s \hbar \mathbf{s}$. Соответствующий член в гамильтониане равен

$$H_{\ell s} = -(\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{B}}) = \frac{g_s \hbar}{mc} \mathbf{s} \cdot [\nabla\varphi \times \mathbf{p}]. \quad (8.3)$$

Для центрального потенциала, $U(r) = e\varphi(r)$,

$$\nabla U = \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{\partial U}{\partial r}, \quad (8.4)$$

гамильтониан (8.3) принимает форму (8.1),

$$H_{\ell s} = \frac{g_s \hbar}{emc} \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} \mathbf{s} \cdot [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \frac{g_s \hbar^2}{emc} \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} (\mathbf{s} \cdot \vec{\ell}), \quad (8.5)$$

где, как обычно, угловые моменты записаны в единицах \hbar . Эта классическая оценка предсказывает радиальную функцию

$$W(r) = \frac{g_s \hbar^2}{emc} \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r}, \quad (8.6)$$

действительно пропорциональную градиенту исходного потенциала.

Для электрона, $g_s = e/mc$, в водородоподобном атоме, $U = -Ze^2/r$, наша оценка даёт

$$W(r) = \frac{Ze^2 \hbar^2}{m^2 c^2 r^3}. \quad (8.7)$$

Как будет показано в гл. 37, релятивистская квантовая механика предсказывает очень похожее спин-орбитальное взаимодействие с дополнительным коэффициентом $1/2$, так называемой *Томасовской половинкой*, которая возникает при внимательном рассмотрении преобразования к неинерциальной сопутствующей системе отсчета [21]. Спин-орбитальное взаимодействие (8.7) слабо, так как его среднее значение мало, $\sim (v/c)^2$ по сравнению с энергией связи электрона $\varepsilon \sim mZ^2e^4/\hbar^2 \sim Z^2e^2/a$,

$$\langle W \rangle \sim \frac{Ze^2\hbar^2}{m^2c^2(a/Z)^3} \sim \varepsilon \frac{Z^2\hbar^2}{m^2c^2a^2} \sim \varepsilon \frac{e^4Z^2}{\hbar^2c^2} \sim \varepsilon(Z\alpha)^2 \ll \varepsilon. \quad (8.8)$$

Мы использовали здесь боровский радиус a и постоянную тонкой структуры α , считая, что $Z\alpha = Z/137 \ll 1$ (это условие нарушается для тяжёлых атомов, где релятивистские эффекты велики). Спин-орбитальное взаимодействие, подобное (8.1), также имеет место для нуклонов в атомном ядре, но в этом случае оно является гораздо более существенным, так как связано с *сильными*, а не с электромагнитными взаимодействиями.

8.2 Спин-орбитальное расщепление

Мы можем рассмотреть в общем виде следствия спин-орбитального взаимодействия (8.1). Это типичная проблема преобразования от несвязанного представления двух отдельных подсистем (спин и орбитальный момент) к связанному представлению с полным угловым моментом частицы,

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\boldsymbol{\ell}} + \hat{\mathbf{s}}. \quad (8.9)$$

Энергия теперь зависит от взаимной ориентации двух векторов, \mathbf{s} и $\boldsymbol{\ell}$. Поэтому любое отдельное вращение одной из этих подсистем не сохраняет энергию, и соответствующие генераторы не сохраняются,

$$[\hat{\boldsymbol{\ell}}, \hat{H}_{\ell s}] \neq 0, \quad [\hat{\mathbf{s}}, \hat{H}_{\ell s}] \neq 0. \quad (8.10)$$

Тем не менее, совместное вращение орбитальных и спиновых переменных, генерируемое полным вектором (8.9), не изменяет их взаимной ориентации и сохраняет энергию,

$$[\hat{\mathbf{j}}, \hat{H}] = 0. \quad (8.11)$$

В отсутствие спин-орбитального взаимодействия мы имеем n^2 -кратное вырождение уровней водорода, так что энергия E_n не зависит от квантовых чисел ℓ, m_ℓ и m_s . Как мы знаем из гл. 19.4, теория возмущений

должна применяться к *правильным линейным комбинациям* невозмущённых функций. Эти комбинации должны быть *диагональны* по отношению к полному гамильтониану, включающему возмущение, $\hat{H}_{\ell s}$ в данном случае. Вследствие инвариантности относительно вращений и сохранению \mathbf{j} , эти комбинации очевидны без обращения к секулярному уравнению: это связанные состояния с определёнными значениями j и полной проекцией m_j . «Длины», ℓ и $s = 1/2$ также всё ещё сохраняются, вместе с чётностью $(-)^{\ell}$.

Построение связанного спин-орбитального состояния $|(\ell 1/2); jm_j\rangle$ из несвязанных состояний $|\ell m_\ell; 1/2 m_s\rangle$ есть стандартная задача сложения векторов, *Задача 22.1*. Допустимые значения полного углового момента,

$$j = \ell \pm \frac{1}{2}, \quad (8.12)$$

соответствуют *параллельной* и *антипараллельной* ориентациям $\vec{\ell}$ и \mathbf{s} . Спин-орбитальное взаимодействие расщепляет соответствующие состояния. Для каждого из двух значений j при данном ℓ имеется мультиплет $2j + 1$ состояний с различными проекциями m_j , которые всё ещё вырождены — из-за инвариантности относительно вращений энергия не зависит от ориентации системы как целого. Соответствующие двухкомпонентные функции связанных угловых и спиновых переменных называются *сферическими спинорами*,

$$\Omega_{\ell jm}(\mathbf{n}) = \sum_{m_\ell m_s} C_{\ell m_\ell 1/2 m_s}^{jm} Y_{\ell m_\ell}(\mathbf{n}) \chi_{m_s}. \quad (8.13)$$

Эти функции характеризуются определёнными значениями орбитального момента ℓ , чётности $(-)^{\ell}$, полного углового момента j и его проекции $j_z = m$.

Задача 8.1

Найдите явный вид сферических спиноров (8.13). Для этих волновых функций найдите вероятности двух значений проекций спина s_z и средние значения s_z .

Решение При заданных j и m , возможны две комбинации, $\ell_z = m + 1/2$ и $s_z = -1/2$, или $\ell_z = m - 1/2$ и $s_z = +1/2$,

$$\Omega_{\ell jm} = a Y_{\ell m+1/2} \chi_- + b Y_{\ell m-1/2} \chi_+, \quad (8.14)$$

где a и b - коэффициенты Клебша–Гордана,

$$a = C_{\ell m+1/2 1/2 -1/2}^{jm}, \quad b = C_{\ell m-1/2 1/2 1/2}^{jm}. \quad (8.15)$$

Их значения могут быть рассчитаны, например, с помощью собственных функций оператора

$$(\hat{\vec{\ell}} \cdot \hat{\vec{s}}) = \hat{\ell}_z \hat{s}_z + \frac{1}{2}(\hat{\ell}_+ \hat{s}_- + \hat{\ell}_- \hat{s}_+). \quad (8.16)$$

Этот оператор имеет собственные значения, *Задача 20.6*,

$$(\vec{\ell} \cdot \vec{s}) = \frac{1}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)], \quad (8.17)$$

что даёт $\ell/2$ и $-(\ell+1)/2$ для $j = \ell + 1/2$ и $j = \ell - 1/2$, соответственно. Система уравнений для собственных функций $(\vec{\ell} \cdot \vec{s})$ в виде (8.14) есть

$$a \left[(\vec{\ell} \cdot \vec{s}) + \frac{1}{2}(m+1/2) \right] - \frac{b}{2} \sqrt{(\ell+1/2)^2 - m^2} = 0, \quad (8.18)$$

$$b \left[(\vec{\ell} \cdot \vec{s}) - \frac{1}{2}(m-1/2) \right] - \frac{a}{2} \sqrt{(\ell+1/2)^2 - m^2} = 0. \quad (8.19)$$

Детерминант этой системы определяет те же собственные значения (8.17) для $(\vec{\ell} \cdot \vec{s})$.

Нормированные ($a^2 + b^2 = 1$) решения для линейной комбинации (8.14) есть

$$\underline{j = \ell + \frac{1}{2}}, \quad a = \sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}, \quad b = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}; \quad (8.20)$$

$$\underline{j = \ell - \frac{1}{2}}, \quad a = -\sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}, \quad b = \sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}. \quad (8.21)$$

Вероятности w_{\pm} и средние значения $\langle s_z \rangle = (1/2)(w_+ - w_-)$ есть

$$\underline{j = \ell + \frac{1}{2}}, \quad w_+ = \frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}, \quad w_- = \frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}, \quad \langle s_z \rangle = \frac{m}{2\ell + 1}; \quad (8.22)$$

$$\underline{j = \ell - \frac{1}{2}}, \quad w_+ = \frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}, \quad w_- = \frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}, \quad \langle s_z \rangle = -\frac{m}{2\ell + 1}. \quad (8.23)$$

Вычисляя аналогичным способом $\langle \ell_z \rangle$, легко проверить, что $\langle s_z + \ell_z \rangle = m$.

Задача 8.2

Для волновых функций *Задачи 23.1* найти направление поляризации спина для заданного углового аргумента $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$ сферических функций.

Решение Для любого спинора типа (8.14) локальное направление поляризации даётся полярным углом β и азимутальным углом α , которые определены таким образом, что

$$e^{-i\alpha/2} \cos(\beta/2) = \text{const} \cdot b Y_{\ell m-1/2}(\theta, \varphi), \quad (8.24)$$

$$e^{i\alpha/2} \sin(\beta/2) = \text{const} \cdot a Y_{\ell m+1/2}(\theta, \varphi). \quad (8.25)$$

Беря отношение, получаем

$$e^{i\alpha} \tan(\beta/2) = \left(\frac{a}{b}\right)_j \frac{Y_{\ell m+1/2}(\theta, \varphi)}{Y_{\ell m-1/2}(\theta, \varphi)}, \quad (8.26)$$

где отношение $(a/b)_j$ нужно взять из (8.20) и (8.21) для двух возможных значений j . Сферические функции $Y_{\ell m \pm 1/2}$ имеют азимутальные фазы $(m \pm 1/2)\varphi$. Поэтому $\alpha = \varphi$, т.е. спин в данной точке поляризован в плоскости, проходящей через полярную ось z и эту точку. Запишем теперь сферические функции в виде $Y_{\ell z} = \exp(i\ell_z \varphi) \Theta_{\ell z}(\theta)$. Полярный угол β определяется из соотношения

$$\tan(\beta/2) = \left(\frac{a}{b}\right)_j \frac{\Theta_{\ell m+1/2}(\theta)}{\Theta_{\ell m-1/2}(\theta)}. \quad (8.27)$$

Например, для $\ell = 1$, $j = m = 1/2 = \ell - 1/2$, используя $\Theta_{11} = -\sqrt{3/8\pi} \sin \theta$ и $\Theta_{10} = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$, вместе с отношением a/b из (8.21), мы получаем $\beta = 2\theta$.

Задача 8.3

Рассчитайте

$$\tilde{\Omega}_{\ell j m}(\mathbf{n}) = (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \Omega_{\ell j m}(\mathbf{n}) \quad (8.28)$$

записав результат снова с помощью сферических спиноров.

Решение Оператор $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})$ есть скаляр. Поэтому он не может изменить квантовые числа $j m$ полного углового момента. Однако он меняет чётность и, следовательно, значение ℓ на 1. Для данного j имеется только одно допустимое значение ℓ' ,

$$\ell = j \pm \frac{1}{2} \Rightarrow \ell' = j \mp \frac{1}{2}. \quad (8.29)$$

Отсюда следует, что

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})\Omega_{\ell jm}(\mathbf{n}) = \zeta\Omega_{\ell' jm}(\mathbf{n}), \quad \zeta = 1, \quad (8.30)$$

где постоянный множитель ζ может быть найден прямым сравнением решений в *Задаче 23.1* для \mathbf{n} , направленного вдоль оси z , когда сферические функции даются соотношением (16.143).

С правильно определёнными линейными комбинациями мы можем применить стандартную теорию возмущений, не заботясь о вырождении. Переходы внутри вырожденного мультиплета требуют изменения m_j , что невозможно для скалярного оператора $H_{\ell s}$. Поправка первого порядка (просто среднее значение спин-орбитального потенциала в состояниях, описываемых сферическими спинорами) приводит к разным смещениям параллельных и антипараллельных состояний,

$$\Delta E_{n\ell j} = \langle n\ell j | W(r)(\vec{\ell} \cdot \hat{\mathbf{s}}) | n\ell j \rangle. \quad (8.31)$$

Это вычисление производится элементарно с использованием (8.16). Сдвиг энергии равен

$$\Delta E_{n\ell j} = \frac{1}{2} \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] \langle W(r) \rangle_{n\ell}. \quad (8.32)$$

Радиальные функции не зависят от j в этом приближении.

В соответствии с результатами *Задачи 22.1*, мы получаем *спин-орбитальный дублет*,

$$\Delta E_{n\ell j} = \frac{1}{2} \langle W(r) \rangle_{n\ell} \cdot \begin{cases} \ell, & j = \ell + 1/2, \\ -(\ell + 1), & j = \ell - 1/2. \end{cases} \quad (8.33)$$

Для положительного $\langle W(r) \rangle_{n\ell}$, как для электрона в атоме водорода, член дублета с меньшим j имеет более низкую энергию. Для нуклонов в ядрах знак спин-орбитального взаимодействия противоположен, и член дублета с большим j смещается вниз. Полная величина расщепления в дублете даётся соотношением

$$\Delta E_{n\ell\ell+1/2} - \Delta E_{n\ell\ell-1/2} = \frac{1}{2} \langle W(r) \rangle_{n\ell} (2\ell + 1). \quad (8.34)$$

8.3 Тонкая структура атома водорода

Расщепление (8.33) можно непосредственно наблюдать в ядрах, где мы можем использовать феноменологический спин-орбитальный гамильтониан (8.1), и член $H_{\ell s}$ не мал. В атомах, однако, необходимо учесть другие релятивистские эффекты того же порядка.

Как мы покажем в гл. 37, полный гамильтониан частицы массы m и спина $1/2$ в статическом потенциальном поле $U(\mathbf{r})$, включая *все члены второго порядка по v/c* , есть

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\vec{\sigma} \cdot [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}]) + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 U. \quad (8.35)$$

Здесь мы имеем три поправки второго порядка к нерелятивистскому гамильтониану. Второе слагаемое в правой стороне (8.35) происходит от разложения релятивистской энергии свободной частицы,

$$\sqrt{m^2c^4 + c^2\mathbf{p}^2} \approx mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \dots \quad (8.36)$$

Четвёртое слагаемое в (8.35) есть спин-орбитальное взаимодействие и совпадает, с точностью до коэффициента $1/2$, с тем, что мы получили ранее из полуклассических соображений. Последний член в (8.35) для кулоновского потенциала не равен нулю только в начале координат,

$$\nabla^2 U = -Ze^2 \nabla^2 \frac{1}{r} = 4\pi Ze^2 \delta(\mathbf{r}). \quad (8.37)$$

В то время как $H_{\ell s}$ работает только для состояний с ненулевым орбитальным моментом, поправка (8.37), так называемый *дарвиновский член*, смещает только s -состояния, где $\psi(0) \neq 0$.

Дарвиновский член можно приближённо интерпретировать как возникающий вследствие квантовых флуктуаций, приводящих к созданию виртуальных электрон-позитронных пар. Первоначальный электрон аннигилирует с позитроном пары, Рис. 23.1. В течение времени жизни виртуальной пары, которое оценивается из соотношения неопределенностей как $\Delta t \sim \hbar/\Delta E \sim \hbar/mc^2$, компоненты пары могут сдвигаться на расстояние порядка комптоновской длины волны электрона, $\xi \sim c\Delta t \sim \hbar/mc = \lambda_C$. После аннигиляции начального электрона остающийся электрон смещается от исходного положения на $\sim \lambda_C$. Это означает, что нерелятивистское потенциальное поле U не может быть точно локализовано и должно быть усреднено по объёму $\sim \lambda_C^3$ квантовых флуктуаций. Вследствие флуктуаций

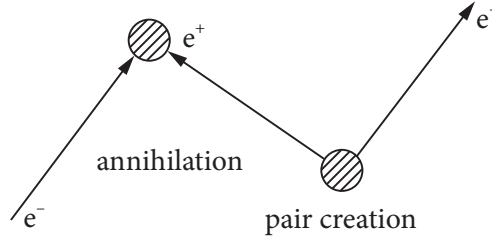


Рис. 8.1. Квантовая флуктуация с рождением электрон–позитронной пары

положения электрона, $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \vec{\xi}$, эффективный потенциал, действующий на электрон, размазан по небольшому объёму,

$$U(\mathbf{r}) \Rightarrow U(\mathbf{r} + \vec{\xi}) \approx U(\mathbf{r}) + \vec{\xi} \cdot \nabla U(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \xi_i \xi_j \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} U(\mathbf{r}). \quad (8.38)$$

Усредняя этот потенциал по флуктуациям (это усреднение обозначим чертой сверху) и принимая во внимание, что перемещения вдоль разных направлений не коррелированы,

$$\overline{\vec{\xi}} = 0, \quad \overline{\xi_i \xi_j} = \frac{1}{3} \overline{\xi^2} \delta_{ij}, \quad (8.39)$$

мы получаем

$$\overline{U(\mathbf{r} + \vec{\xi})} = U(\mathbf{r}) + \frac{1}{6} \overline{\xi^2} \nabla^2 U(\mathbf{r}). \quad (8.40)$$

Результат усреднения можно рассматривать как небольшое постоянное возмущение,

$$\delta U \sim \frac{1}{6} \overline{\xi^2} \nabla^2 U(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{6} \lambda_C^2 \nabla^2 U = \frac{\hbar^2}{6m^2 c^2} \nabla^2 U, \quad (8.41)$$

что лишь незначительно отличается от точного результата второго порядка в (8.35).

Полный вклад второго порядка малости сохраняет j как хорошее квантовое число. Сдвиг нерелятивистского уровня энергии в водородоподобном атоме с зарядом ядра Z есть, в Ридбергах,

$$\Delta E_{nj} = -\frac{\alpha^2 Z^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \text{Ry}. \quad (8.42)$$

Хотя порядок величины такой же, как в (8.34), здесь сдвиг уровней определяется только полным угловым моментом j . Кроме вырождения по m_j , всё ещё остаётся кулоновское *случайное вырождение*: здесь мы имеем *двукратное* слияние, два уровня противоположной чётности с одинаковыми n и j , но $\ell = j \pm 1/2$ вырождены, как и раньше. Это вырождение отсутствует только для наибольшего орбитального момента в оболочке, $\ell = \ell_{\max}(n) = n - 1$; значит, во всех оболочках существует невырожденный наивысший уровень $j = \ell_{\max} + 1/2$.

Задача 8.4

Получите результат (8.42).

Итоговая картина тонкой структуры в спектре водородоподобного атома показана на Рис. 18.1. Мы использовали спектроскопические обозначения, $|n\ell j\rangle \rightarrow n(\ell)_j$, где (ℓ) обозначает символ (s, p, d, \dots) орбитального момента. Пунктирные линии нарисованы для невозмущённых вырожденных боровских оболочек, в то время как уровни с релятивистскими поправками показаны сплошными линиями (без соблюдения масштаба). Энергетические сдвиги измеряются в единицах

$$C = \frac{\alpha^2 Z^4}{2} \frac{m e^4}{\hbar^2} = \alpha^2 Z^4 \text{ Ry}. \quad (8.43)$$

Полное расщепление в дублете равно

$$\frac{C}{n^3} \left(\frac{1}{\ell} - \frac{1}{\ell + 1} \right) = \frac{C}{n^3 \ell(\ell + 1)} \quad (8.44)$$

и быстро падает с ростом n и ℓ , так как для сильно возбуждённых состояний поле слабо, наряду со спин-орбитальным взаимодействием и другими релятивистскими эффектами, обусловленными ядром. Простая оценка $W(r)$ показывает, что излучение, соответствующее переходам в одной расщеплённой оболочке, относится к сантиметровому диапазону.

В ядрах спин-орбитальное взаимодействие настолько сильное, что большое расщепление дублета может сдвинуть партнеров дублетов в разные главные оболочки, см. Рис. 23.2, например $g_{9/2}$ и $g_{7/2}$. Благодаря обратному знаку, уровень с $j = \ell + 1/2$ опускается вниз по энергии и становится *нарушителем*, когда достигает предыдущей оболочки осциллятора, имея противоположную чётность по сравнению с местными уровнями (напомним, что для случая гармонического осциллятора, в отличие от кулоновского поля, каждая главная оболочка содержит одночастичные уровни только

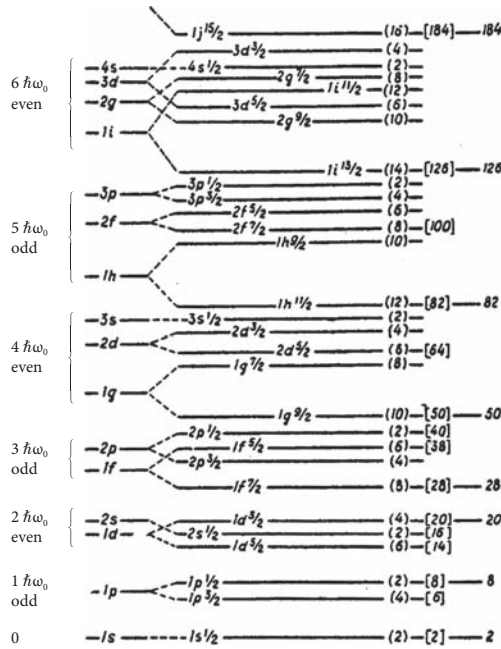


Рис. 8.2. Нуклонный спектр в ядре, имеющем вид сферического потенциального ящика с сильным спин-орбитальным взаимодействием

одинаковой чётности; сферический ящик не имеет вырождения, но характер спектра, тем не менее, близок). Этот сдвиг очень важен, потому что он изменяет количество нуклонов, соответствующих полному заполнению оболочки, так называемое *магическое число*.

8.4 Тонкая структура в сложных атомах

В многоэлектронных атомах нет случайного вырождения, типичного для водородоподобных систем. За исключением тяжёлых атомов, релятивистские эффекты всё ещё слабы, $Z\alpha \ll 1$, и величины орбитального момента и спина сохраняются по отдельности. Теперь нам нужно поговорить о *полном* орбитальном моменте \mathbf{L} и *полном* спине \mathbf{S} всех электронов,

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_a \hat{\ell}_a, \quad \hat{\mathbf{S}} = \sum_a \hat{s}_a. \quad (8.45)$$

Состояние сложного атома в главном приближении можно описать, фиксируя электронную *конфигурацию* (список одночастичных состояний, *орбита-*

лей, занимаемых электронами) и квантовые числа L и S , характеризующие $\hat{\mathbf{L}}^2$ и $\hat{\mathbf{S}}^2$. Состояния с разными значениями L и/или S имеют разные энергии из-за кулоновского взаимодействия между электронами, чего нет в водородоподобных системах. Это *электростатическое* расщепление значительно больше, чем релятивистское спин-орбитальное расщепление, а все $(2L + 1)(2S + 1)$ подсостояния с различными проекциями $L_z = M_L$ и $S_z = M_S$ вырождены в нулевом приближении. Теперь мы снова должны найти правильные линейные комбинации, учитывая спин-орбитальное взаимодействие.

Аналогично одночастичному случаю, расщепление всех уровней, возможных для данных значений L и S , может быть описано с помощью эффективного спин-орбитального гамильтониана

$$\hat{H}_{LS} = W_{LS}(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}). \quad (8.46)$$

Здесь W_{LS} есть эффективная константа, которая в принципе может быть найдена из среднего значения микроскопического электронного спин-орбитального гамильтониана в состоянии $|LS\rangle$ данной конфигурации. Её можно найти также феноменологически по спектроскопическим данным. Эффективный оператор (8.46) действует в пространстве (первоначально вырожденных) состояний, которые отличаются только по квантовыми числам вращения M_L и M_S , аналогично $\langle W(r) \rangle$ в (8.31). После диагонализации \hat{H}_{LS} мы получим *мультиплет тонкой структуры*. Гамильтониан (8.46) зависит только от относительной ориентации векторов \mathbf{L} и \mathbf{S} , будучи инвариантным относительно вращений, порождённых полным угловым моментом

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \quad (8.47)$$

Мы снова имеем типичную задачу векторного сложения. Правильные линейные комбинации есть связанные состояния $|JM\rangle$, где $M = M_L + M_S$, и возможные значения J определяются условиями треугольника (JLS) . Аналогично (8.32), члены мультиплета (L, S) смещаются на

$$\delta_J(L, S) = \frac{W_{LS}}{2}[J(J + 1) - L(L + 1) - S(S + 1)]. \quad (8.48)$$

Число J -компонент равно $(2L_{<} + 1)$, где $L_{<}$ есть *наименьшее* из L и S , и каждая компонента по-прежнему вырождена по M . Расстояние между соседними компонентами даётся *правилом Ланде*,

$$E_J(L, S) - E_{J-1}(L, S) = W_{LS}J. \quad (8.49)$$

Этот вывод справедлив, если интервалы Ланде (8.49) малы по сравнению с электростатическим смещением уровней мультиплета, возникающим для разных значений L и S одной и той же электронной конфигурации. Только в этом случае L и S - всё ещё хорошие квантовые числа (LS -связь, или *случай Рассела* – *Сандерса*). В более тяжёлых атомах релятивистские члены более важны, и постепенно ситуация становится такой, что в основном определяется релятивистскими, а не электростатическими взаимодействиями. В противоположном предельном случае спин-орбитальное взаимодействие является сильным и сначала оно связывает орбитальный и спиновый момент отдельного электрона в его полный угловой момент $\mathbf{j} = \vec{\ell} + \mathbf{s}$, как мы рассматривали для водородоподобного атома. После этого моменты отдельных электронов складываются в полный электронный угловой момент

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_a \hat{\mathbf{j}}_a. \quad (8.50)$$

Этот случай соответствует jj -связи, что больше подходит для тяжёлых атомов. В ядре, из-за сильного спин-орбитального взаимодействия, нуклоны, как правило, связаны по jj -типу.

8.5 Магнитный момент и спин-орбитальное взаимодействие

Оператор магнитного момента частицы в центральном поле равен (в единицах соответствующего магнетона, так как теперь мы будем включать постоянную Планка в определение гиромангнитных отношений g_l и g_s)

$$\vec{\mu} = g_s \mathbf{s} + g_l \vec{\ell}. \quad (8.51)$$

Для того чтобы найти эффективный оператор магнитного момента внутри j -мультиплета, мы используем векторную модель, гл. 22.8,

$$\vec{\mu} = g_j(\ell, s) \mathbf{j}, \quad (8.52)$$

где эффективное гиромангнитное отношение есть

$$g_j(\ell, s) = \frac{\langle \vec{\mu} \cdot \mathbf{j} \rangle}{j(j+1)} = \frac{g_s \langle (\mathbf{s} \cdot \mathbf{j}) \rangle + g_l \langle (\vec{\ell} \cdot \mathbf{j}) \rangle}{j(j+1)}. \quad (8.53)$$

Далее, нам нужно знать скалярные величины (22.74). Соотношение (8.9) позволяет нам найти средние взаимные ориентации

$$(\mathbf{j} \cdot \vec{\ell}) = \frac{j(j+1) + \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2}, \quad (\mathbf{j} \cdot \mathbf{s}) = \frac{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2}.$$

$$(8.54)$$

Конечно, эти величины одинаковы для всех состояний $|\ell s) j m\rangle$ с различными m . Наконец, эффективное гиромагнитное отношение (*Фактор Ланде*) равно

$$g_j(\ell, s) = \frac{1}{2j(j+1)} \left\{ (g_\ell + g_s)j(j+1) + (g_\ell - g_s)[\ell(\ell+1) - s(s+1)] \right\}. \quad (8.55)$$

Как мы уже упоминали в гл. 22.7, табличная величина соответствует состоянию с $j_z = j$, когда магнитный момент равен $\mu = gj$. Для электрона мы можем положить $g_\ell = 1$, $g_s = 2$ в единицах магнетона Бора μ_B , и получим

$$\mu = \frac{3j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2(j+1)} \mu_B, \quad (8.56)$$

что сводится к

$$\frac{\mu}{\mu_B} = \begin{cases} \ell + 1, & j = \ell + 1/2, \\ \ell, & j = \ell - 1/2. \end{cases} \quad (8.57)$$

Для нуклонов спиновые гиромагнитные отношения определяются эмпирическими магнитными моментами μ_p и μ_n ,

$$g_s^{(p)} = 2\mu_p = 5,58, \quad g_s^{(n)} = 2\mu_n = -3,82 \quad (8.58)$$

(в *ядерных магнетонах*, см. (1.71)). Для частицы, не имеющей внутренней структуры, со спином $1/2$ и зарядом e , спиновое гиромагнитное отношение предсказывается релятивистским уравнением Дирака и равно $g_s = 2$ (в единицах соответствующего магнетона). Это привело бы к спиновому магнитному моменту для свободной частицы в точности равному одному магнетону. Это так для электрона (или позитрона), с небольшими поправками КЭД порядка 10^{-3} из-за поляризации вакуума виртуальными электрон-позитронными парами. Для нуклонов мы видим большую разницу между фактическими значениями (8.58) и дираковскими значениями, $g_s^{(p)} = 2$, $g_s^{(n)} = 0$. Эта разница (*аномальные магнитные моменты*) порождается сильными взаимодействиями квантовой хромодинамики (КХД), ответственными за внутреннюю структуру нуклона.

| Задача 8.5

Найдите магнитные моменты для протона и нейтрона в одночастичном состоянии с квантовыми числами ℓ и j . Поскольку нейтрон не несет электрического заряда, считайте, что орбитальные гироманнитные отношения для нуклонов равны (в единицах ядерных магнетонов)

$$g_\ell^{(p)} = 1, \quad g_\ell^{(n)} = 0. \quad (8.59)$$

Решение Для $j = \ell \pm 1/2$ находим одночастичные магнитные моменты

$$\mu_p(j) = j - \frac{1}{2} + \mu_p, \quad \mu_n(j) = \mu_n, \quad j = \ell + \frac{1}{2}, \quad (8.60)$$

где μ_p и μ_n - величины (8.58), и

$$\mu_p(j) = \frac{(2j+3)j - 2j\mu_p}{2(j+1)}, \quad \mu_n(j) = -\frac{j}{j+1}\mu_n, \quad j = \ell - \frac{1}{2}. \quad (8.61)$$

Зависимость магнитных моментов от j , даваемую (8.60) и (8.61), так называемые *линии Шмидта*, 1937, для протонов и нейтронов можно сравнить с экспериментальными данными для различных ядер, которые имеют нечётное число протонов или нейтронов [?]. Для прямого сравнения мы должны предположить, что весь магнитный момент ядра связан с последней нечётной («непарной») частицей, и экспериментально измеренный полный угловой момент J ядра равен угловому моменту j этого последнего нуклона. В квазиклассическом пределе больших $j \approx \ell \gg s$ магнитный момент нейтрона, имеющий, в силу (8.59), только спиновую часть, равен $\pm\mu_n$ для всех j , в зависимости от параллельной или антипараллельной взаимной ориентации \mathbf{s} и \mathbf{j} ; протонный магнитный момент линейно возрастает как $j \pm \mu_p$ из-за орбитальной части. Следует отметить, что линии Шмидта универсальны и не несут информации о характеристиках центрального поля. Фактически одночастичные линии Шмидта дают лишь очень приблизительное представление о действительных магнитных моментах ядер, которые заметно меняются из-за многочастичных эффектов. Экспериментальные значения лежат в основном между линиями, и только если такое значение действительно близко к одной из линий $j = l \pm 1/2$, мы можем попытаться определить орбитальный момент l последнего нуклона.

Задача 8.6

Уравнение Паули. Покажите, что гамильтониан Паули

$$\hat{H} = \frac{(\vec{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - (e/c)\mathbf{A}))^2}{2m} \quad (8.62)$$

правильно описывает поведение электрона в магнитном поле $\vec{B} = \text{curl } \mathbf{A}$ и предсказывает спиновое гиромангнитное отношение $g_s = 2$ в классических единицах ($e/2mc$). Этот гамильтониан есть нерелятивистский предел гамильтониана Дирака, гл. 37.5.

Решение Используя алгебру спиновых матриц, гл. 20.2, мы получаем из (8.62)

$$\hat{H} = (\delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k) \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left(\hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right). \quad (8.63)$$

Диагональный член (δ_{ij}) не содержит операторов спина и совпадает с выражением для орбитального магнетизма, которое используется в нерелятивистской квантовой механике,

$$\hat{H}_{\text{orb}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2. \quad (8.64)$$

Этот член содержит обычную кинетическую энергию $\hat{K} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$, диамагнитный член второго порядка

$$H_{\text{orb}}^{(2)} = \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2, \quad (8.65)$$

и член первого порядка, отвечающий за орбитальный парамагнетизм

$$\hat{H}_{\text{orb}}^{(1)} = -\frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}), \quad (8.66)$$

что, в удобной симметричной калибровке для однородного статического магнитного поля,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\vec{B} \times \mathbf{r}], \quad [\nabla \times \mathbf{A}] = \vec{B}, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \quad (8.67)$$

приводит к [в этой калибровке $(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}) = (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}})$]

$$H_{\text{orb}}^{(1)} = -\frac{e}{mc} (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = -\frac{e}{2mc} [\vec{B} \times \mathbf{r}] \cdot \hat{\mathbf{p}} = -\frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = -\frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\ell} \cdot \vec{B}). \quad (8.68)$$

Результат (8.68) означает, что орбитальный магнитный момент, определённый согласно

$$\hat{H}_{\text{orb}}^{(1)} = -(\hat{\vec{\mu}}_{\ell} \cdot \vec{B}) \quad (8.69)$$

равен

$$\hat{\vec{\mu}} = \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\vec{\ell}} \rightsquigarrow g_l = \frac{e}{2mc}, \quad (8.70)$$

т. е. одному магнетону (при заданных значениях заряда и массы частицы). (Вспомните простой квазиклассический вывод этого результата, гл. 1.8).

Оставшийся в уравнении (8.63) спиновый член антисимметричен и, следовательно, содержит только перекрёстные слагаемые,

$$\hat{H}_{\text{spin}}^{(1)} = -\frac{ie}{2mc} \varepsilon_{ijk} (\hat{p}_i A_j + A_i \hat{p}_j) \sigma_k. \quad (8.71)$$

Выражение в скобках в уравнении (8.71) можно переписать в виде

$$\hat{p}_i A_j + A_i \hat{p}_j = [\hat{p}_i, A_j] + A_j \hat{p}_i + A_i \hat{p}_j. \quad (8.72)$$

Последние два слагаемых симметричны относительно перестановки индексов $i \leftrightarrow j$ и дают нуль при свёртке с антисимметричным тензором ε_{ijk} , в то время как коммутатор даёт

$$\hat{H}_{\text{spin}}^{(1)} = -\frac{ie}{2mc} \varepsilon_{ijk} (-i\hbar) \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \sigma_k = -\frac{e\hbar}{2mc} [\nabla \times \mathbf{A}] \cdot \vec{\sigma}, \quad (8.73)$$

или, поскольку $\hat{\mathbf{s}} = \vec{\sigma}/2$,

$$\hat{H}_{\text{spin}}^{(1)} = -(\hat{\vec{\mu}}_s \cdot \vec{B}), \quad \hat{\vec{\mu}}_s = g_s \hbar \hat{\mathbf{s}}, \quad g_s = \frac{e}{mc} = 2g_l. \quad (8.74)$$

Таким образом, уравнение Паули предсказывает, что спиновый магнитный момент частицы спина $1/2$ в состоянии покоя равен $(1/2)\hbar g_s$, т.е. опять одному магнетону.

8.6 Магнитная сверхтонкая структура

До сих пор при рассмотрении электронных атомных состояний было принято во внимание только кулоновское поле ядра. Однако, как мы знаем из гл. 22.5, ядра с ненулевым спином могут иметь также высшие мультипольные моменты внутреннего распределения заряда. *Магнитные моменты* упоминались в предыдущем пункте, они имеют величину порядка ядерных магнетонов. Многие ядра со спином $I > 1/2$ обладают *несферическим* распределением заряда, которое характеризуется *электрическим квадрупольным моментом*. Высшие мультипольные моменты также изменяют

поле, действуя на электроны, что приводит к появлению дополнительных членов в атомном гамильтониане. Соответствующие изменения атомных спектров рассматриваются как их *сверхтонкая структура*.

Начнём с эффектов для ядерных магнитных моментов. Магнитное дипольное взаимодействие ядерного магнитного момента $\vec{\mu}$ с магнитным моментом электрона $\vec{\mu}_e$ можно оценить по порядку величины как [3], § 44

$$\delta E_\mu \sim \frac{(\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu})}{r^3}. \quad (8.75)$$

Ядерный магнетон меньше магнетона Бора в отношении m/M массы электрона к массе протона, и среднее расстояние валентного электрона от ядра имеет порядок боровского радиуса a , так что

$$\delta E_\mu \sim \frac{\mu_B^2}{a^3} \frac{m}{M} \sim \left(\frac{e\hbar}{mc} \right)^2 \frac{1}{a^3} \frac{m}{M}. \quad (8.76)$$

Сравнивая с расщеплением тонкой структуры (8.7), мы находим

$$\delta E_\mu \sim \delta E_{\ell s} \frac{m}{M} \simeq 10^{-3} \delta E_{\ell s} \sim 10^{-7} E_b, \quad (8.77)$$

где E_b есть типичная энергия связи электрона. Малость эффекта оправдывает название термина *сверхтонкий*.

Геометрия магнитной сверхтонкой структуры определяется эффективным гамильтонианом, который можно записать в виде взаимодействия ядерного магнитного момента $\vec{\mu}$ с магнитным полем $\vec{B}(0)$, создаваемым электроном(ами) в ядре, расположенном в начале координат, и которое считается точечным в этом приближении,

$$\hat{H}'_\mu = -(\hat{\vec{\mu}} \cdot \hat{\vec{B}}(0)). \quad (8.78)$$

Из-за слабости магнитного взаимодействия мы можем ограничиться приближением теории возмущений, беря среднее значение возмущения (8.78) в невозмущенном состоянии ядра и электронов. Ядерный магнитный дипольный оператор, в соответствии с векторной моделью, должен быть пропорционален ядерному спину (полному угловому моменту ядра) \mathbf{I} ,

$$\hat{\vec{\mu}} = g_I \hbar \mathbf{I}. \quad (8.79)$$

Гиромангнитное отношение g_I было найдено в *Задаче 23.5* в одночастичном приближении, точное значение для многочастичного случая можно взять

из эксперимента. Поле $\vec{B}(0)$ должно быть усреднено по данной электронной конфигурации, что даёт аксиальный вектор, направленный, в соответствии с векторной моделью, вдоль единственного вектора, характеризующего электроны как целое — полного углового момента \mathbf{J} электронов,

$$\hat{\vec{B}}(I) = \gamma \hat{\mathbf{J}}. \quad (8.80)$$

Здесь коэффициент γ зависит от конфигурации и должен даваться атомной физикой.

Мы видим, что эффективный гамильтониан сверхтонкой магнитной структуры должен иметь форму

$$\hat{H}'_{\mu} = -\hbar g_I \gamma (\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{I}}) \equiv A (\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{I}}). \quad (8.81)$$

Этот гамильтониан можно рассматривать совершенно аналогично гамильтониану тонкой структуры (8.46). Соответствие между обоими очевидно,

\mathbf{S}	\mathbf{I}	(8.82)
\mathbf{L}	\mathbf{J}	
$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$	$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$	

Повторяя те же рассуждения, что и в случае тонкой структуры, мы констатируем, что невозмущенные атомно-ядерные уровни с данными J и I , но с разным полным угловым моментом F атома, образуют *мультиплет сверхтонкой структуры* $(2I + 1)$ уровней, если $I \leq J$, и $(2J + 1)$ уровней, если $J \leq I$. Каждый F -уровень вырожден по общей проекции $F_z = M_F$. Сдвиг энергии за счёт взаимодействия (8.81) выражается как в (8.49),

$$\delta E_F(J, I) = \frac{A}{2} [F(F + 1) - J(J + 1) - I(I + 1)] \equiv \frac{AX_F(I, J)}{2}. \quad (8.83)$$

Снова выполняется правило интервалов (8.49),

$$E_F(J, I) - E_{F-1}(J, I) = AF. \quad (8.84)$$

Таким образом, измерение сверхтонкого расщепления позволяет сделать заключение о постоянной A и, следовательно, о магнитном моменте и спине ядра. Атомная постоянная γ должна рассчитываться независимо от волновой функции атома.

8.7 Пример: один валентный электрон

В качестве иллюстрации мы рассмотрим простейший случай, когда магнитное поле на ядре создаётся одним валентным электроном на орбите $|n\ell jm\rangle$; полностью занятые оболочки имеют нулевой угловой момент, так что их общее магнитное поле исчезает.

В случае одного электрона вектор \mathbf{J} сводится к $\mathbf{j} = \vec{\ell} + \mathbf{s}$. Соответственно, магнитное поле имеет два источника. Поле орбитального момента можно найти по *закону Био–Савара* [3], §43. Классический заряд e , движущийся со скоростью \mathbf{v} создаёт на расстоянии \mathbf{r} магнитное поле

$$\vec{B}_\ell(0) = \frac{e}{cr^3} [\mathbf{r} \times \mathbf{v}]. \quad (8.85)$$

Соответствующий квантовый оператор направлен вдоль орбитального момента $\vec{\ell}$,

$$\hat{B}_\ell = \frac{e\hbar}{mc} \frac{\vec{\ell}}{r^3} = -2\mu_B \frac{\vec{\ell}}{r^3}. \quad (8.86)$$

Спиновый магнитный момент $\vec{\mu}_s = g_s \hbar \mathbf{s}$ создаёт другую часть магнитного поля [3], §44,

$$\hat{B}_s(0) = \frac{3\mathbf{n}(\hat{\mu}_s \cdot \mathbf{n}) - \hat{\mu}_s}{r^3} = -2\mu_B \frac{3\mathbf{n}(\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}) - \hat{\mathbf{s}}}{r^3}, \quad (8.87)$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, единичный вектор в направлении электрона. Окончательно,

$$\hat{B}(0) = -\frac{2\mu_B}{r^3} \left(\vec{\ell} - \hat{\mathbf{s}} + 3\mathbf{n}(\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}) \right). \quad (8.88)$$

Этот оператор должен быть усреднён по всем квантовым числам, за исключением проекции m общего углового момента \mathbf{j} , что приводит к эффективному оператору векторной модели, пропорциональному $\hat{\mathbf{j}}$.

Задача 8.7

Покажите, что эффективный оператор векторной модели для величины в скобках в равенстве (8.88) определяется соотношением

$$\langle \vec{\ell} - \hat{\mathbf{s}} + 3\mathbf{n}(\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}) \rangle = \frac{\ell(\ell+1)}{j(j+1)} \langle \hat{\mathbf{j}} \rangle. \quad (8.89)$$

Выражение (8.89) обращается в нуль для s -электронов ($\ell = 0$). Однако в s -состояниях волновая функция $\psi_s(0)$ электрона отличается от нуля в

начале координат, и среднее значение $1/r^3$ *расходится*, так что результат оказывается конечным и правильным также и для $\ell = 0$. Для любого значения ℓ получаем, используя решение *Задачи 19.4*

$$\hat{\vec{B}}(0) = -2\mu_B \frac{Z^3}{a^3 n^3 (\ell + 1/2) j(j+1)} \hat{\mathbf{j}}. \quad (8.90)$$

Это выражение определяет константу $\gamma_{n\ell}$ из уравнения (8.80). Оно справедливо с точностью до релятивистских поправок, и поправок, учитывающих конечный размер ядра. Коэффициент A , (8.81), который определяет наблюдаемое сверхтонкое расщепление, даётся соотношением

$$A = 2\mu_B \frac{Z^3}{a^3 n^3 (\ell + 1/2) j(j+1)} \hbar g_I. \quad (8.91)$$

Для основного состояния атома водорода, $n = 1$, $\ell = 0$, $j = 1/2$, заряд протона $Z = 1$, спин $I_p = 1/2$, и магнитный момент протона $\mu_p = 2,79 \mu_N = 2,79(m/M_p)\mu_B$. Значит,

$$A_H = 2 \cdot 5.58 \frac{m}{M_p} \mu_B^2 \frac{8}{3a^3}. \quad (8.92)$$

По сравнению с нашей грубой первоначальной оценкой (8.75), мы имеем дополнительный числовой множитель, близкий к 30. Сверхтонкая структура основного состояния атома водорода, Рис. 23.3, состоит из двух уровней, синглета $F = 0$ и триплета $F = 1$. Интервал по энергии между ними, согласно (8.84), равен константе A . Соответствующая частота перехода

$$\nu(F = 1 \rightarrow F = 0) = \frac{A}{2\pi\hbar} = 1423 \text{ МГц}. \quad (8.93)$$

Это знаменитая спектральная линия излучения межзвездного водорода с длиной волны $\lambda = 21$ см. Являясь особенной линией самого легкого химического элемента, она была предложена для поиска сигналов от внеземных цивилизаций.

Значение частоты (8.93) отличается от очень точных экспериментальных измерений на 0.2%. Это отклонение объясняется квантовой электродинамикой (наиболее точным разделом теоретической физики) поправкой (1.73) к магнитному моменту электрона. Рассчитаны даже поправки более высокого порядка (по степеням α), и результаты полностью согласуются с экспериментами. И наоборот, последние измерения электронного магнитного момента дают точное значение для постоянной тонкой структуры (18.96).

$n=2, l=1$	$J=3/2$	$F=2$
		$F=1$
	$J=1/2$	$F=1$
		$F=0$
$n=1, l=0$	$J=1/2$	$F=1$
		$F=0$

Рис. 8.3. Сверхтонкая структура основного состояния $n = 1, {}^2s_{1/2}$ и первые p -состояния $n = 2, {}^2p_{1/2,3/2}$ атома водорода

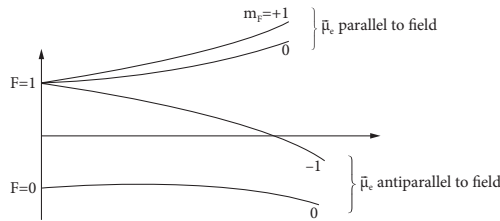


Рис. 8.4. Расщепление Штерна–Герлаха сверхтонкой структуры атома водорода

В качестве примера применения отметим квантовый стандарт времени, использующий радиочастотное излучение атомарного водорода. Между расщеплёнными состояниями сверхтонкой структуры $F = 0$ и $F = 1$ возможен радиационный М1 (обозначения гл. 21.6) переход с переворотом спина; он наблюдается также в спектре межзвездного водорода. Инверсную заселённость уровней сверхтонкой структуры, см. гл. 29.1, можно создать с помощью установки Штерна–Герлаха, Рис. 23.4, используя большую разницу электронного и протонного магнитного момента. Мы можем отделить две верхние компоненты с магнитным моментом электрона вдоль магнитного поля, $M_F = 1$, которая есть чистое $F = 1$ состояние, и $M_F = 0$, которая является суперпозицией $F = 1$ и $F = 0$ с равными весами. Заселённость верхнего $M_F = 1$, следовательно, выше, как это и необходимо для инверсии. Если разделённый пучок попадает в радиочастотный резонатор ($\lambda \sim 21$ см), слабое спонтанное излучение будет вызывать самовозбуждение и генерацию.

8.8 Квадрупольная сверхтонкая структура

Электрический квадрупольный момент ядра может иметь одночастичную или коллективную природу. В первом случае он создаётся валентным протоном, будучи порядка eR^2 , где R есть радиус ядра. Это возможно, если валентный протон находится на орбите с полным угловым моментом $j > 1/2$. Коллективный квадрупольный момент зависит от степени деформации, которую можно охарактеризовать параметром β , определяемым как отношение разности радиусов ядра вдоль двух осей симметрии к среднему радиусу ядра. В типичных деформированных ядрах деформация основного состояния имеет порядок $\beta \approx 0,3$, хотя в возбужденных состояниях некоторые ядра становятся *сверхдеформированными* с $\beta \approx 0,6$, что соответствует отношению осей, близкому к 2:1. Коллективный квадрупольный момент (компонента вдоль оси симметрии, если ядро аксиально-симметрично) можно оценить как $Q \sim \beta ZeR^2$, где Ze — заряд ядра. Коллективный эффект может быть на один—два порядка больше по величине, чем одночастичный.

Взаимодействие квадрупольного момента ядра с электроном приводит к сдвигу энергии, который можно оценить в одночастичном случае как

$$\delta E_Q \sim \frac{eQ}{r^3} \sim \frac{e^2 R^2}{a^3} \sim \frac{e^2}{a} \left(\frac{R}{a}\right)^2 \sim \left(\frac{R}{a}\right)^2 E_b. \quad (8.94)$$

Для тяжёлых ядер $R \sim 10^{-12}$ см, и $\delta E_Q \sim 10^{-8} E_b$, сравните с оценкой (8.77) для магнитного случая. Когда имеется коллективный квадрупольный момент, квадрупольная сверхтонкая структура может быть важнее, чем магнитная.

Согласно электродинамике [3], §42, ядерный квадрупольный тензор Q_{ij} взаимодействует с электростатическим потенциалом φ , создаваемым атомными электронами на ядре, через гамильтониан

$$H'_Q = \frac{1}{6} Q_{ij} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0, \quad (8.95)$$

где производные потенциала (компоненты градиента электрического поля) берутся в центре ядра. Здесь в свёртке двух симметричных тензоров подразумевается суммирование по повторяющимся декартовым индексам i, j . Квадрупольный тензор Q_{ij} является *бесследным*, (16.130). Если \mathbf{I} есть ядерный угловой момент, эффективный оператор \hat{Q}_{ij} , усреднённый по всем квантовым числам состояния ядра, за исключением проекции J_z , должен быть выражен как симметричный бесследный тензор через компоненты

Ĥ. С необходимостью этот эффективный тензор имеет вид (с некоторым постоянным множителем q)

$$\hat{Q}_{ij} = q \left(\hat{I}_i \hat{I}_j + \hat{I}_j \hat{I}_i - \frac{2}{3} \hat{\mathbf{I}}^2 \delta_{ij} \right). \quad (8.96)$$

Задача 8.8

В соответствии с соглашением, в таблицах квадрупольных моментов приводится величина Q , которая есть среднее значение \hat{Q}_{zz} в состоянии $|I, I_z = I\rangle$ с максимальной возможной проекцией I_z на ось квантования (z). Найдите связь между Q и коэффициентом q в определении (8.96).

Решение

$$q = \frac{3Q}{2I(2I-1)}. \quad (8.97)$$

Нули в числителе (8.97) при $I = 0$ и $I = 1/2$ не означают, что $q \rightarrow \infty$, поскольку при таких значениях I квадрупольный момент отсутствует, гл. 22.5.

Задача 8.9

Рассчитайте квадрупольный момент Q для одной частицы с зарядом e на орбите с квантовыми числами n, ℓ, j .

Решение

$$Q = e \langle 3z^2 - r^2 \rangle_{n\ell jj} = -\frac{2j-1}{2j+2} \langle r^2 \rangle_{n\ell}. \quad (8.98)$$

Результат зануляется при $j = 1/2$, как это и должно быть. Здесь отрицательный знак отражает тот факт, что частица с максимальной проекцией углового момента на ось z имеет волновую функцию, в основном сосредоточенную в перпендикулярной (экваториальной) плоскости, вспомните (16.136); её облако *сплюснуто* и

$$\langle z^2 \rangle < \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle. \quad (8.99)$$

Аналогично выражению (8.96), симметричный тензор вторых производных электростатического потенциала может быть эффективно представлен внутри мультиплета $|JJ_z\rangle$ атомных состояний с моментом J как

$$\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 = \frac{3\varphi_{JJ}}{2J(2J-1)} \left(\hat{J}_i \hat{J}_j + \hat{J}_j \hat{J}_i - \frac{2}{3} \hat{\mathbf{J}}^2 \delta_{ij} \right). \quad (8.100)$$

Мы сделали этот тензор бесследным, потому что только бесследная (истинно квадрупольная, а не скалярная) часть выживает при свёртке с бесследным квадрупольным тензором. В уравнении (8.100) φ_{JJ} есть величина $(\partial^2\varphi/\partial z^2)_0$ в атомном состоянии $|JJ_z = J\rangle$; сравните (8.97).

Задача 8.10

Рассчитайте φ_{JJ} для одного валентного электрона в состоянии $|n\ell j\rangle$.

Решение Замкнутые оболочки образуют сферически симметричное ядро с нулевым вкладом в квадрупольный момент. Валентный электрон даёт вклад

$$\varphi_{jj} = \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \left\langle n\ell j, j_z = j \left| \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_N|} \right| n\ell j, j_z = j \right\rangle, \quad (8.101)$$

где \mathbf{r}_N и \mathbf{r} - координаты ядра и электрона соответственно, а производные должны браться при $\mathbf{r}_N \rightarrow 0$. На основании (8.98) мы получаем

$$\varphi_{jj} = e \left\langle \frac{3z^2 - r^2}{r^5} \right\rangle_{n\ell jj} = e \left\langle \frac{3\cos^2\theta - 1}{r^3} \right\rangle_{n\ell jj} = -e \frac{2j-1}{2j+2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n\ell}. \quad (8.102)$$

Задача 8.11

Покажите, что квадрупольное сверхтонкое расщепление для семейства мультиплетов с квантовыми числами F, J, I даётся формулой

$$\delta E_F^{(Q)}(J, I) = \varphi_{JJ} Q \frac{(3/2)X(X+1) - 2J(J+1)I(I+1)}{4J(2J-1)I(2I-1)}, \quad (8.103)$$

где величина $X \equiv X_F(J, I)$ была определена в (8.83).

Изучение квадрупольной сверхтонкой структуры атома или молекулы — это один из наилучших способов определения квадрупольного момента ядра, если величина φ_{JJ} известна или может быть рассчитана. Существует целый ряд других эффектов, связанных с распределением зарядов и токов внутри ядра. Во-первых, мы уже упоминали об *изотопическом сдвиге* атомных уровней. Ядерные свойства, такие как магнитный и квадрупольный моменты, среднеквадратичный радиус и т.д., изменяются при возбуждения ядра; кроме того, атомные уровни вдобавок немного сдвинуты (*изомерный сдвиг*). Атомные уровни зависят также от окружающей среды (*химический сдвиг*). Это делает атомную спектроскопию полезным инструментом для изучения свойств ядер и конденсированных сред, а также для точных измерений фундаментальных констант. Особенно интересна спектроскопия мюонных атомов, в которых мюон проникает глубоко внутрь ядра [?].

Всякое тело пребывает в том состоянии, в котором оно находится, до тех пор пока внешняя сила не изменит это состояние.

И. Ньютон, цит. из книги Р. Вестфолла, *Не знать покоя — биография Исаака Ньютона*

Глава 9

Атом в статическом поле

9.1 Поляризуемость в постоянном электрическом поле

Рассмотрим систему заряженных частиц, находящихся во внешнем однородном постоянном электрическом поле $\vec{\mathcal{E}}$. Для определённости будем говорить об «атоме», хотя результаты носят более общий характер.

Однородное электрическое поле характеризуется электростатическим потенциалом

$$\varphi(\mathbf{r}) = -(\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{r}), \quad (9.1)$$

и потенциальная энергия взаимодействия системы с полем даётся суммой по частицам с зарядами e_a ,

$$\hat{H}' = \sum_a e_a \varphi(\mathbf{r}_a) = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \sum_a e_a \mathbf{r}_a = -(\vec{\mathcal{E}} \cdot \hat{\mathbf{d}}), \quad (9.2)$$

где мы ввели оператор $\hat{\mathbf{d}}$ дипольного момента системы.

Часто внешнее статическое поле достаточно слабое, так что его можно учитывать по теории возмущений. В первом порядке возмущённая волновая функция $|\psi_k\rangle$, соответствующая невозмущённому состоянию $|k\rangle$, даётся суперпозицией (19.22) невозмущённых состояний,

$$|\psi_k\rangle = |k\rangle - \sum_{n \neq k} \frac{(\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{nk})}{E_k^\circ - E_n^\circ} |n\rangle. \quad (9.3)$$

Здесь и далее матричные элементы \mathbf{d}_{nk} берутся для невозмущённых состояний.

Правило отбора по чётности играет здесь большую роль. Возмущение (9.3) генерирует примеси состояний $|n\rangle$, связанных с начальным состоянием

дипольными матричными элементами. Если невозмущённое состояние $|k\rangle$ имеет определённую чётность, примешанные состояния должны иметь *противоположную* чётность. В результате возмущённая волновая функция (9.3) не имеет определённой чётности — система в электрическом поле может приобрести *постоянный дипольный момент*, вспомните обсуждение в гл. 8.5. Среднее значение дипольного момента в присутствии поля равно

$$\langle \mathbf{d} \rangle_k \equiv \langle \psi_k | \hat{\mathbf{d}} | \psi_k \rangle, \quad (9.4)$$

где оба бра- и кет- вектора должны включать поправки первого порядка (9.3),

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{d} \rangle_k &= \langle k | \hat{\mathbf{d}} | k \rangle - \sum_{n \neq k} \left\{ \langle k | \hat{\mathbf{d}} | n \rangle \frac{(\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{nk})}{E_k^\circ - E_n^\circ} + \frac{(\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{nk}^*)}{E_k^\circ - E_n^\circ} \langle n | \hat{\mathbf{d}} | k \rangle \right\} \\ &= \mathbf{d}_{kk}^\circ - \sum_{n \neq k} \frac{\mathbf{d}_{kn}(\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{nk}) + (\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{kn})\mathbf{d}_{nk}}{E_k^\circ - E_n^\circ}. \end{aligned} \quad (9.5)$$

Здесь голый матричный элемент $\mathbf{d}_{kk}^\circ \equiv \langle k | \hat{\mathbf{d}} | k \rangle$ зануляется, если состояние имеет без поля определённую чётность. Результат (9.5) означает, что дипольный момент $\langle \mathbf{d} \rangle_k$ в приложенном электрическом поле состоит из двух частей, исходного момента \mathbf{d}_{kk}° , и *наведённого* момента $\langle \mathbf{d}' \rangle_k$, который пропорционален полю,

$$\langle \mathbf{d} \rangle_k = \mathbf{d}_{kk}^\circ + \langle \mathbf{d}' \rangle_k. \quad (9.6)$$

Коэффициент пропорциональности между наведённым дипольным моментом $\langle \mathbf{d}' \rangle_k$ и индуцирующим полем $\vec{\mathcal{E}}$ можно назвать *статической поляризуемостью* (ср. *Задачу 12.8*),

$$\langle d'^i \rangle_k = \alpha_k^{ij} \mathcal{E}_j. \quad (9.7)$$

Поляризуемость α_k^{ij} есть тензор второго ранга, зависящий от пробного состояния $|k\rangle$,

$$\alpha_k^{ij} = \sum_{n \neq k} \frac{d_{kn}^i d_{nk}^j + d_{kn}^j d_{nk}^i}{E_n^\circ - E_k^\circ}. \quad (9.8)$$

Определение (9.8) показывает, что тензор статической поляризуемости является вещественным и симметричным, $\alpha_k^{ij} = \alpha_k^{ji}$. Как видно из (9.7), α имеет размерность объёма.

Для волновой функции (9.3) мы можем использовать общий рецепт (19.18), чтобы определить изменение энергии вплоть до второго порядка по отношению к электрическому полю

$$E_k = E_k^\circ - (\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{kk}^\circ) - \sum_{n \neq k} \frac{|(\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{nk})|^2}{E_n^\circ - E_k^\circ}, \quad (9.9)$$

или, в терминах тензора поляризуемости (9.8),

$$E_k = E_k^\circ - (\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{kk}^\circ) - \frac{1}{2} \alpha_k^{ij} \mathcal{E}_i \mathcal{E}_j. \quad (9.10)$$

Мы пришли к классической формуле: энергия системы зарядов во внешнем поле включает взаимодействие этого поля с исходным дипольным моментом, $(\vec{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}_{kk}^\circ)$ (линейный член), и с дипольным моментом, наведённым тем же полем (квадратичный член). Как и в классической электростатике,

$$\frac{\partial E_k}{\partial \mathcal{E}_i} = -d_{kk}^{\circ i} - \alpha_k^{ij} \mathcal{E}_j = -\left(d_{kk}^{\circ i} + \langle d^i \rangle_k\right) = -\langle d^i \rangle_k. \quad (9.11)$$

Таким образом, теория возмущений приводит к обычной картине системы зарядов, поляризованных однородным электростатическим полем. Статическая поляризуемость является частным случаем *теории линейного отклика*, которая вводит *восприимчивость* системы как отклик на некоторое внешнее воздействие.

9.2 Эффект Штарка

В квантовой теории сдвиг (9.9) уровней энергии иногда называют **эффектом Штарка**. Если исходные состояния $|k\rangle$ имеют определённую чётность, $\mathbf{d}_{kk}^\circ = 0$ и *линейный* эффект Штарка отсутствует. Если имеется состояние $|k\rangle$ с определённым угловым моментом $J \neq 0$, для применения теории возмущений необходим выбор правильных линейных комбинации нулевого порядка, поскольку исходные состояния вырождены по проекции $J_z = M$, независимо от выбора оси квантования.

Возмущённая система, первоначально инвариантная относительно вращений, теряет эту инвариантность, поскольку внешнее поле выделяет направление в пространстве. Однако *аксиальная симметрия* по отношению к направлению поля по-прежнему остаётся. Поэтому проекция J_z углового момента на ось поля ($\mathcal{E} = \mathcal{E}_z$) всё ещё сохраняется, в отличие от J_x и J_y . Если мы выберем ось z поля в качестве оси квантования, состояния

с определёнными значениями $J_z = M$ диагонализуют полный гамильтониан и служат правильными линейными комбинациями для дальнейшего применения теории возмущений. Правильные линейные комбинации определяются симметрией, и нет никакой необходимости в решении секулярного уравнения.

Квадратичный эффект Штарка – это расщепление энергий магнитных подуровней данного JM -мультиплета по проекции M в слабом электрическом поле. Зависимость расщепления от M может быть установлена в общем виде. Давайте рассмотрим подпространство $2J + 1$ состояний $|(k)JM\rangle$ мультиплета, где (k) обозначает все фиксированные квантовые числа, не относящиеся к вращениям. В этом подпространстве мы введём эффективный оператор $\hat{\alpha}_k^{ij}$ таким образом, что его матричные элементы равны компонентам (9.8) тензора поляризуемости. Наиболее общий вид такого симметричного тензорного оператора для изотропной системы (определённое значение J) есть, в духе векторной модели и по аналогии с (23.96) и (23.100),

$$\hat{\alpha}_k^{ij} = \chi_k \delta_{ij} + \beta_k \left(\hat{J}_i \hat{J}_j + \hat{J}_j \hat{J}_i - \frac{2}{3} \hat{\mathbf{J}}^2 \delta_{ij} \right). \quad (9.12)$$

Этот тензор разложен здесь на скалярную часть, пропорциональную следу α^{ii} [нет аналога в квадрупольном случае (23.96)], и бесследную квадрупольную часть. В результате, оператор эффективно сокращается до двух численных констант, скалярной и тензорной поляризуемости, χ_k и β_k . Эти константы определяются структурой состояния $|k\rangle$; они всё ещё могут зависеть от величины J , но не от компонент \hat{J}_i .

В случае $J = 0$ мы имеем просто сдвиг единственного состояния $M = 0$, остаётся только скалярная компонента поляризуемости,

$$\hat{\alpha}_k^{ij}(J = 0) = \chi_k \delta_{ij}, \quad (9.13)$$

и выражение (9.8) для скалярной поляризуемости упрощается,

$$\chi_k = 2 \sum_{n \neq k} \frac{d_{kn}^z d_{nk}^z}{E_n^\circ - E_k^\circ} = 2 \sum_{n \neq k} \frac{|d_{kn}^z|^2}{E_n^\circ - E_k^\circ}. \quad (9.14)$$

Выражение (9.14) является положительно определённым для основного состояния.

Задача 9.1

Покажите, что поляризуемость (9.14) для гармонического осциллятора совпадает с точным результатом *Задачи 12.8*.

В атомной физике для дипольного перехода из основного состояния $|0\rangle$ в возбуждённое состояние $|n\rangle$ вводятся так называемые *силы осцилляторов* f_{n0} ,

$$f_{n0} = \frac{2m\omega_{n0}}{e^2\hbar} |d_{n0}^z|^2, \quad (9.15)$$

где m есть масса электрона, а $\omega_{n0} = (E_n^\circ - E_0^\circ)/\hbar$ есть частота перехода. Тогда статическая поляризуемость (9.14) основного состояния атома с $J = 0$ может быть выражена через сумму сил осцилляторов,

$$\chi_0 = \frac{e^2}{m} \sum_{n \neq 0} \frac{f_{n0}}{\omega_{n0}^2}. \quad (9.16)$$

Это объясняет происхождение термина «сила осциллятора», так как результат (9.16) действительно есть сумма поляризуемостей (12.57) отдельных атомных осцилляторов с частотами ω_{n0} , взвешенных с их силами f_{n0} .

Задача 9.2

Найти квадратичное расщепление Штарка в мультиплете $|JM\rangle$.

Решение

$$\delta E_k(JM) = -\frac{1}{2} \mathcal{E}^2 \left\{ \chi_k - \frac{2}{3} \beta_k [J(J+1) - 3M^2] \right\}. \quad (9.17)$$

9.3 Поляризуемость атома водорода

Поляризуемость (9.8) содержит сумму по всем промежуточным состояниям, возбуждённым из начального состояния дипольным оператором. Это суммирование делает практическое вычисление нелёгкой задачей.

Точный ответ можно получить для квадратичного эффекта в основном состоянии $|0\rangle$ атома водорода. Здесь можно даже точно решить уравнение Шрёдингера при наличии электрического поля, разделив переменные в параболических координатах [12], § 77. Мы ограничимся прямым вычислением скалярной поляризуемости (9.14),

$$\chi_0 = 2e^2 \sum_n \frac{z_{0n} z_{n0}}{E_n^\circ - E_0^\circ}. \quad (9.18)$$

Ограничение $n \neq 0$ не является необходимым, поскольку в любом случае $z_{00} = 0$. Задача может быть решена при помощи вспомогательного оператора $\hat{\xi}$, определённого таким образом, что

$$\hat{z}|0\rangle = [\hat{\xi}, \hat{H}^o]|0\rangle, \quad (9.19)$$

где \hat{H}^o есть невозмущённый гамильтониан атома водорода. Оператор $\hat{\xi}$ имеет смысл интеграла по времени z -координаты электрона (движение вдоль поля).

Матричные элементы, необходимые в (9.18), можно теперь записать в виде

$$z_{n0} = \langle n | [\hat{\xi}, \hat{H}^o] | 0 \rangle = (E_0^o - E_n^o) \xi_{n0}. \quad (9.20)$$

Это упрощает выражение для поляризуемости до

$$\chi_0 = 2e^2 \sum_n \frac{z_{0n}(E_0^o - E_n^o)\xi_{n0}}{E_n^o - E_0^o} = -2e^2 \sum_n z_{0n}\xi_{n0}, \quad (9.21)$$

и сумма по промежуточным состояниям сводится к среднему значению оператора $\hat{z}\hat{\xi}$ в основном состоянии,

$$\alpha_0 = -2e^2 (z\xi)_{00}. \quad (9.22)$$

Задача 9.3

Найдите оператор $\hat{\xi}$ и вычислите поляризуемость основного состояния атома водорода.

Решение Предположим, что $\hat{\xi}$ есть функция только координат, фактически $\xi = \xi(r, \theta)$. Тогда (9.19), вместе с явным выражением для функции основного состояния $\psi_0(r)$, приводит к дифференциальному уравнению для функции ξ . Это уравнение решается с помощью разделения переменных в сферических координатах. В результате получим (a есть боровский радиус)

$$\xi = -\frac{1}{e^2} \left(\frac{r}{2} + a \right) r \cos \theta = -\frac{z}{e^2} \left(\frac{r}{2} + a \right), \quad (9.23)$$

так что

$$\chi_0 = 2 \langle 0 | z^2 \left(\frac{r}{2} + a \right) | 0 \rangle. \quad (9.24)$$

Благодаря сферической симметрии основного состояния, для любой $f(r)$,

$$\langle 0|f(r)z^2|0\rangle = \frac{1}{3}\langle 0|f(r)r^2|0\rangle. \quad (9.25)$$

Используя явное выражение для волновой функции основного состояния, получаем

$$(r^n)_{00} = \frac{(n+2)!}{2^{n+1}} a^n, \quad (9.26)$$

$$\chi_0 = \frac{2}{3} \left[\frac{1}{2}(r^3)_{00} + a(r^2)_{00} \right] = \frac{9}{2} a^3. \quad (9.27)$$

9.4 Эффект Штарка в атоме водорода

Атом водорода своеобразен благодаря «случайному» кулоновскому вырождению. Вследствие этого можно взять в качестве невозмущённого состояния любую суперпозицию уровней с разными ℓ , но одним и тем же главным квантовым числом n . В частности, можно наложить друг на друга ℓ -орбитали противоположной чётности. Тогда невозмущённое состояние не имеет определённой чётности, и невозмущённый дипольный момент \mathbf{d}_{kk}^0 не обращается в нуль. Таким образом, мы приходим к *линейному* эффекту Штарка. Основное состояние является невырожденным, и для него возможен только квадратичный эффект. Линейный эффект появляется уже при $n = 2$.

Задача 9.4

В рассуждении выше мы пренебрегали спин-орбитальным расщеплением, считая, что эффект, связанный с электрическим полем, больше этого расщепления. В этом случае все четыре состояния с $n = 2$, а именно $2s$ и $2p$, можно рассматривать как изначально вырожденные, пренебрегая спином электрона. Оцените величину электрического поля, для которого это предположение является правильным.

Решение Рассмотрим четыре вырожденных состояния с $n = 2$. Соображения симметрии показывают, что нет необходимости брать линейные комбинации их всех. Так как проекция $\ell_z = m$ на направление поля сохраняется, p -состояния $|n\ell m\rangle = |211\rangle$ и $|n\ell m\rangle = |21-1\rangle$ не смешиваются, так что для этих состояний может наблюдаться только квадратичный эффект. Линейный эффект возникает для вырожденных состояний с одним и тем же значением m , но разными ℓ , а именно: для $2s$ -состояния

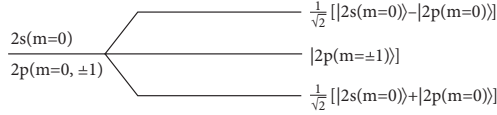


Рис. 9.1. Схема уровней оболочки $n = 2$ в атоме водорода в электрическом поле, сильном по сравнению с интервалами тонкой структуры

$|200\rangle$ и $2p$ -состояния $|210\rangle$. Здесь мы имеем дело с вырожденным пределом стандартной двухуровневой задачи, гл. 19.4. Возмущение равно

$$\hat{H}' = -e\mathcal{E}\hat{z}, \quad (9.28)$$

и правильные линейные комбинации есть

$$|\mp\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle \mp |210\rangle) \quad (9.29)$$

с энергиями, сдвинутыми от невозмущённых значений Бальмера недиагональным элементом матрицы смешивания

$$\delta E_{\mp} = \pm e\mathcal{E} |\langle 200|z|210\rangle|. \quad (9.30)$$

Задача 9.5

Рассчитайте элемент матрицы смешивания и нарисуйте схему линейного расщепления уровней для $n = 2$.

Решение Схема уровней показана на Рис. 24.1, и расщепление даётся равенством (9.30) с

$$\langle 200|z|210\rangle = -3a. \quad (9.31)$$

Квадратичный эффект для оболочки $n = 2$ также отличается от обсуждавшегося выше для $n = 1$. В p -состояниях орбитальный момент равен $\ell = 1$, и тензор поляризуемости, усреднённый по всем квантовым числам, за исключением l_z имеет вид (9.12) с $\hat{\mathbf{J}} \rightarrow \hat{\ell}$. Если электрическое поле слабо по сравнению с эффектами тонкой структуры, сохраняется вектор $\hat{\mathbf{j}}$, и, соответственно, $\hat{\mathbf{J}} \rightarrow \hat{\mathbf{j}}$ в (9.12). Ещё раз подчеркнем, что коэффициенты χ_k и β_k определяются внутренней структурой системы и зависят от ℓ и j , но не от m .

9.5 Неоднородное электрическое поле и дополнительные комментарии 225

9.5 Неоднородное электрическое поле и дополнительные комментарии

Если внешнее электрическое поле не является однородным, мультипольные моменты распределения заряда внутри системы взаимодействуют с высшими производными электростатического потенциала φ внешнего поля. На практике поле обычно слабо меняется на размерах атома или ядра. Поэтому наиболее существенные поправки происходят от неисчезающих производных самого низкого порядка и, соответственно, самых низких мультиполей системы.

Как правило, достаточно учесть квадрупольное взаимодействие, вспомним (23.95), с градиентом внешнего поля

$$\hat{H}'_Q = -\frac{1}{6}(\nabla_i \mathcal{E}_j)_0 \hat{Q}_{ij}, \quad (9.32)$$

где градиент берётся в начале координат, где находится атом (или ядро), и \hat{Q}_{ij} есть оператор квадрупольного момента системы.

Задача 9.6

Найдите расщепление уровня $|JM\rangle$ из-за ненулевого градиента электрического поля $(\partial E_z / \partial z)_0 = -(\partial^2 \varphi / \partial z^2)_0 \equiv -\varphi''$.

Решение

$$\delta E_k^{(Q)}(JM) = \varphi'' Q_k \frac{3M^2 - J(J+1)}{4J(2J-1)}, \quad (9.33)$$

где Q_k есть квадрупольный момент системы в состоянии $|k\rangle$, определённый стандартным образом, *Задача 23.8*, для подсостояния с максимальной проекцией $M = J$.

Во всех рассмотренных выше случаях уровни с противоположными значениями $\pm M$ проекции углового момента остаются вырожденными. Это есть прямое следствие инвариантности аксиально-симметричного гамильтониана по отношению к отражению в любой плоскости, которая содержит ось z электрического поля. Возьмём плоскость xz . При таком отражении y -компонента любого вектора меняет знак, в то время как x - и z -компоненты остаются неизменными. Проекция углового момента на ось z , $\hbar \ell_z = (x p_y - y p_x)$, меняет знак, $M \rightarrow -M$. Поскольку гамильтониан с добавленным электрическим полем \mathcal{E}_z не меняется, состояния $|JM\rangle$ и $|J-M\rangle$ вырождены. Кроме того, эти состояния переходят друг в друга при *обращении времени*, в то время как электрическое поле любой конфигурации не

нарушает \mathcal{T} -инвариантности, так что состояния, которые получаются из $|JM\rangle$ и $|J-M\rangle$ в присутствии поля, остаются вырожденными. В магнитном поле ситуация иная.

Строго говоря, однородное электрическое поле делает состояния, которые мы рассматривали выше, *квазистационарными*. Как и для холодной эмиссии из металла, *Задача 2.5*, в однородном электрическом поле возникает конечная, хотя и небольшая, вероятность туннельного выхода частиц из системы, например, ионизации атома. Однако время жизни по отношению к ионизации полем обычно очень большое [12], § 77.

9.6 Классический эффект Зеемана

Переходя к эффектам статического *магнитного поля*, напомним, что мы уже рассмотрели свободное движение, гл. 13, и спин, гл. 20.4, в магнитном поле. Если система *связанных* заряженных частиц помещается в однородное статическое магнитное поле \vec{B} , возникает характерное расщепление спектральных линий. Расщепление в *слабом* магнитном поле называется **эффектом Зеемана**.

В классической теории эффект Зеемана прямо следует из электродинамики. Согласно **теореме Лармора** [3], § 45, поведение системы заряженных частиц в произвольном сферически симметричном электростатическом потенциале и слабом однородном магнитном поле такое же, как в том же электрическом поле, но без магнитного поля, в системе отсчёта, которая равномерно вращается с **ларморовской частотой**

$$\vec{\Omega}_L = -\frac{e}{2mc} \vec{B}, \quad (9.34)$$

где отношение e/t считается одинаковым для всех частиц. Грубо суть теоремы Лармора может быть объяснена на примере финитного движения заряженной частицы по окружности с частотой ω_0 , что соответствует кинетической энергии $E_0 = (1/2)mr^2\omega_0^2$. Если мы приложим магнитное поле перпендикулярно плоскости орбиты, частота вращения станет $\omega_0 + \Omega_L$, т.е. $E_0 \rightarrow E = (1/2)mr^2(\omega_0 + \Omega_L)^2$. Если поле слабое, $\omega_0 \gg \Omega_L$,

$$E \approx E_0 + mr^2\omega_0\Omega_L = E_0 + L\Omega_L, \quad (9.35)$$

где L есть классический орбитальный момент. Дополнительная энергия,

$$L\Omega_L = -\frac{e}{2mc} LB = -\mu B, \quad (9.36)$$

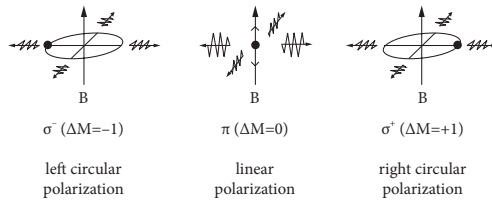


Рис. 9.2. Классический эффект Зеемана

возникает из взаимодействия орбитального магнитного момента $\mu = g_\ell L$, $g_\ell = e/2mc$ с магнитным полем. На языке классической механики, в (9.36) принимаются во внимание силы Кориолиса, но пренебрегается квадратичными по Ω_L центробежными эффектами.

В классической теории электрона атомный электрон рассматривается как линейный осциллятор, который излучает свет с частотой, равной его собственной частоте ω_0 . В слабом магнитном поле \vec{B} линия, вдоль которой электрон колеблется, начинает вращаться вокруг направления поля с частотой Ω_L . Разложим первоначальное гармоническое колебание на параллельную и перпендикулярную к \vec{B} компоненты. Поле не влияет на продольную компоненту, которая всё ещё генерирует спектральные линии излучения с невозмущённой частотой ω_0 . Поперечная компонента может быть представлена в виде суперпозиции двух круговых движений с противоположными направлениями вращения. В магнитном поле соответствующие частоты расщепляются, $\omega_0 \rightarrow \omega_0 \pm \Omega_L$.

Со спектральной точки зрения, магнитное поле преобразует невозмущённую линию в **триплет Лоренца**: π -компоненту с $\omega = \omega_0$ и σ -компоненты с $\omega \pm \Omega_L$. Если наблюдатель смотрит в направлении, перпендикулярном к магнитному полю, он видит π -линию как волну, линейно поляризованную вдоль поля, Рис. 24.2. Как всегда, мы определяем направление поляризации по электрическому полю излучаемой волны. Смещённые σ -линии будут линейно поляризованы перпендикулярно статическому магнитному полю. Глядя вдоль магнитного поля, наблюдатель видит только σ -линии с противоположными круговыми поляризациями; π -линии здесь будут невидимы, поскольку колеблющийся заряд не излучает вдоль направления движения.

Таким образом, согласно классической электромагнитной теории, все спектральные линии атома в магнитном поле приводят к *нормальному эффекту Зеемана* с триплетом частот. На опыте же чаще всего в атомах наблюдается *аномальный эффект Зеемана*, когда число расщеплённых компонент не соответствует триплету Лоренца.

9.7 Квантовая система в магнитном поле

Общий гамильтониан нерелятивистской системы заряженных частиц в постоянном магнитном поле может быть записан в виде $\hat{H} = \hat{H}^\circ + \hat{H}'$, где магнитные эффекты даются выражением

$$\hat{H}' = - \sum_a \left\{ \frac{e_a}{2m_a c} \left(\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}}_a \right) - \frac{e_a^2}{2m_a c^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_a) + g_s^{(a)} \hbar \hat{\mathbf{s}}_a \cdot \vec{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_a) \right\}. \quad (9.37)$$

Нам уже приходилось иметь дело с частями этого гамильтониана в гл. 13.2 для орбитального магнетизма, в гл. 20.4 для спинowego магнетизма и в задаче 23.6.

В случае однородного магнитного поля $\vec{\mathbf{B}}$ удобно использовать симметричную калибровку с векторным потенциалом

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} [\vec{\mathbf{B}} \times \mathbf{r}]. \quad (9.38)$$

При таком выборе

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad (9.39)$$

и гамильтониан немного упрощается,

$$\hat{H} = \hat{H}^\circ - \sum_a \left\{ \frac{e_a}{m_a c} \left(\mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}}_a \right) - \frac{e_a^2}{2m_a c^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_a) + g_s^{(a)} \hbar (\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \vec{\mathbf{B}}) \right\}. \quad (9.40)$$

Как и раньше, \hat{H}° означает часть гамильтона, которая не содержит магнитного поля. В симметричной калибровке (9.38)

$$\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} [\vec{\mathbf{B}} \times \mathbf{r}] \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \vec{\mathbf{B}} \cdot [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = \frac{\hbar}{2} \vec{\mathbf{B}} \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}, \quad (9.41)$$

что явно соответствует орбитальному магнетизму, так что

$$\hat{H} = \hat{H}^\circ - \sum_a \left\{ \frac{e_a \hbar}{2m_a c} (\vec{\mathbf{B}} \cdot \vec{\boldsymbol{\ell}}_a) - \frac{e_a^2}{8m_a c^2} [\vec{\mathbf{B}} \times \mathbf{r}_a]^2 + g_s^{(a)} \hbar (\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \vec{\mathbf{B}}) \right\}. \quad (9.42)$$

Первое слагаемое в фигурных скобках здесь аналогично классическому взаимодействию (9.36) орбитального магнитного момента с магнитным полем. Аналогом следующего (квадратичного по полю) члена пренебрегалось

в классическом случае (9.35). Как можно увидеть из непосредственной оценки, он может стать сопоставимым с предыдущим членом только в очень сильном магнитном поле и на больших орбитах. На фоне линейного члена квадратичные эффекты экспериментально наблюдались в спектре поглощения щелочных металлов для переходов в сильно возбуждённые состояния, $n \gg 1$, в магнитном поле $\mathcal{B} \sim 1$ Т, см. ниже, гл. 24.12.

9.8 Нормальный квантовый эффект Зеемана

Для относительно слабого однородного магнитного поля мы можем пренебречь квадратичным членом гамильтониана (9.42). Давайте также не будем принимать во внимание спиновый магнетизм. Для *бесспиновых* частиц с одинаковым соотношением e/m гамильтониан (9.42) становится равным

$$\hat{H} = \hat{H}^\circ - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\mathcal{B}} \cdot \sum_a \hat{\vec{\ell}}_a = \hat{H}^\circ - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\mathcal{B}} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \quad (9.43)$$

где \mathbf{L} есть полный орбитальный момент системы. Гамильтониан (9.43) очень прост. Конечно, мы выбираем ось квантования z вдоль магнитного поля, тогда $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$. Если невозмущённый гамильтониан \hat{H}° был инвариантен относительно вращений, так что анизотропия возникала только за счёт магнитного поля, невозмущённые состояния имели определённые значения $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z . Невозмущённая энергия E_L° зависит от L (и других квантовых чисел), но не от $L_z = M$. Как видно из (9.43), квантовые числа L и M также сохраняются для возмущённого гамильтониана \hat{H} . Стационарные состояния $|LM\rangle$ остаются стационарными, хотя их энергии изменяются:

$$E_{LM} = E_L^\circ - \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{B} M = E_L^\circ - \mu_B \mathcal{B} M. \quad (9.44)$$

Магнитное поле в этом случае просто расщепляет все вырожденные LM -мультиплеты на $2L + 1$ компонент с различными значениями M . Расщепление *линейно* по величине поля и эквидистантно, Рис. 24.3, с шагом, равным кванту ларморовской частоты,

$$E_{L, M+1} - E_{LM} = -\mu_B \mathcal{B} = -\frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{B} = \hbar \Omega_L. \quad (9.45)$$

В отличие от электрического поля, вырождение сопряжённых по времени состояний $\pm M$ снимается. Как обсуждалось выше, это связано с

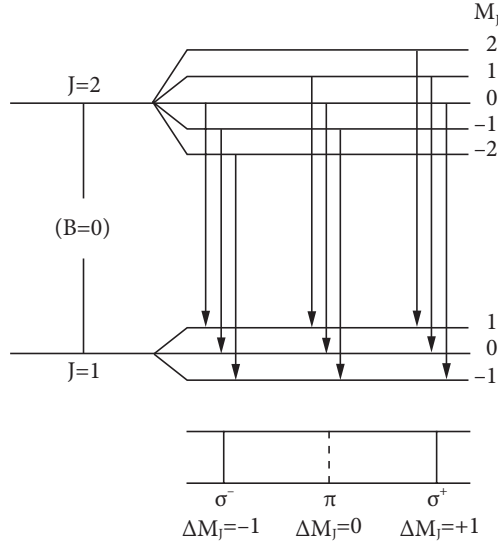


Рис. 9.3. Нормальный квантовый эффект Зеемана и триплет Лоренца; пример переходов $\Delta M = 0, \pm 1$ между мультиплетами $J = 2$ и $J = 1$ с одинаковым гиромагнитным отношением

\mathcal{T} -нечётным характером магнитного поля, которое действует противоположным образом на состояния с противоположными направлениями вращения.

Эти результаты точно соответствуют *классическому нормальному эффекту Зеемана*. В самом деле, рассмотрим излучение невозмущённой частоты $\omega_0 = (E_1^\circ - E_2^\circ)/\hbar$, отвечающее переходу между двумя невозмущёнными мультиплетами, Рис. 24.3. При наличии магнитного поля вместо этого возникает ряд переходов между различными компонентами двух расщеплённых мультиплетов. Возможные частоты равны

$$\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar} = \frac{E_1^\circ - E_2^\circ}{\hbar} - \frac{\mu_B}{\hbar} \mathcal{B}(M_1 - M_2) = \omega_0 + \Omega_L \Delta M. \quad (9.46)$$

Как мы увидим в теории излучения, наиболее интенсивными переходами являются переходы с изменением проекции $\Delta M = 0, \pm 1$. Это связано с правилами отбора для дипольного излучения, которое имеет самую большую интенсивность по сравнению с другими мультиполями. Такие переходы точно соответствуют лоренцевскому триплету $\omega = \omega_0, \omega_0 \pm \Omega_L$. Легко видеть, что поляризация излучаемых волн также совпадает с тем, что мы упоминали для классического случая. В π -переходе, $\Delta M = 0$, излучаемый

фотон не несёт углового момента в направлении z , что означает, что волна линейно поляризована вдоль поля. σ -переходы с $\Delta M = \pm 1$ соответствуют круговой поляризации в плоскости, перпендикулярной полю.

9.9 Аномальный квантовый эффект Зеемана

Аномальный квантовый эффект Зеемана возникает, когда во взаимодействии с магнитным полем даёт вклад спиновый член в гамильтониане (9.40). На практике это случается чаще, чем «нормальный» эффект. Для системы одинаковых частиц, например, атомных электронов с гиромангнитными отношениями g_ℓ и g_s , гамильтониан (9.43) заменяется на

$$\hat{H} = \hat{H}^0 - \hbar(g_\ell \hat{\mathbf{L}} + g_s \hat{\mathbf{S}}) \cdot \vec{\mathcal{B}}, \quad \hat{\mathbf{S}} = \sum_a \hat{\mathbf{s}}_a. \quad (9.47)$$

Дальнейшие расчёты в значительной мере зависят от соотношения между величинами внешнего поля \mathcal{B} и «внутреннего» поля, $\mathcal{B}_{\text{int}} \sim (1/c)[\mathbf{v} \times \vec{\mathcal{E}}] \sim 1 - 10 \text{ Т}$ в атомах, которое приводит к расщеплению тонкой структуры, гл. 23.

За исключением самых тяжёлых атомов, релятивистские эффекты не очень сильны, и LS -связь может служить хорошим приближением. Тогда L и S являются хорошими квантовыми числами многоэлектронных состояний. Пусть внешнее магнитное поле относительно слабо, так что зеемановское расщепление мало по сравнению интервалами тонкой структуры; это область правильного эффекта Зеемана. В такой ситуации тонкая структура определяет J также как хорошее квантовое число. Состояния $|LSJJ_z = M\rangle$ есть правильные линейные комбинации нулевого порядка. Физическую картину можно интерпретировать таким образом, что \mathbf{L} и \mathbf{S} связаны спин-орбитальным взаимодействием в \mathbf{J} , который прецессирует вокруг поля $\vec{\mathcal{B}}$. Зеемановское расщепление даётся средним значением магнитного взаимодействия в подсостояниях $|LSJM\rangle$ мультиплета.

Задача аналогична задаче гл. 23.5, и результат можно взять непосредственно из (23.55), изменив обозначения. Сдвиг энергии состояния $|LSJM\rangle$ равен

$$\delta E_M = -g\hbar\mathcal{B}M, \quad (9.48)$$

где эффективное гиромангнитное отношение вновь определяется фактором Ланде,

$$g = \frac{g_\ell + g_s}{2} + \frac{g_\ell - g_s}{2} \frac{L(L+1) - S(S+1)}{J(J+1)}. \quad (9.49)$$

Здесь важно, что мы имеем дело с *тождественными* электронами, так что гиромангнитные отношения $g_\ell = \mu_B/\hbar$ и $g_s = 2\mu_B/\hbar$ такие же, как для одного электрона,

$$\hat{\vec{\mu}} = \sum_a (g_\ell^{(a)} \hat{\vec{\ell}}_a + g_s^{(a)} \hat{\vec{s}}_a) = g_\ell \hat{\vec{L}} + g_s \hat{\vec{S}}. \quad (9.50)$$

В отличие от нормального эффекта Зеемана, здесь расщепление не одинаково, а определяется всеми квантовыми числами S, L и J . Уровень $|LSJM\rangle$ расщепляется на $2J + 1$ эквидистантных компонент, в то время как его *центр тяжести* не сдвигается,

$$\sum_M \delta E_M(LSJ) = 0. \quad (9.51)$$

Радиационные переходы между расщеплёнными по-разному зеемановскими мультиплетам дают в общем случае более трёх спектральных линий. Только спиновый синглет, $S = 0$, приводит к нормальному эффекту Зеемана.

9.10 Более сильное магнитное поле

Сейчас мы переходим к случаю, когда магнитное поле является *сильным по сравнению с расщеплением тонкой структуры*, но конечно, всё ещё слабее, чем электростатическое расщепление между уровнями с различными значениями L и S , — только тогда мы можем использовать теорию возмущений.

В таких «сильных» полях мы можем сначала пренебречь тонкой структурой. Орбитальный момент и спин тогда становятся несвязанными подсистемами, выстроенными независимо друг от друга вдоль магнитного поля $\vec{B} = B_z \hat{z}$. Тогда \hat{L}_z и \hat{S}_z коммутируют с гамильтонианом, который включает внешнее магнитное поле, но не спин-орбитальное взаимодействие, и дают хорошие квантовые числа M_L и M_S . Рассуждая качественно, сильное магнитное поле разрушает спин-орбитальное взаимодействие и заставляет \vec{L} и \vec{S} прецессировать по отдельности вокруг вектора \vec{B} (эффект Пашена-Бака).

Правильные линейные комбинации в случае магнитного поля более сильного, чем тонкая структура, есть *несвязанные* состояния $|LSM_L M_S\rangle$. Среднее значение магнитной части гамильтониана (9.47) определяет сдвиги энергии

$$\delta E_{M_L M_S} = -\hbar B \langle LSM_L M_S | g_\ell \hat{L}_z + g_s \hat{S}_z | LSM_L M_S \rangle = -\hbar B (g_\ell M_L + g_s M_S).$$

$$(9.52)$$

Подставляя стандартные гиромагнитные отношения для электронов, получаем

$$\delta E_{M_L M_S} = -\mu_B \mathcal{B} (M_L + 2M_S). \quad (9.53)$$

Теперь спин-орбитальное взаимодействие (23.31) является вторичным эффектом, что в первом порядке приводит к дальнейшим сдвигам уровней

$$\delta E_{M_L M_S}^{(\ell s)} = \langle L S M_L M_S | W_{LS} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) | L S M_L M_S \rangle = W_{LS} M_L M_S. \quad (9.54)$$

В промежуточных случаях спин-орбитальное взаимодействие и внешнее магнитное поле должны рассматриваться одновременно, что обычно приводит к секулярному уравнению некоторого порядка. Несмотря на то, что аналитически решить его невозможно, численную диагонализацию выполнить просто и, как правило, легко сделать качественную интерполяцию между предельными случаями слабого и сильного поля, для которых решение известно. Очень помогают соображения необходимости избегать пересечения уровней с одинаковой симметрией, гл. 10.5. В самом деле, предположим, что два уровня пересекаются при некотором значении $\mathcal{B} = \mathcal{B}_0$. Тогда их энергии близки в непосредственной близости от этого значения. Эта эффективная двухуровневая задача обсуждалась в гл. 10.4 и 10.5. Решение (10.42) показывает, что точное пересечение может произойти, только если одновременно выполняются два условия, $H_{11}(\mathcal{B}_0) = H_{22}(\mathcal{B}_0)$ и $H_{12}(\mathcal{B}_0) = 0$. Два независимых условия, как правило, не могут быть удовлетворены при помощи выбора одного параметра \mathcal{B}_0 . Пересечение происходит только в том случае, когда, благодаря свойствам симметрии, элемент H_{12} смешивающей матрицы тождественно равен нулю.

Для нашей задачи точной константой движения для любого значения магнитного поля является только проекция $J_z = M$ полного углового момента на направление поля. Уровни энергии $E_M(\mathcal{B})$ сохраняют значение M при изменении поля \mathcal{B} . Поскольку все матричные элементы гамильтониана между уровнями с различными M зануляются, эти уровни могут пересекаться, а уровни с одинаковой симметрией (с одинаковыми значениями M) не пересекаются.

Задача 9.7

Начертите качественно расщепление уровня $2p$ в водородоподобном атоме как функцию магнитного поля.

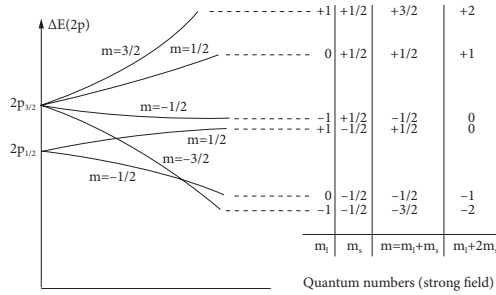


Рис. 9.4. Схема уровней для $2p$ -состояния водородоподобного атома в магнитном поле

Решение См. Рис. 24.4. В отсутствие магнитного поля мы имеем спин-орбитальное расщепление между вырожденным дублетом $2p_{1/2}$ и вырожденным квинтетом $2p_{3/2}$, который смещён в сторону больших энергий. В достаточно сильном магнитном поле степень упорядоченности определяется, в соответствии с (9.53), квантовым числом $m_l + 2m_s$. Полная проекция $m = m_l + m_s$ сохраняется при эволюции системы. Уровни с одинаковым m не пересекаются.

Задача 9.8

Ядро со спином I , гиромагнитным отношением g и квадрупольным моментом Q помещено в кристаллическую структуру, в которой имеется градиент электрического поля на ядре, $(\partial \mathcal{E}_z / \partial z)_0 = -\varphi''$. Кроме того, под углом θ с осью z приложено статическое магнитное поле \mathcal{B} . Найти энергетическое расщепление мультиплета $|IM\rangle$.

Решение Мы должны объединить электрический квадрупольный эффект (9.33), чётный по отношению к $M \rightarrow -M$, с эффектом Зеемана. Осложнением при *полуцелых* значениях I является то, что магнитное поле имеет поперечную компоненту $\mathcal{B} \sin \theta$, которая связывает состояния $M = \pm 1/2$, которые были бы вырожденными при наличии только электрического поля. Поэтому мы должны рассмотреть отдельно это подпространство размерности 2×2 , где требуется точная диагонализация магнитной части. В результате получим

$$\delta E(IM) = \varphi'' \frac{Q}{4I(2I-1)} [3M^2 - I(I+1)] - g\hbar M \mathcal{B} \cos \theta [1 + (\xi - 1)\delta_{|M|, 1/2}], \quad (9.55)$$

где параметр

$$\xi = \sqrt{1 + (I + 1/2)^2 \tan^2 \theta} \quad (9.56)$$

возникает при диагонализации.

9.11 Диамагнетизм

Магнитные эффекты, связанные с *линейными* членами гамильтониана (9.42) исчезают, если состояние атома не имеет ни спина, ни орбитального момента, $S = L = 0$. Это происходит, например, в атомах инертных газов, где электроны полностью заполняют некоторые оболочки, и все их угловые и магнитные моменты сокращаются.

В этой ситуации единственный эффект возникает от квадратичного члена (9.42)

$$\hat{H}^{(2)} = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a [\vec{B} \times \mathbf{r}_a]^2, \quad (9.57)$$

где, поскольку рассматриваются атомные электроны, мы считаем все заряды и массы одинаковыми. В магнитном поле, направленном вдоль оси z , этот гамильтониан равен

$$\hat{H}^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{B}^2}{8mc^2} \sum_a (x_a^2 + y_a^2). \quad (9.58)$$

Для расчёта среднего значения этого возмущения в невозмущённом состоянии с $L = S = 0$ необходимо знать среднеквадратичный радиус атома, $\langle R^2 \rangle$,

$$\left\langle \sum_a (x_a^2 + y_a^2) \right\rangle = \frac{2}{3} \sum_a \langle r_a^2 \rangle \equiv \frac{2}{3} Z \langle R^2 \rangle, \quad (9.59)$$

где Z - количество электронов. Здесь мы использовали сферическую симметрию состояния с $L = S = 0$. Окончательный результат для сдвига энергии заполненной оболочки равен

$$\delta E^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{B}^2 Z}{12 mc^2} \langle R^2 \rangle. \quad (9.60)$$

Среднее значение магнитного момента, подобно электрическому дипольному моменту (9.11), может быть записано в виде

$$\langle \mu_i \rangle = -\frac{\partial E}{\partial \mathcal{B}_i}. \quad (9.61)$$

В *линейном* приближении эта производная сводится к константе, которая пропорциональна угловому моменту,

$$\langle \mu \rangle_M = -g\hbar M, \quad (9.62)$$

где g есть соответствующее гиромагнитное отношение. Такие атомы образуют *парамагнитный* газ, в котором намагниченность пропорциональна внешнему магнитному полю. Более точно, каждый атом имеет свой собственный магнитный момент (9.61) но без поля эти моменты для различных атомов являются случайными и сокращаются. Поле расщепляет энергии и делает более выгодным заселение низкоэнергетических подуровней с магнитным моментом, направленным вдоль поля; энергия газа в целом *уменьшается*.

В случае $L = S = 0$ нет намагниченности отдельных атомов, но *квадратичный* сдвиг (9.60) приводит к зависимости энергии от поля. По аналогии с диэлектрической поляризуемостью, (9.7,9.11), можно определить *статическую магнитную восприимчивость* χ как

$$\chi^{ij} = \frac{\partial \langle \mu_i \rangle}{\partial \mathcal{B}_j}. \quad (9.63)$$

Согласно формулам (9.60) и (9.61), эта величина диагональна, $\chi^{ij} = \chi \delta_{ij}$, и *отрицательна*, энергия возрастает,

$$\delta E^{(2)} = -\frac{1}{2} \chi \mathcal{B}^2, \quad (9.64)$$

$$\chi = -\frac{Ze^2}{6mc^2} \langle R^2 \rangle. \quad (9.65)$$

Грубо говоря, характерный объём для электрической дипольной восприимчивости (9.27) есть объём атома, а для диамагнитной восприимчивости один размер заменяется классическим радиусом электрона (1.40), который в α^2 раз меньше.

9.12 К действительно сильным магнитным полям

Являясь эффектом второго порядка в магнитном поле, диамагнетизм, как правило, очень слаб. Эффект Мейснера в сверхпроводниках, гл. 14.7, есть проявление *идеального диамагнетизма*, когда магнитное поле полностью вытеснено из основной части вещества. Диамагнитные эффекты больше в молекулах, подобных *бензольным кольцам* с большим пространственным размером, или в полупроводниках (или полуметаллах, таких как висмут) с малой эффективной массой носителей заряда (электронов или дырок).

Другим экспериментально доступным примером являются сильно возбуждённые *ридберговские атомные состояния*, где кулоновский радиус орбиты становится очень большим. С одним возбуждённым электроном на такой орбите система напоминает водородоподобный атом [22]. Основные магнитные эффекты для ридберговских орбит с большим квантовым числом n связаны с квадратичным членом $\hat{H}^{(2)}$, поскольку площадь кулоновской орбиты, важная для диамагнетизма, растёт $\propto r^2 \propto n^4$. Используя ларморовскую частоту Ω_L , (9.45), мы можем пренебречь членами, линейными по магнитному полю, и прийти к приближенному гамильтониану

$$\hat{H} \approx \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \frac{1}{2}m\Omega_L^2 r^2 \sin^2 \theta, \quad (9.66)$$

где мы снова предполагаем однородное магнитное поле $\mathcal{B} = \mathcal{B}_z$. Это поле можно рассматривать как *действительно сильное* (не «сильное» по сравнению с расщеплением тонкой структуры в смысле гл. 24.10, но сравнимое с электростатическим притяжением), когда диамагнитный и кулоновский члены в уравнении (9.66) одного порядка. В этом случае мы имеем $\mathcal{B}^2 r^2 / mc^2 \sim 1/r$. Это условие может быть также выражено при помощи сравнения типичных пространственных масштабов, площади орбиты, $\sim r^2 \sim n^4 a^2$, где $a = \hbar^2 / me^2$ есть обычный боровский радиус, и размера, $\sim R^2$, ларморовского движения (13.60), который уменьшается как $R \propto 1/\sqrt{\mathcal{B}}$:

$$\frac{r^2}{R^2} \sim \frac{n^4 a^2}{R^2} \equiv n^4 \frac{\mathcal{B}}{\mathcal{B}_0}. \quad (9.67)$$

Здесь введена критическая величина поля,

$$\mathcal{B}_0 = \frac{m^2 c e^3}{\hbar^3} = 2,35 \cdot 10^9, \quad (9.68)$$

Кулоновский и диамагнитный члены становятся одного порядка величины для поля порядка Тесла (10^4 Гс) и $n \approx 50 \div 100$. Такие поля можно изучать в лабораторных условиях.

Из-за конфликта симметрий, обусловленного одновременным наличием сферически-симметричного кулоновского притяжения и сильного магнитного поля, классическое движение на таких ридберговских орбитах становится *хаотичным* [22]. Эксперименты по фотопоглощению ридберговскими атомами [23] возле порога ионизации в поле $B \sim 6$ Т привели к открытию так называемых *квази-Ландау резонансов*, с шагом по энергии, близким к $(3/2)\hbar\Omega_c$, в отличие от стандартных резонансов $\hbar\Omega_c$ для переходов с циклотронной частотой Ω_c между уровнями Ландау, хорошо известными при малых полях.

Задача 9.9

Объясните это открытие с помощью квазиклассических оценок для движения электрона в экваториальной плоскости, которое определяется гамильтонианом (9.66) при E , близком к нулю.

Решение Мы можем поступить аналогично тому, как было сделано в начале курса, гл. 1.7. Как и в (1.60), энергия перехода между сильно возбужденными квазиклассическими уровнями равна кванту классической частоты радиальных колебаний,

$$\hbar\omega = \frac{2\pi\hbar}{T}, \quad T = 2 \int_a^b \frac{dr}{v(r)}, \quad (9.69)$$

где скорость движения вблизи порога ионизации, $E \approx 0$, между радиальными точками поворота a и b равна

$$v(r) = \sqrt{\frac{2}{m} \left(\frac{e^2}{r} - \frac{1}{2} m\Omega_L^2 r^2 \right)}. \quad (9.70)$$

Интеграл (9.69) может быть вычислен с помощью замены переменных $r = \xi(2e^2/m\Omega_L^2)^{1/3}$ и $\eta = \xi^{3/2}$,

$$T = \frac{2}{\Omega_L} \int_0^1 \frac{d\xi \sqrt{\xi}}{\sqrt{1-\xi^3}} = \frac{4}{3\Omega_L} \int_0^1 \frac{d\eta}{\sqrt{1-\eta^2}} = \frac{2\pi}{3\Omega_L}. \quad (9.71)$$

Частота (9.69), которая определяет расстояние между резонансами, сейчас равна $3\Omega_L = (3/2)\Omega_c$.

При величине магнитного поля, превышающего B_0 , (9.68), мы попадаем в область физики *сверхсильных магнитных полей*, когда электронный диамагнитный эффект становится больше характерной кулоновской энергии.

Конечно, мы должны отказаться от рассмотрения магнитного поля как слабого возмущения к нормальной атомной структуре. Напротив, магнитное поле становится главной динамической силой. Имея малый циклотронный радиус R , движение в плоскости, поперечной к магнитному полю, сильно ограничено, в противоположность движению вдоль поля. Атомы становятся сильно деформированными в направлении поля, приобретают цилиндрическую или «иглообразную» форму.

Простое представление об этом экзотическом состоянии вещества можно получить из оценки для атома водорода. Волновая функция основного состояния электрона в кулоновском поле и сильном магнитном поле \mathcal{B}_z будет иметь размер Z вдоль поля больше, чем поперечный размер R , (13.60). Кинетическая энергия продольного движения составляет порядка \hbar^2/mZ^2 . Кулоновский потенциал $e^2/r = e^2/\sqrt{\rho^2 + z^2}$ должен быть усреднён по быстрому циклотронному вращению с поперечным размером орбиты $\rho \sim R$. Поперечная волновая функция $\psi(\rho)$ должна быть нормирована в пределах $\rho \sim R$, что означает, что $\psi \sim (1/\rho)$. Тогда усреднение кулоновского потенциала по циклотронному движению даёт величину порядка $(e^2/Z) \ln(Z/R)$. Минимизация выражения

$$E \sim \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{Z^2} - \frac{e^2}{Z} \ln \left(\frac{Z}{R} \right), \quad (9.72)$$

где мы предполагаем, что $\ln(Z/R) \gg 1$, даёт оценку ($a = \hbar^2/me^2$), $(a/R)^2 \sim (\mathcal{B}/\mathcal{B}_0)$

$$Z \sim \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{1}{\ln(a/R)^2} \sim \frac{a}{\ln(\mathcal{B}/\mathcal{B}_0)}, \quad (9.73)$$

где использовано определение критического поля (9.68). Энергия связи основного состояния растёт $\propto \ln^2(\mathcal{B}/\mathcal{B}_0)$. Более аккуратное рассмотрение можно найти в обширной литературе, например, в «мини-обзоре» [24].

Магнитные поля $\mathcal{B} \gg \mathcal{B}_0$ не могут быть созданы в лаборатории. Однако соответствующие эффекты магнитного поля могут существенно усиливаться в конденсированных средах, не только из-за аномально малой эффективной массы носителей заряда, но и благодаря высокой диэлектрической проницаемости, которая ослабляет кулоновское поле. Однако наиболее важную мотивацию для изучения поведения вещества в крайне сильных магнитных полях даёт *астрофизика*. Как стало известно из исследований нейтронных звёзд, многие из них имеют на своей поверхности магнитное поле гораздо более сильное, чем наше критическое поле \mathcal{B}_0 , достигая 10^{14-15}

Гс. Сильные магнитные поля влияют на все свойства различных астрономических объектов, включая их уравнение состояния, излучение, скорость охлаждения и другие приводящие к равновесию процессы. Ядерные реакции могут изменять свои скорости, известные из земных экспериментов (например, скорость бета-распада может быть другой, так как вылетающие электроны или позитроны имеют совершенно иную плотность уровней в сильном магнитном поле). Гидродинамические свойства также меняются, равно как и наличие или отсутствие сверхтекучести.

Литература

- [1] Holstein T., Primakoff H. // Phys. Rev. — 1940. — Vol. 58. — P. 1098.
- [2] Dyson F. // Phys. Rev. — 1956. — Vol. 102. — P. 1217.
- [3] Ландау Л., Лифшиц Е. Теория поля. — 8 изд. — М. : Физматлит, 2012. — Т. 2. — С. 536. — ISBN: 5-9221-0056-4.
- [4] Edmonds A. Angular Momentum in Quantum Mechanics. — Princeton University Press, 1974.
- [5] Biedenharn L., Louck J. Angular Momentum in Quantum Physics. — Reading : Addison-Wesley, 1981. — Vol. 8 of Encyclopedia of Mathematics and its Applications.
- [6] Rose M. Elementary Theory of Angular Momentum. — Mineola : Dover, 1995.
- [7] Ландау Л., Лифшиц Е. Механика. — 5 изд. — М. : Физматлит, 2012. — Т. 1. — С. 224. — ISBN: 978-5-9221-0819-5.
- [8] Infeld L., Hull T. // Rev. Mod. Phys. — 1951. — Vol. 23. — P. 21.
- [9] Baz A., Zeldovich I., Perelomov A. Scattering, Reactions and Decay in Nonrelativistic Quantum Mechanics. — Jerusalem : Israel Program for Scientific Translations, 1969.
- [10] Reimann S., Manninen M. // Rev. Mod. Phys. — 2002. — Vol. 74. — P. 1283.
- [11] Hanneke D., Fogwell S., Gabrielse G. // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 100. — P. 120801.

- [12] Ландау Л., Лифшиц Е. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — 6 изд. — М. : Физматлит, 2004. — Т. 3. — С. 800. — ISBN: 5-9221-0530-2.
- [13] Schwinger J. Quantum Mechanics: Symbolism of Atomic Measurements. — Springer, 2001.
- [14] Gutzwiller M. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. — N.Y. : Springer, 1990.
- [15] V. Zelevinsky, B.A. Brown, N. Frazier, M. Horoi // Phys. Rep. — 1996. — Vol. 276. — P. 85.
- [16] Judd B. Angular momentum Theory for Diatomic Molecules. — N.Y. : Academic Press, 1975.
- [17] Eisenschitz E., London F. // Z. Phys. — 1930. — Vol. 60. — P. 491.
- [18] Берестецкий В., Лифшиц Е., Питаевский Л. Квантовая электродинамика. — 4 изд. — М. : Физматлит, 2002. — Т. 4. — С. 720. — ISBN: 5-9221-0058-0. — Курс Ландау-Лифшица.
- [19] Nielsen M., Chuang I. Quantum Computation and Quantum Information. — Cambridge University Press, 2000.
- [20] Bennett S., Roberts J., Wieman C. E. // Science. — 1997. — Vol. 275. — P. 1759.
- [21] Itzykson C., Zuber J.-B. Quantum Field Theory. — N.Y. : McGraw-Hill, 1980.
- [22] Friedrich H., Wintgen D. // Phys. Rep. — 1989. — Vol. 183. — P. 39.
- [23] Garston W., Tomkins F. // Astrophys. J. — 1969. — Vol. 158. — P. 839.
- [24] Khriplovich I., Ruban G. // Laser Physics. — 2004. — Vol. 14. — P. 426.

[illegible]