Л Е К Ц И Я 11

МАТРИЦЫ ОПЕРАТОРОВ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА

Мы хотим найти матрицы спиновых операторов $\hat{S}_k$ в явном виде. Для этого решим сначала более общую задачу - найдем матрицы операторов момента $\hat{J}_k$ и $\hat{\mathbf{J}}^2$, которые удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{J}_1,\hat{J}_2]=i\hat{J}_3,\quad [\hat{J}_3,\hat{J}_1]=i\hat{J}_2,\quad [\hat{J}_2,\hat{J}_3]=i\hat{J}_1,\quad [\hat{J}_k,\hat{\mathbf{J}}^2]=\hat{0},\ (\text{пока } \hbar=1!).$$

Пользоваться будем только этими коммутационными соотношениями. Так как $\hat{\mathbf{J}}^2$ и $\hat{J}_3$ коммутируют, то можно искать их общие собственные векторы:

$$\hat{\mathbf{J}}^2|\hat{\mathbf{J}}^2,m\rangle = \mathbf{J}^2|\hat{\mathbf{J}}^2,m\rangle,\qquad \hat{J}_3|\hat{\mathbf{J}}^2,m\rangle = m|\hat{\mathbf{J}}^2,m\rangle.$$

Пусть $\mathbf{J}^2$ фиксировано. Это означает, что мы рассматриваем подпространство всех векторов состояний, в которых $\mathbf{J}^2$ имеет определенное значение, а m изменяется. Векторы $|\hat{\mathbf{J}}^2,m\rangle$ образуют в таком подпространстве базис. Ближайшая цель - найти матрицы операторов $\hat{J}_k$ в этом базисе, который называется каноническим, и который для краткости обозначим как $|m\rangle$.

Для ее решения удобно ввести операторы

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\hat{J}_2,\qquad \hat{J}_- = \hat{J}^+_+ = \hat{J}_1 - i\hat{J}_2,$$

которые, как легко показать прямой проверкой, удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{J}_+,\hat{J}_-] = 2\hat{J}_3,\ [\hat{J}_-,\hat{J}_3] = \hat{J}_-,\qquad [\hat{J}_3,\hat{J}_+] = \hat{J}_+.$$

Покажем, что

$$\hat{J}_+|m\rangle = \alpha_m|m+1\rangle,\qquad \hat{J}_-|m\rangle = \beta_m|m-1\rangle,$$

где α_m и β_m - некоторые числа, которые без ограничения общности можно считать вещественными. Имеем, используя коммутационное соотношение,

$$\hat{J}_3(\hat{J}_-|m\rangle) = (\hat{J}_-\hat{J}_0-\hat{J}_-)|m\rangle = (\hat{J}_-m-\hat{J}_-)|m\rangle = (m-1)(\hat{J}_-|m\rangle),$$

и аналогично

$$\hat{J}_3(\hat{J}_+|m\rangle) = (m+1)(\hat{J}_+|m\rangle).$$

Таким образом, $\hat{J}_-|m\rangle$ и $\hat{J}_+|m\rangle$ - собственные векторы оператора с собственными значениями m-1 и m+1 соответственно, что фактически и утверждалось.

Теперь задача отыскания матриц операторов $\hat{J}_k$ свелась фактически к нахождению чисел α_m и β_m и спектра оператора $\hat{J}_3$. Учитывая, что базисные векторы предполагаются нормированными, имеем:

$$\langle m|\hat{J}^+_+|m+1\rangle = \alpha_m\langle m+1|m+1\rangle = \alpha_m = \langle m|\hat{J}_-|m+1\rangle = \beta_{m+1}\langle m|m\rangle = \beta_{m+1},$$

откуда вытекает соотношение между β_m и α_m:

$$\beta_{m+1} = \alpha_m.$$

Чтобы получить числа α_m , проделаем следующую выкладку:

$$\hat{J}_+|m-1\rangle = \alpha_{m-1}|m\rangle = \frac{1}{\beta_m}\hat{J}_+\hat{J}_-|m\rangle = \frac{1}{\beta_m}(\hat{J}_-\hat{J}_+ + 2\hat{J}_3)|m\rangle = \frac{1}{\beta_m}(\beta_{m+1}\alpha_m + 2m)|m\rangle,$$

или, с учетом предыдущего равенства,

$$\alpha^2_{m-1} - \alpha^2_m = 2m.$$

Получили рекуррентное соотношение для α_m. Введем обозначение

$$j = \max m,$$

и сложим все предыдущие равенства от $m = j$ до произвольного $m + 1$:

$$\alpha^2_m - \alpha^2_j = 2j + 2(j-1) + \ldots + 2(m+1) = j(j+1) - m(m+1).$$

Учтем теперь, что $\alpha_j = 0$, так j - это максимальное m,

$$\hat{J}_+|j\rangle = \alpha_j|j+1\rangle,$$

и если бы $\alpha_j \neq 0$, то мы получили бы еще большее m, равное j+1. Поэтому

$$\alpha^2_m = j(j+1) - m(m+1)$$

и

$$\beta^2_m = \alpha^2_{m-1} = j(j+1) - m(m-1).$$

Таким образом, операторы $\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$ и $\hat{J}_3$ действуют на базисные векторы $|m\rangle$ по закону

$$\hat{J}_+|m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,|m+1\rangle,$$

$$\hat{J}_-|m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,|m-1\rangle,$$

$$\hat{J}_3|m\rangle = m|m\rangle.$$

Действуя последовательными степенями $\hat{J}_-$ на $|j\rangle$, получим набор собственных векторов

$$|j\rangle, |j-1\rangle, |j-2\rangle, \ldots.$$

Последним в нем будет вектор $|-j\rangle$, так как из второй полученной формулы следует $\hat{J}_-|-j\rangle=0$. Таким образом, наименьшим собственным значением оператора $\hat{J}_3$ является число $-j$:

$$\min\{m\} = -j.$$

Так как при таком построении число m на каждом этапе уменьшается на 1, то разность j-(-j)=2j должна быть целым числом, откуда j - целое или полуцелое число. Размерность подпространства с фиксированным значением j равна 2j+1 (именно столько векторов $|m\rangle$ оно содержит), т.е. она определяется максимальным собственным значением оператора $\hat{J}_3$.

Докажем теперь, что каждый из векторов $|m\rangle$ действительно является собственным для оператора $\hat{\mathbf{J}}^2$ (ведь мы его так обозначили лишь для краткости, а на самом деле это $|\hat{\mathbf{J}}^2, m\rangle$), и найдем соответствующее собственное значение (оно должно быть единым, ибо $\hat{\mathbf{J}}^2$ - фиксировано). Для этого перепишем $\hat{\mathbf{J}}^2$ в виде

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}^2{}_1 + \hat{J}^2{}_2 + \hat{J}^2{}_3 = \hat{J}_+\hat{J}_- - \hat{J}_3 + \hat{J}_3.$$

Действуем этим оператором на произвольный базисный орт:

$$\hat{\mathbf{J}}^2|m\rangle = (\hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_3 + \hat{J}^2{}_3)|m\rangle = (\alpha_{m-1}\beta_m - m + m^2)\,|m\rangle = (\beta^2{}_m - m + m^2)\,|m\rangle.$$

Подставляя сюда найденное ранее $\beta^2{}_m$, получим

$$\hat{\mathbf{J}}^2|m\rangle = j(j+1)|m\rangle.$$

Таким образом, все $|m\rangle$ действительно собственные векторы для $\hat{\mathbf{J}}^2$, причем они обладают одним и тем же собственным значением, как это и должно быть. Это собственное значение равно $j(j+1)$.

Подведем предварительные итоги. По отношению к действию оператора квадрата момента $\hat{\mathbf{J}}^2$ все пространство разбивается на подпространства, в которых он кратен единичному оператору:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = j(j+1)\hat{I}.$$

Размерность каждого подпространства равна $2j+1$, где j - произвольное (но фиксированное для подпространства) целое или полуцелое число. Канонический базис в каждом подпространстве образует собственные векторы оператора $\hat{J}_3$, собственные значения которого меняются через 1 в пределах

$$-j \le m \le j.$$

Эти собственные векторы будем обозначать как $|jm\rangle$, куда входит и индекс подпространства j и индекс базисного орта m. Для них

$$\hat{\mathbf{J}}^2|jm\rangle = j(j+1)\,|jm\rangle, \qquad \hat{J}_3|jm\rangle = m|jm\rangle.$$

Произвольный вектор $|\psi\rangle$ гильбертова пространства состояний можно разложить по всем таким базисным ортам:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{m=-j}^{j} C_{jm}|jm\rangle.$$

Найдем теперь матрицы операторов момента в построенном базисе. Умножая формулы

$$\hat{J}_+|m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,|m+1\rangle,$$

$$\hat{J}_-|m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,|m-1\rangle,$$

$$\hat{J}_3|m\rangle = m|m\rangle.$$

слева на $\langle n|$ и, учитывая ортонормированность базиса,

$$\langle n|\, m\rangle = \delta_{nm},$$

получим

$$\langle n|\,\hat{J}_+^{(j)}|m\rangle \equiv (J_+^{(j)})_{nm} = \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\delta_{n,m+1}$$

$$\langle n|\,\hat{J}_-^{(j)}\,|\,m\rangle \equiv (J_-^{(j)})_{nm} = \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\delta_{n,m-1}$$

$$\langle n|\,\hat{J}_3^{(j)}\,|\,m\rangle \equiv (J_3^{(j)})_{nm} = m\delta_{n,m}.$$

Имея в виду, что

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{2}(\hat{J}_- + \hat{J}_+), \qquad \hat{J}_2 = \frac{i}{2}(\hat{J}_- + \hat{J}_+)$$

и восстанавливая теперь $\hbar$, которое мы раньше для простоты записи положили равным 1, придем к следующему окончательному результату:

$$(J_1^{(j)})_{nm} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\delta_{n,m+1} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\delta_{n,m-1}$$

$$(J_2^{(j)})_{nm} = -i\,\frac{\hbar}{2}\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\delta_{n,m+1} + i\,\frac{\hbar}{2}\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\delta_{n,m-1}$$

$$(J_3^{(j)})_{nm} = \hbar\, m\,\delta_{n,m}$$

$$(\boldsymbol{J}^{2(j)})_{nm} = \hbar^2 j(j+1)\,\delta_{n,m}.$$

Здесь перечислены все возможные матрицы операторов момента, которые будут получаться, когда j пробегает значения 0, 1/2, 1, 3/2,.... Когда мы рассматривали орбитальный момент, то для него получили только целые значения j , которые обозначились как l. Но оказывается, что полуцелые значения также имеют глубокий смысл - они соответствуют спиновому моменту (разумеется, у некоторых частиц спин может быть и целым, но его природа совсем другая, чем природа орбитального момента).

Ввиду важности для дальнейшего, выпишем матрицы операторов момента для случая j = 1/2, когда m принимает значения m = +1/2 и m= -1/2. Делается это так:

$$(J_1)_{11} \equiv (J_1)_{+1/2,\,+1/2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\ldots}\,\delta_{1/2,3/2} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\ldots}\,\delta_{1/2,-1/2} = 0.$$

$$(J_1)_{12} \equiv (J_1)_{+1/2,-1/2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\ldots}\,\delta_{+1/2,+1/2} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\ldots}\,\delta_{+1/2,-3/2} =$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{1}{2}(1+\frac{1}{2}) - (-\frac{1}{2})(-\frac{1}{2}+1)} = \frac{\hbar}{2}.$$

В итоге получим

$$J_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad J_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \quad J_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{J}^2 = 3/4\ \hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

Если ввести *матрицы Паули*

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

то можно будет записать

$$J_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k, \ \mathbf{J}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\boldsymbol{\sigma}^2.$$

СПИН

До сих пор мы считали, что всякая квантовая частица имеет три степени свободы. Это подразумевало, что полный набор включает три наблюдаемых - например, x,y,z. Это, в свою очередь, и позволяло описывать состояния частицы в координатном представлении одной волновой функцией

$$\psi = \psi(x,y,z) \equiv \psi(\mathbf{r}).$$

Но постепенно выяснилось, что у микрочастиц число степеней свободы больше трех. Об этом свидетельствовали: (а) опыты Штерна-Герлаха, (б) дублетная структура спектров у щелочных металлов - например, наличие в спектре натрия яркого желтого дублета, (в) аномальный эффект Зеемана - расщепление не на три линии, а на большее количество. После долгих мучений В. Паули ввел представление о «характерной двузначности» электрона, т.е. об удвоении числа его состояний. Но было неясно, что же это такое на самом деле. В 1925 г. Гаудсмит и Улэнбек предположили, что у электрона есть собственный (а не только) орбитальный момент импульса - спин, равный 1/2. Вскоре Паули построил соответствующий математический аппарат. Не нужно думать, что спин связан с каким-то вращением электрона - эта модель сразу приводит к противоречиям: например, скорость на «экваторе» электрона должна быть больше скорости света. Спин есть специфическая квантовомеханическая величина, не имеющая никаких классических аналогов и только по своим формальным свойствам совпадающий с некоторым моментом импульса. Важно сознавать также, что орбитальный момент - характеристика состояния частицы (грубо говоря, определяется ее движением), а спин не зависит от состояния. Это есть ее *внутренняя, врожденная характеристика*, подобная массе или электрическому заряду.

Разовьем общий спиновый формализм. Итак, записываем теперь волновую функцию как

$$\psi = \psi(\mathbf{r},\sigma),$$

где σ - новая, спиновая переменная. На нее действуют спиновые операторы

$$\hat{S}_1, \ \hat{S}_2, \ \hat{S}_3 \quad \text{и} \quad \hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_1^{\,2} + \hat{S}_2^{\,2} + \hat{S}_3^{\,2}.$$

В конце прошлой лекции мы видели, что они должны удовлетворять тем же коммутационным соотношениям, что и операторы момента:

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\,\varepsilon_{jkl}\,\hat{S}_l; \quad [\hat{S}_j, \hat{\mathbf{S}}^2] = \hat{0}.$$

Поскольку спин - внутренняя характеристика частицы (а не характеристика состояния), то волновую функцию ее нужно снабдить соответствующим индексом, записывая

$$\psi = \psi_S(\mathbf{r}, \tilde{\sigma}).$$

Эта функция должна быть собственной для оператора $\hat{\mathbf{S}}^2$(значение спина раз и навсегда фиксировано):

$$\hat{\mathbf{S}}^2\psi_S(\mathbf{r},\tilde{\sigma}) = \hbar^2 s(s+1)\,\psi_S(\mathbf{r},\tilde{\sigma}),$$

где S - полуцелое или целое число (значение его определяется типом частицы). В качестве базисных элементов в пространстве спиновых переменных можно выбрать собственные векторы оператора $\hat{S}_3$ - проекции спина (тем самым, эта наблюдаемая наряду с координатами включается в полный набор):

$$\hat{S}_3\psi_{S\sigma}(\mathbf{r},\tilde{\sigma}) = \hbar\,\tilde{\sigma}\;\psi_{S\sigma}(\mathbf{r},\tilde{\sigma})$$

Значения $\tilde{\sigma}$ меняются через 1 в интервале

$$-s \le \tilde{\sigma} \le s,$$

и всего имеется $2\tilde{\sigma}+1$ спиновых независимых состояний.

Волновую функцию любого состояния частицы со спином будем записывать в виде матрицы-столбца из $2s+1$ строк:

$$\psi_S(\mathbf{r},\tilde{\sigma}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \\ \ldots\ldots \\ \psi_{2s+1}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Если спиновые и пространственные переменные независимы (отсутствует так называемое спин-орбитальное взаимодействие, ответственное за тонкую структуру спектров), то координатная зависимость у волновой функции будет единой, и ее можно вынести:

$$\psi_S(\mathbf{r},\tilde{\sigma}) = \psi(\mathbf{r})\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \ldots \\ \chi_{2s+1} \end{pmatrix} \equiv \psi(\mathbf{r})\chi_s$$

Матрица - столбец

$$\chi_s = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \ldots \\ \chi_{2s+1} \end{pmatrix}$$

называется спиновой волновой функцией. В общем случае условие нормировки волновой функции ψ_S записывается как

$$\sum_{i=1}^{2s+1}\int |\psi_i(\mathbf{r})|^2 dV = 1.$$

Смысл каждого слагаемого очевиден: это вероятность обнаружить частицу в данном спиновом состоянии. Если спиновые переменные и координаты расцепляются, то функция $\psi(\mathbf{r})$ нормируется обычным образом:

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = 1,$$

а спиновая волновая функция нормируется так:

$$\sum_{i=1}^{2s+1} |\chi_i|^2 = 1,$$

где смысл каждого слагаемого тот же. Это условие нормировки можно записать иначе:

$$(\chi,\chi) = \chi^+\chi = 1,$$

где χ^+ - матрица-строка, транспонированная к матрице-столбцу χ:

$$\chi^+ = (\chi_1^*, \chi_2^*, \ldots \chi_{2s+1}^*).$$

Спиновую волновую функцию можно записать в виде

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ . \\ . \\ . \\ \chi_{2s+1} \end{pmatrix} = \chi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ . \\ . \\ 0 \end{pmatrix} + \chi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ . \\ . \\ 0 \end{pmatrix} + \ldots + \chi_{2s+1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_1 e_1 + \ldots \chi_n e_n,$$

где столбики с одной единицей и остальными нулями имеют смысл базисных векторов в спиновом пространстве. Имея в виду, что

$$(S_3)_{nm} = m\delta_{nm}$$

(см. выше - в общей теории момента), то матрицей оператора $\hat{S}_3$ в каноническом базисе является

$$(S_3)_{nm} = \begin{pmatrix} S0 \quad 0\,0 \\ 0S-10\,0 \\ 00S-2\,0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ 00000-S \end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что каждый из базисных векторов является собственным вектором для этой матрицы, причем собственное значение для него определяется номером места, на котором стоит 1: у e_1 оно равно S, у e_2 - S-1,...у e_{2s+1} - равно -S. Поэтому целесообразнее ввести обозначения

$$\chi_S \equiv |\chi_S\rangle = \begin{pmatrix} \chi_{S,S} \\ \chi_{S,S-1} \\ \ldots. \\ \ldots. \\ \chi_{S,-S} \end{pmatrix} = \chi_{S,S} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ . \\ . \\ 0 \end{pmatrix} + \chi_{S,S-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ . \\ . \\ 0 \end{pmatrix} + \chi_{S,-S} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ 1 \end{pmatrix} \equiv$$

$$\equiv \chi_{S,S} |\chi_{S,S}\rangle + \chi_{S,S-1} |\chi_{S,S-1}\rangle + \ldots + \chi_{S,-S} |\chi_{S,-S}\rangle,$$

где $|\chi_{S,mS}\rangle$ - базисные векторы, описывающие состояния со спином S и его проекцией m_S, а $\chi_{S,mS}$ - числа, т.е. коэффициенты разложения спиновой функции $|\chi_S\rangle$ по базисным векторам.

Величина $|\chi_{S,mS}|^2$ есть вероятность обнаружить частицу в состоянии с проекцией спина, равной m_S . Базис является ортонормированным:

$$\langle\chi_{S,mS}\,|\chi_{S,m'S}\rangle = \delta_{ms,ms'}$$

и удовлетворяет условию полноты:

$$\sum_{m_s}\left|\chi_{s,m_s}\right\rangle\left\langle\chi_{s,m'_s}\right| = \hat{I}\ .$$

Все прочие операторы спина, как и $\hat{S}_3$, изображаются матрицами. Их вид был получен при рассмотрении общей теории момента:

$$(S_1)_{msms} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{S(S+1)-m_s(m_s+1)}\,\delta_{ms,m'S+1}+$$

$$+\frac{\hbar}{2}\sqrt{S(S+1)-m_s(m_s-1)}\,\delta_{m,m's-1}$$

$$(S_2)_{msms''} = -i\,\frac{\hbar}{2}\sqrt{S(S+1)-m_s(m_s+1)}\,\delta_{ms,m's+1}$$

$$+\,i\,\frac{\hbar}{2}\sqrt{S(S+1)-m_s(m_s-1)}\,\delta_{m,m's-1}$$

$$(S_3)_{msms'} = m_s\delta_{ms,m's},\ (\boldsymbol{S}^2)_{ms,m's} = \hbar^2 S(S+1)\,\delta_{ms,m's}.$$

В важнейшем частном случае спина S = 1/2 (электрон, протон, нейтрон и многие другие частицы) волновые функции являются столбцами из двух чисел, а спиновые операторы выражаются через матрицы Паули, как это было показано в самом конце общей теории. Отметим следующие свойства матриц Паули:

1. Они эрмитовы

$$\sigma_j^+ = \sigma_j$$

2. След каждой равен нулю

$$\mathrm{Sp}(\sigma_j) = 0,$$

3. Квадрат каждой матрицы Паули равен единичной матрице

$$\sigma_j^2 = \hat{I}\ ,$$

4. Разные матрицы Паули антикоммутируют

$$\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 0, \quad j \neq k,$$

5. Свойства 3 и 4 совместно записываются как

$$\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 2\delta_{jk}\,\hat{I}\ ,$$

6. Матрицы Паули удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\sigma_j,\sigma_k] = 2\varepsilon_{jkl}\sigma_l,$$

7. Произведение двух разных матриц Паули равно (с точностью до множителя) третьей

$$\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3, \quad \sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2, \quad \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1.$$

СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ

Пусть система состоит из двух частей, которым соответствуют полные моменты $\hat{\mathbf{J}}^{(1)}$ и $\hat{\mathbf{J}}^{(2)}$. Так как эти операторы действуют только на свои переменные, то они взаимно коммутируют:

$$[\hat{\mathbf{J}}^{(1)}, \hat{\mathbf{J}}^{(2)}] = \hat{0},$$

причем, между собой операторы каждой группы коммутируют обычным способом:

$$[\hat{J}_j^{(a)}, \hat{J}_k^{(a)}] = i\hbar\,\varepsilon_{jkl}\,\hat{J}_l^{(a)}, \qquad [\hat{\mathbf{J}}^{(a)2}, \hat{J}_j^{(a)}] = \hat{0}.$$

У полной системы имеются состояния с определенными значениями квадратов моментов $\mathbf{J}^{(1)2}$ и $\mathbf{J}^{(2)2}$ и их проекций на третью ось $J_3^{(1)}$ и $J_3^{(2)}$:

$$\mathbf{J}^{(1)2} = \hbar^2 j_1(j_1+1), \quad \mathbf{J}^{(2)2} = \hbar^2 j_2(j_2+1), \quad J_3^{(1)} = \hbar m_1, \quad J_3^{(2)} = \hbar m_2.$$

Эти состояния описываются векторами

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle,$$

являющимися собственными для каждого из операторов $\hat{\mathbf{J}}^{(1)2}$, $\hat{\mathbf{J}}^{(2)2}, \hat{J}_3^{(1)}$ и $\hat{J}_3^{(2)}$ с указанными собственными значениями. Эти векторы образуют базис в пространстве состояний полной системы, и по нему можно разложить произвольный вектор ее состояния:

$$|\psi\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2}\,|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \quad C_{m1} C_{m2} = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | \psi\rangle.$$

Введем оператор полного момента

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}^{(2)}.$$

Для него справедливы обычные коммутационные соотношения

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar\,\varepsilon_{jkl}\,\hat{J}_l, \; [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_j] = \hat{0}.$$

Каждый из введенных базисных векторов будет собственным для оператора

$$\hat{J}_3 = \hat{J}_3^{(1)} + \hat{J}_3^{(2)}$$

с собственным значением

$$J_3 = \hbar(m_1 + m_2) \equiv \hbar m.$$

Действительно,

$$\hat{J}_3 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \hat{J}_3^{(1)} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle + \hat{J}_3^{(2)} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \hbar m_1 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle + \hbar m_2 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle.$$

Оператор квадрата полного момента

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{J}}^{(1)2} + \hat{\mathbf{J}}^{(2)2} + 2\hat{\mathbf{J}}^{(1)}\,\hat{\mathbf{J}}^{(2)}$$

коммутирует с операторами $\hat{\mathbf{J}}^{(1)2}$ и $\hat{\mathbf{J}}^{(2)2}$, а потому он может иметь определенное значение $\boldsymbol{J}^2$ вместе с квадратами моментов каждой из подсистем. Однако, старые векторы не будут

собственными для этого оператора из-за наличия в нем третьего слагаемого, которое будет перемешивать состояния с разными m.
Но можно всегда построить новый базис из векторов

$$|j_1 j_2 jm\rangle,$$

которые являются собственными для $\hat{\mathbf{J}}^2$ и $\hat{J}_3$:

$$\hat{\mathbf{J}}^2|j_1 j_2 jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)\,|j_1 j_2 jm\rangle, \quad \hat{J}_3|j_1 j_2 jm\rangle = \hbar m|j_1 j_2 jm\rangle,$$

т.е. описывают состояния с определенными j_1, j_2 (это всегда), а также с определенными j и m. Как уже говорилось, любые векторы, а значит и эти, можно разложить по старому базису:

$$|j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2}\,|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle,\ C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2}\,\langle j_1 m_1 j_2 m_2|j_1 j_2 jm\rangle.$$

Возникающие здесь важные числа $C^{\cdots}_{\cdots}$ называются *коэффициентами Клебша-Гордона*, причем фазовые множители у новых базисных векторов всегда можно выбрать так, чтобы эти коэффициенты были вещественными. Для них имеются общие формулы, но они очень сложны. Поэтому существуют специальные таблицы коэффициентов Клебша-Гордона (ККГ).

ККГ задают матрицу преобразования от представления, в котором заданы проекции моментов подсистем (и их моменты) к представлению, в котором задан полный момент и его проекция (и моменты подсистем). Эта матрица осуществляет переход от одного ортонормированного базиса к другому, а потому она унитарна:

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2|jm\rangle\langle j_1 m_1 j_2 m_2|jm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

или

$$\sum_{jm} \langle j_1 m_1 j_2 m_2|jm\rangle\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|jm\rangle = \delta_{m1m'1}\delta_{m2m'2}.$$

Обратный переход осуществляется обратной матрицей, которая в силу унитарности, равна эрмитово сопряженной матрице, а в силу вещественности - просто транспонированной к исходной матрице:

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum \tilde{C}^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2}\,|j_1 j_2 jm\rangle, \tilde{C}^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = \langle j_1 j_2 jm|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle.$$

Мы уже установили, что каждый старый вектор $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ является собственным для оператора $\hat{J}_3$ с собственным значением

$$J_3 = \hbar(m_1+m_2).$$

Поэтому

$$m = m_1+m_2$$

и суммирование в разложении ККГ по одному из индексов носит формальный характер. Так как $m_2=m-m_1$, то при заданном m суммирование можно вести только по m_1. Это отвечает тому, что

$$C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} \sim \delta_{m,m1+m2}.$$

Важная задача - определение возможных значений j при заданных j_1 и j_2. Для ее решения исследуем возможные значения m. Его максимальное значение есть $m=j_1+j_2$. Оно осуществляется в одном единственном состоянии $|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2\rangle$, которое будет иметь

$$j = j_1 + j_2.$$

Следующее значение $m=j_1+j_2-1$ может осуществляться двумя линейными комбинациями векторов

$$|j_1 j_1-1\rangle|j_2 j_2\rangle \quad \text{и} \quad |j_1 j_1\rangle|j_2 j_2-1\rangle.$$

Одна из них отвечает уже найденному моменту $j=j_1+j_2$ (вектор торчит несколько «вбок»), а другая - значению

$$j = j_1 + j_2 - 1$$

(вектор направлен по оси). Значению $m=j_1+j_2-2$ будут отвечать три линейные комбинации из трех векторов

$$|j_1 j_1-2\rangle|j_2 j_2\rangle,\ |j_1 j_1-1\rangle|j_2 j_2-1\rangle,\ |j_1 j_1\rangle|j_2 j_2-2\rangle.$$

Одна отвечает значению $j=j_1+j_2$ (еще больше вбок), другая - значению $j=j_1+j_2-1$ (немножко вбок) и третья - значению

$$j = j_1 + j_2 - 2$$

(вдоль оси). Продолжая процесс, убедимся, что на каждом этапе, когда m уменьшается на 1, появляется новое значение j до тех пор, пока не дойдем до значений, при которых либо $m_1=-j_1$, либо $m_2=-j_2$. Таким образом, минимальное значение есть

$$j = (j_1 - j_2).$$

Итак, получаем следующее *правило сложения моментов импульса*: при заданных значениях j_1 и j_2 квантовое число j может пробегать множество значений через 1 из интервала

$$|j_1-j_2| \le j \le j_1 + j_2.$$

Каждому j отвечает $2j+1$ состояний, а потому всего их будет

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

(сумма арифметической прогрессии). Это совпадает с числом «старых» состояний $|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$, которое очевидным образом равно $(2j_1+1)(2j_2+1)$. Конечно, так и должно быть, и совпадение подтверждает правильность найденного правила сложения моментов. Полученные неравенства допускают простую геометрическую интерпретацию - как неравенства для сторон треугольника. Поэтому их называют соотношением треугольника и кратко записывают как $\Delta(j\ j_1\ j_2)$. Числа j, j_1, j_2 входят в соотношение треугольника симметрично. Если они не выполняются, то ККГ автоматически обращаются в нуль.

В качестве операторов $\hat{\mathbf{J}}^{(1)}$ и $\hat{\mathbf{J}}^{(2)}$ можно рассматривать операторы орбитального момента $\hat{\mathbf{L}}$ и спинового момента $\hat{\mathbf{S}}$- ведь важно лишь то, что разные операторы коммутируют друг с другом, а для $\hat{\mathbf{L}}$ и $\hat{\mathbf{S}}$ это так. В частности, очень важен случай S = 1/2 (электрон). Если $l \neq 0$, то полный момент j может принимать два значения:

$$l+1/2 \ \text{ и } \ l-1/2.$$

Но в *S*- состоянии, когда $l = 0$, полный момент равен 1/2, и только. Таким образом, получаем следующие возможные состояния электрона:

$$s_{1/2};\ p_{1/2};\ p_{3/2};\ d_{3/2};\ d_{5/2};...$$

Всего таких состояний имеется:

s-2, p-2+4 = 6, d-4+6=10,...

Число же низших состояний таково:

s-2, s, p-8, s, p, d-18,...

Очень похоже на числа заполнения в таблице Менделеева, и недаром. Ведь в атоме при n=2 есть s- и p- состояния, откуда - 8, при n= 3 есть s-, p- и d- состояния, откуда - 18, т.д.

При сложении орбитального момента электрона с его спином полезно знать соответствующие разложения. Поэтому приведем таблицу ККГ:

	$m_s = +1/2$	$m_s = -1/2$
$j = l + 1/2$	$\sqrt{\dfrac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$	$\sqrt{\dfrac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$
$j = l - 1/2$	$-\sqrt{\dfrac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$	$\sqrt{\dfrac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$

Запишем также для справок волновые функции электрона в центральном поле, где сохраняются $\hat{L}$ и $\hat{S}$:

$$s = 1/2,\ m_s = +1/2, -1/2,$$

$$l,\ m_l = m - m_s$$

Разложение волновой функции состояния с определенными значениями энергии, орбитального момента l (спина s), полного момента j и его проекции m по состояниям с определенными значениями E, l, m_l, s, m_s имеет вид

$$\psi_{Elsjm}(\mathbf{r},\sigma) = \sum C^{jm}_{l,m-m_s,\frac{1}{2},m_s} f_{Ejl}(r) Y_{l,m_l}(\theta,\varphi)\chi_{s,m_s}(\sigma),$$

где σ - спиновая переменная, а χ_{s,m_s} - спиновые функции. Разложение можно записать короче:

$$\psi_{Elsjm}(\mathbf{r},\sigma) = \sum f_{Ejl}(r)\phi_{l\frac{1}{2}jm}(\theta,\varphi,\sigma)$$

где ϕ - сферические функции со спином (шаровые функции):

$$\phi_{l,\frac{1}{2},j=l+\frac{1}{2},m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}}\, Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\dfrac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}}\, Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix};$$

$$\phi_{l,\frac{1}{2},j=l-\frac{1}{2},m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}}\,Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ -\sqrt{\dfrac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}}\,Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}.$$