

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ

ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ М. В. ЛОМОНОСОВА**

Физический факультет  
Кафедра общей ядерной физики

Научно-исследовательский институт ядерной физики  
имени Д. В. Скобельцына

Е. В. Грызлова, М. М. Попова, С. В. Сидоров,  
М. С. Хирк, А. Н. Грум-Гржимайло, Д. Е. Ланской

## **ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПРАКТИКУМ**

Пособие по курсу  
Теоретическая субмолекулярная физика: алгебра углового  
момента в атомной и ядерной физике

для студентов старших курсов физического факультета  
МГУ имени М. В. Ломоносова

Москва 2024

УДК 539.1.01

БИК 22.314

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПРАКТИКУМ

Пособие по курсу

Теоретическая субмолекулярная физика: алгебра углового  
момента в атомной и ядерной физике

Е. В. Грызлова, М. М. Попова, С. В. Сидоров,  
М. С. Хирк, А. Н. Грум-Гржимайло, Д. Е. Ланской

Учебное пособие предназначено для студентов IV курса отделения ядерной физики физического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова, изучающих дисциплину “Теоретический практикум”. Пособие содержит краткое изложение теоретического материала и большое количество задач, позволяющих выработать у обучающихся практические навыки применения техники квантовомеханических выкладок в задачах ядерной и атомной физики, а также в смежных областях. Многие задачи снабжены ответами и решениями. Пособие включает следующие главы: коммутационные соотношения и матричные элементы оператора углового момента; коэффициенты Клебша—Гордана; углы Эйлера;  $D$ -функции Вигнера;  $6j$ -символы;  $9j$ -символы; неприводимые тензорные операторы и теорема Вигнера-Экарта; электромагнитное поле.

Пособие может использоваться студентами физических специальностей, изучающими квантовую механику, для углубленного освоения методов квантовой теории углового момента.

© Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2024 г.

© Научно-исследовательский институт ядерной физики  
имени Д.В. Скобельцына, 2024 г.



## Содержание

Предисловие	5
Глава 1 Коммутационные соотношения и матричные элементы оператора углового момента	8
Глава 2 Коэффициенты Клебша—Гордана	16
Таблица коэффициентов Клебша—Гордана	25
Глава 3 Углы Эйлера	26
Глава 4 $D$ -функции Вигнера	32
Таблица $D$ -функций	42
Глава 5 $6j$ -символы	43
Глава 6 $9j$ -символы	51
Глава 7 Неприводимые тензорные операторы и теорема Вигнера- Эккарта	55
Глава 8 Поляризованное электромагнитное поле	63
Тесты	73

## Предисловие

Теоретический практикум стал частью образования студентов отделения ядерной физики физического факультета МГУ в 60-е годы по инициативе В. В. Балашова, тогда — профессора кафедры теоретической ядерной физики. Словосочетание “теоретический практикум” звучало парадоксально, т. к. понятие “практикум” ассоциировалось только с лабораторными работами и выполнением учебных экспериментов. Идея В. В. Балашова и состояла в том, что, как экспериментатору требуется получить навыки работы с аппаратурой, так и теоретик нуждается в практическом овладении квантовомеханическим аппаратом для проведения теоретических выкладок. Теоретический практикум ставит целью научить начинающего исследователя рабочей, во многом технической, стороне дела, которая почти в каждой научной задаче не кажется главной, но в силу трудоемкости и необходимости многочисленных самопроверок занимает больше всего времени.

При разработке теорпрактикума сформировалось его основное направление: квантовая теория углового момента и смежные вопросы (сложение угловых моментов, повороты системы координат, тензорные операторы, описание корреляционных и поляризационных явлений). Позднее в ходе развития теорпрактикума в него были включены и многие другие темы, в том числе задачи, требующие не только теоретических выкладок, но и компьютерных расчетов. Однако ядром теорпрактикума осталась тематика, связанная с квантовой теорией углового момента (в просторечии эта часть называлась “клебши”).

В 1971 году в НИИЯФ МГУ была создана лаборатория теоретического практикума под руководством В. В. Балашова, которая обеспечивала разработку теорпрактикума и проведение соответствующих занятий (а также некоторых других занятий на отделении ядерной физики). Обычно подготовку по основной тематике теорпрактикума проходили студенты-теоретики нескольких кафедр (прежде всего, кафедр физики атомного ядра, ядерных взаимодействий и ускорителей, космических лучей, атомной физики) в седьмом и восьмом семестрах. Ежедневные шестичасовые занятия проходили в течение половины каждого семестра вместо части экспериментального практикума. Занятия в такой группе, составлявшей обычно 10–12 человек, вели два преподавателя. Это обеспечивало хорошую возможность индивидуальной работы с каждым студентом, что является необходимым для данного рода занятий.

По мере развития теорпрактикума оказалось, что многие задачи полезны не

только для студентов теоретической специализации. Несмотря на, казалось бы, технический характер большинства заданий, их выполнение углубляет понимание свойств квантовых систем и закономерностей, действующих в физике микромира.

Развитие теорпрактикума произошло трудами многих сотрудников отделения ядерной физики и НИИЯФ. Не пытаясь перечислить их всех, хотим помянуть благодарным словом стоявших у истоков теорпрактикума: Г. Я. Коренмана, Ю. Ф. Смирнова, Н. П. Юдина.

Теорпрактикум внедрялся в учебный процесс ряда советских и зарубежных университетов.

В 90-е годы большие изменения происходили в жизни НИИЯФ, физфака и во внешней среде. Теорпрактикум тогда прекратил существование, лишь отдельные научные руководители использовали его для индивидуальной подготовки студентов.

Вернулся теорпрактикум в 2023 году, став частью учебного плана для студентов кафедры общей ядерной физики (независимо от специализации). Занятия проходят в седьмом семестре. Это – оптимальное время для теорпрактикума, т.к. в шестом и седьмом семестрах студенты изучают курс квантовой механики. После этого они в состоянии приступить к углубленной научной работе, и навыки, полученные в теорпрактикуме, ускоряют и облегчают такой старт.

Теперь занятия организованы следующим образом. В начале семестра студенты слушают лекции (4 часа в неделю), служащие мостом между общим курсом квантовой механики и практическими применениями квантовомеханического аппарата. С октября начинается собственно теорпрактикум. На каждом из четырехчасовых занятий выполняются задания одной из восьми тем данного пособия. Каждое задание студент должен сдать преподавателю, продемонстрировав, что он понимает суть проделанных выкладок. Для получения зачета требуется сдать задания по всем темам.

В работе над данным пособием мы использовали предыдущие издания [1–4]. Однако как теоретический материал, так и задачи составлены заново. Несколько изменен порядок изложения (и изучения) материала.

Различные издания пособий по теорпрактикуму всегда служили, помимо прямого назначения, кратким справочником наиболее часто встречающихся формул. Мы стремились это учитывать, однако были, разумеется, ограничены небольшим объемом. Главным и самым подробным справочником по данной тематике является книга [5]. Многочисленные ссылки на ее отдельные разделы даны в тексте. Для

углубленного изучения теории мы рекомендуем книги [6—12], а также известные учебники по квантовой механике.

На протяжении многих лет приходилось неоднократно слышать от выпускников отделения ядерной физики старших поколений слова о большой пользе, которую принес им теорпрактикум. Надеемся, что в дальнейшем новые поколения выпускников присоединятся к таким словам.

## Глава 1 Коммутационные соотношения и матричные элементы оператора углового момента

*Операторами углового момента* называются векторные операторы  $\hat{J} = \{\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z\}$ , декартовы компоненты которых подчиняются коммутационным соотношениям:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y. \quad (1.1)$$

Эти соотношения можно записать в виде  $[\hat{J}_k, \hat{J}_m] = i\varepsilon_{kmn}\hat{J}_n$ , где  $\varepsilon_{kmn}$  – символ Леви-Чивиты. Оператор  $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$  коммутирует с любой компонентой момента  $J_{x,y,z}$ :  $[\hat{J}^2, \hat{J}_x] = [\hat{J}^2, \hat{J}_y] = [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$ .

Введенные таким образом угловые моменты являются безразмерными. Если требуется ввести угловые моменты, измеряющиеся в единицах постоянной Планка, выражения для коммутаторов домножаются на  $\hbar$ :  $[\hat{J}_k, \hat{J}_m] = i\hbar\varepsilon_{kmn}\hat{J}_n$ .

Коммутационным соотношениям (1.1) удовлетворяют *оператор орбитального момента*  $\hat{L}$  и *оператор спина* – собственного момента частицы  $\hat{S}$ . По определению, оператор орбитального момента записывается в виде:

$$\hat{L} = [\hat{r}, \hat{p}] = -i \begin{vmatrix} \mathbf{n}_x & \mathbf{n}_y & \mathbf{n}_z \\ x & y & z \\ d/dx & d/dy & d/dz \end{vmatrix} = \hat{L}_x \mathbf{n}_x + \hat{L}_y \mathbf{n}_y + \hat{L}_z \mathbf{n}_z, \quad (1.2)$$

где  $\hat{r}$  и  $\hat{p}$  – операторы координаты и импульса частицы,  $\mathbf{n}_i$  – орты в декартовой системе координат. Явный вид собственных функций оператора орбитального момента (1.2) обсуждается в главе 4.

Коммутатор компонент оператора орбитального момента и компонент радиус-вектора:

$$[\hat{L}_k, \hat{r}_m] = i\varepsilon_{kmn}\hat{r}_n. \quad (1.3)$$

*Спиновые матрицы Паули* – матрицы размерностью  $2 \times 2$ , определенные как:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

Эти матрицы определяют компоненты спина и соответствуют удвоенному опера-

тору спина для частиц с  $s = 1/2$ :

$$\hat{S}_i = \frac{1}{2}\sigma_i, \quad i = x, y, z. \quad (1.5)$$

Оператор спина коммутирует с операторами координаты, импульса и орбитального момента. Матрицы для спина  $S \geq 1$  имеют размерность  $(2S + 1) \times (2S + 1)$  и представляются в общем виде:

$$(S_x)_{kl} = \frac{1}{2}(\delta_{k,l+1} + \delta_{k+1,l})\sqrt{(S+1)(k+l-1) - k \cdot l}; \quad (1.6)$$

$$(S_y)_{kl} = \frac{i}{2}(\delta_{k,l+1} - \delta_{k+1,l})\sqrt{(S+1)(k+l-1) - k \cdot l}; \quad (1.7)$$

$$(S_z)_{kl} = (S+1-k)\delta_{kl}. \quad (1.8)$$

$k, l$  принимают значения от 1 до  $2S + 1$ .

Полезно определить операторы *повышения и понижения проекции углового момента*:

$$\hat{J}_{\pm} = \frac{\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y}{\sqrt{2}}. \quad (1.9)$$

Получим коммутатор  $[\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}]$ :

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] = \frac{[\hat{J}_z, \hat{J}_x] + i[\hat{J}_z, \hat{J}_y]}{\sqrt{2}} = \frac{i\hat{J}_y + i \cdot (-i\hat{J}_x)}{\sqrt{2}} = \hat{J}_{\pm} \quad (1.10)$$

Часто возникает необходимость вычисления произведения этих операторов:

$$\begin{aligned} \hat{J}_- \hat{J}_+ &= \frac{1}{2}(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) = \\ &= \frac{1}{2}(\{\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2\} + \{i\hat{J}_x\hat{J}_y - i\hat{J}_y\hat{J}_x\}) = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z). \end{aligned} \quad (1.11)$$

Пусть состояние  $|jm\rangle$  является собственным вектором операторов  $\hat{J}^2$  и  $\hat{J}_z$  с собственными значениями  $\kappa^2$  и  $\mu$ . Покажем что (а) есть максимальная и минимальная величина собственного значения  $\mu$ ; (б) действие оператора  $\hat{J}_{\pm}$  переводит состояние  $|jm\rangle$  в состояние, которое также является собственной функцией операторов  $\hat{J}^2$  и  $\hat{J}_z$  с собственными значениями  $\kappa^2$  и  $\mu + 1$ , соответственно; (с) абсолютные величины максимального и минимального значения  $\mu$  совпадают; (д) собственные значения оператора  $\hat{J}_z$  могут принимать только целые или полуцелые значения.

(а) Поскольку среднее значение квадрата проекции углового момента на любое

направление не может быть отрицательным,  $\langle jm | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 | jm \rangle \geq 0$ . С другой стороны,

$\langle jm | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 | jm \rangle = \langle jm | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | jm \rangle = \kappa^2 - \mu^2$ , следовательно  $|\mu| \leq \kappa$ . Обозначим максимальное и минимальное значение проекции  $m_{max}$  и  $m_{min}$ , соответственно.

(b) Подействуем коммутатором  $[\hat{J}_z, \hat{J}_+]$  на состояние  $|jm\rangle$ :

$[\hat{J}_z, \hat{J}_+]|jm\rangle = \hat{J}_z \hat{J}_+ |jm\rangle - \hat{J}_+ \hat{J}_z |jm\rangle = \hat{J}_z \hat{J}_+ |jm\rangle - \mu \hat{J}_+ |jm\rangle$ . С другой стороны,  $[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hat{J}_+$ . Приравнивая эти два выражения, получаем  $\hat{J}_z \hat{J}_+ |jm\rangle = (\mu + 1) \hat{J}_+ |jm\rangle$ .

(c) Состояние  $\hat{J}_+ |jm_{max}\rangle$  не существует, и из-за линейности операторов очевидно, что  $\hat{J}_- \hat{J}_+ |jm_{max}\rangle = 0$ . С другой стороны,  $\langle jm_{max} | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_+ |jm_{max}\rangle = \kappa^2 - m_{max}^2 - m_{max}$ , из чего следует, что  $\kappa^2 = m_{max}(m_{max} + 1)$ . Аналогично  $\kappa^2 = -m_{min}(-m_{min} + 1)$ . Следовательно,  $m_{max} = -m_{min}$ .

(d) Условие  $m_{max} = -m_{min}$  совместно с (b) означает, что проекция  $\mu$  может принимать только целые или полуцелые значения. Собственные значения оператора  $\hat{J}^2$  равны  $m_{max}(m_{max} + 1)$ , и, для краткости, принято писать, что угловой момент системы равен  $m_{max}$ . То есть запись  $|jm\rangle$  означает, что данная волновая функция является собственной функцией оператора  $\hat{J}_z$  с собственным значением  $m$  и оператора  $\hat{J}^2$  с собственным значением  $j(j + 1)$ .

Из (b), таким образом, следует, что  $\hat{J}_+ |jm\rangle = \alpha |jm + 1\rangle$  при условии, что  $m < j$  ( $\alpha$  – некоторый коэффициент). Определим коэффициент  $\alpha$ . Для этого выпишем среднее значение произведения операторов  $\hat{J}_- \hat{J}_+$ :

$$\begin{aligned} \langle jm | \hat{J}_- \hat{J}_+ |jm\rangle &= \sum_{m'} \langle jm | \hat{J}_- |jm'\rangle \langle jm' | \hat{J}_+ |jm\rangle = \\ &= \sum_{m'} |\langle jm' | \hat{J}_+ |jm\rangle|^2 = \alpha^2. \end{aligned} \quad (1.12)$$

С другой стороны,

$$\langle jm | \hat{J}_- \hat{J}_+ |jm\rangle = \frac{j(j+1) - m^2 - m}{2} = \frac{(j-m)(j+m+1)}{2}. \quad (1.13)$$

Таким образом,

$$\hat{J}_+ |jm\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{(j-m)(j+m+1)}{2}} |jm + 1\rangle, & m < j; \\ 0, & m = j. \end{cases} \quad (1.14)$$

Аналогичным образом можно получить выражение для действия понижающего оператора  $\hat{J}_-$ :

$$\hat{J}_-|jm\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{(j+m)(j-m+1)}{2}}|jm-1\rangle, & m > -j; \\ 0, & m = -j, \end{cases} \quad (1.15)$$

которое предлагается вывести самостоятельно (см. задачу 1.9).

Выбор фазы в (1.14)-(1.15) может быть различным, здесь мы следуем выбору, при котором матричные элементы оператора  $\hat{J}_x$  являются вещественными, а матричные элементы оператора  $\hat{J}_y$  – чисто мнимыми. Такое согласование фаз часто называют согласованием фаз Кондона-Шортли [13].

Спин частицы связан с ее магнитным моментом, наблюдаемым экспериментально. В случае систем большого числа частиц, таких как атомные ядра, под магнитным моментом ядра понимают максимальное значение его проекции  $\hat{\mu} = \mu \frac{\hat{j}}{j}$  на направление вектора момента  $\mathbf{j}$ . В одночастичной модели оболочек магнитный момент ядра равен суммарному моменту *неспаренных* нуклонов. Магнитный момент нуклона, в свою очередь, складывается из спинового и орбитального магнитных моментов, и усредненный по движению нуклона (прецессированию вектора  $\boldsymbol{\mu}$  вокруг вектора  $\mathbf{j}$ ), сонаправлен с моментом  $\mathbf{j}$ :

$$\hat{\mu} = g_j \hat{j} = g_l \hat{l} + g_s \hat{s}. \quad (1.16)$$

Здесь коэффициенты  $g_l$  и  $g_s$  – гиромагнитные множители. Орбитальные гиромагнитные множители нуклонов совпадают с их зарядами, выраженными в единицах элементарного заряда:  $g_l^p = 1$ ,  $g_l^n = 0$ . Спиновые гиромагнитные множители нуклонов:  $g_s^p = 5.586$  и  $g_s^n = -3.826$ . Аномальные дробные значения  $g_s^p$  и  $g_s^n$  являются следствием того, что нейтрон и протон обладают внутренней структурой. В выражении (1.16) и далее подразумевается, что магнитный момент ядер измеряется в единицах ядерных магнетонов  $\mu_N = e\hbar/(2m_p)$ , которые во всех выражениях для магнитных моментов будут опущены.

Умножим выражение (1.16) на  $\hat{j} \equiv \hat{l} + \hat{s}$  и определим его значение для состо-

яния  $j$ :

$$\begin{aligned} g_j \hat{j}^2 &= g_l \hat{l}^2 + g_s \hat{s}^2 + (g_l + g_s)(\hat{l}\hat{s}) = \\ &= g_l \hat{l}^2 + g_s \hat{s}^2 + (g_l + g_s) \frac{\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2}{2}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Усредним по состоянию  $|(ls)j\rangle$ :

$$g_j = g_l \frac{j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} + g_s \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}. \quad (1.18)$$

Затем, воспользовавшись тем фактом, что для нуклона  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , получим гиромагнитное отношение:

$$\begin{aligned} g_j &= g_l \frac{(l \pm \frac{1}{2})(l \pm \frac{1}{2} + 1) + l(l+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}{2(l \pm \frac{1}{2})(l \pm \frac{1}{2} + 1)} + \\ &+ g_s \frac{(l \pm \frac{1}{2})(l \pm \frac{1}{2} + 1) - l(l+1) + \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}{2(l \pm \frac{1}{2})(l \pm \frac{1}{2} + 1)}, \\ g_j &= g_l \frac{2l^2 + 2l \pm l - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}}{(2l+1)(l + \frac{1}{2} \pm 1)} + g_s \frac{\pm l + 1 \pm \frac{1}{2}}{(2l+1)(l + \frac{1}{2} \pm 1)}, \\ g_j &= g_l \pm \frac{g_s - g_l}{2l+1}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

В качестве примера найдем магнитный момент изотопов  $^{17}\text{O}$  и  $^{13}\text{N}$  в одночастичной модели оболочек:

$$\begin{aligned} \mu(^{17}\text{O}) &= \mu(n_{1d5/2}) = (0 + \frac{-3.826 - 0}{2 \cdot 2 + 1}) \cdot \frac{5}{2} = -1.913, \\ \mu(^{13}\text{N}) &= \mu(p_{1p1/2}) = (1 - \frac{5.586 - 1}{2 \cdot 1 + 1}) \cdot \frac{1}{2} = -0.264. \end{aligned}$$

Экспериментальные значения для данных изотопов составляют:

$\mu_{\text{exp}}(^{17}\text{O}) = -1.893$  и  $\mu_{\text{exp}}(^{13}\text{N}) = 0.322$ . Расхождения с рассчитанными значениями связаны с приближениями одночастичной модели оболочек, в которой не учитывается смешивание конфигураций нуклонов, возникающее в результате частичного заселения более высоких нуклонных состояний.

Изменение знака всех проекций имеет физический смысл операции обращения

времени  $\hat{T}$ :

$$\hat{T}|jm\rangle = |jm\rangle^* = (-1)^{j-m}|j-m\rangle. \quad (1.20)$$

Для пояснения можно обратиться к параграфу “Обращение времени и теорема Крамера” [14].

Аналогично тому, как вводятся операторы угловых моментов, можно ввести операторы, действующие в изоспиновом пространстве. Рассмотрим изоспиновые повышающие и понижающие операторы. По аналогии с соотношениями (1.14) и (1.20), оператор  $I_+$  действует на кварки следующим образом:  $\hat{I}_+|d\rangle = \frac{|u\rangle}{\sqrt{2}}$ ,  $\hat{I}_+|u\rangle = 0$ ,  $\hat{I}_+|\bar{u}\rangle = -\frac{|\bar{d}\rangle}{\sqrt{2}}$ ,  $\hat{I}_+|\bar{d}\rangle = 0$ .

Найдем кварковый состав  $\pi^0$ -мезона, используя оператор повышения изоспина.  $\pi^-$ -мезон представляет собой комбинацию  $|d\bar{u}\rangle$  (в изоспиновом пространстве его волновая функция записывается как  $|1-1\rangle$ ). Подействуем на нее повышающим оператором:

$$\hat{I}_+|d\bar{u}\rangle = \hat{I}_+|d\rangle|\bar{u}\rangle + |d\rangle\hat{I}_+|\bar{u}\rangle = \frac{|u\rangle|\bar{u}\rangle - |d\rangle|\bar{d}\rangle}{\sqrt{2}} = \pi^0. \quad (1.21)$$

## Задачи к главе 1

- 1.1. Найти коммутаторы  $[\hat{J}_y, \hat{J}_x]$ ,  $[\hat{J}_z, \hat{J}_y]$ ,  $[\hat{J}_x, \hat{J}_z]$ ? (0.5 балла)
- 1.2. Показать, что  $\hat{l}\hat{s} = (\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2)/2$ . (1 балл\*)
- 1.3. Чему равны коммутаторы  $[\hat{L}_i, \hat{r}^2]$  и  $[\hat{L}^2, \hat{r}^2]$ ? (1 балл)
- 1.4. Показать, что  $\hat{J}_+\hat{J}_- = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z)$ . (1 балл\*)
- 1.5. Получить коммутатор  $[\hat{J}_z, \hat{J}_-]$ . (1 балл)
- 1.6. Получить коммутатор  $[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm^k]$ . (2 балла\*)
- 1.7. Получить коммутатор  $[\hat{J}_+, \hat{J}_-]$ . (1 балл)
- 1.8. Получить коммутатор  $[\hat{J}_+, \hat{J}_-^k]$ . (3 балла)
- 1.9. Найти матричный элемент  $\langle jm' | \hat{J}_- | jm \rangle$ . (1 балл\*)
- 1.10. Найти матричный элемент  $\langle jm' | \hat{J}_{x,y} | jm \rangle$ . (1 балл)

- 1.11. Вычислить следующие матричные элементы:  
 $\langle 21 | \hat{J}^2 | 21 \rangle$ ,  $\langle 22 | \hat{J}^2 | 21 \rangle$ ,  
 $\langle 21 | \hat{J}_z | 21 \rangle$ ,  $\langle 22 | \hat{J}_z | 21 \rangle$ ,  $\langle 21 | \hat{J}_x | 21 \rangle$ ,  $\langle 22 | \hat{J}_x | 21 \rangle$ .  
 (0.25 балла за матричный элемент\*)
- 1.12. Вычислить  $\langle 21 | \hat{J} | 21 \rangle$  и  $\langle 22 | \hat{J} | 21 \rangle$ . (1 балл за матричный элемент\*)
- 1.13. Вычислить следующие матричные элементы:  
 $\langle 21 | \hat{J}_+ | 21 \rangle$ ,  $\langle 22 | \hat{J}_+ | 21 \rangle$ ,  $\langle 21 | \hat{J}_- \hat{J}_+ | 21 \rangle$ ,  
 $\langle 22 | \hat{J}_- \hat{J}_+ | 21 \rangle$ ,  $\langle 21 | \hat{J}_+ \hat{J}_- | 21 \rangle$ ,  $\langle 22 | \hat{J}_+ \hat{J}_- | 21 \rangle$ .  
 (0.25 балла за матричный элемент\*)
- 1.14. В одночастичной схеме определить спин, четность и магнитный момент ядер  $^{13}\text{C}$ ,  $^{17}\text{F}$ ,  $^{39}\text{Ca}$  и  $^{39}\text{K}$ . (0.5 балла за ядро)
- 1.15. Показать, что матрицы Паули антикоммумутативны. (1 балл\*)
- 1.16. Показать, что для векторов  $a$  и  $b$ , коммутирующих с матрицами Паули, справедливо равенство:  $(\sigma a)(\sigma b) = (ab) + i\sigma[ab]$ . (2 балла\*)
- 1.17. Частица со спином  $1/2$  находится в состоянии с определенной проекцией  $+1/2$  на ось  $z$ . Определить вероятность возможных значений проекции спина на ось  $z'$ , направленную под некоторым углом  $\theta$  к оси  $z$ . (2 балла\*)
- 1.18. Построить  $\pi^+$ -мезон из  $\pi^0$ . (1 балл)
- 1.19. Показать, что не может существовать заряженных  $\eta$ -мезонов,  $|\eta^0\rangle = (u\bar{u} + d\bar{d} - 2s\bar{s})/\sqrt{6}$ . (1 балл\*)
- 1.20. Найти коммутатор:  $[\hat{J}^2, e^{-i\alpha\hat{J}_k}]$ ,  $\alpha$  – некоторое число. (1 балл\*)
- 1.21. Раскрыть функцию от оператора спина  $e^{i\gamma\hat{s}_k}$  для  $s = 1/2$ .  $\gamma$  – некоторое число. (1 балл\*)
- 1.22. Упростить выражения с операторами координаты и углового момента. Рассмотреть отдельно случаи  $m = k$  и  $m \neq k$ :

a)  $e^{-i\gamma\hat{L}_k} \hat{r}_m e^{i\gamma\hat{L}_k}$ ,

b)  $e^{-i\gamma\hat{J}_k} \hat{J}_m e^{i\gamma\hat{J}_k}$ .

При решении рекомендуется воспользоваться тождеством Беккера-Кэмпбэлла-Хаусдорфа:

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{1!} + \frac{[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]}{2!} + \frac{[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]}{3!} + \dots \quad (1.22)$$

(по 2 балла за каждый пункт (b)\*).

- 1.23. Получить спиновые матрицы  $\hat{S}_{x,y,z}$  для случая спина  $s = 1$ . (1.5 балла)
- 1.24. Получить коммутатор  $[\hat{L}_k, \hat{J}_m]$ . (1 балл)

## Глава 2 Коэффициенты Клебша—Гордана

Пусть система содержит два угловых момента  $\mathbf{j}_1$  и  $\mathbf{j}_2$ , тогда ее состояние может быть описано моментами и значением их проекции  $|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle$  или суммарным моментом и его проекцией  $|(j_1 j_2) j m\rangle$ . Второе представление называется представлением со связанными моментами. Переход от одного представления к другому осуществляется проецированием состояний одного базиса на другой:  $\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | (j_1 j_2) j m \rangle$ . Коэффициенты Клебша—Гордана позволяют “связать” или “развязать” два угловых момента  $j_1, j_2$ :

$$|(j_1, j_2) j m\rangle = \sum_{m_1 m_2} (j_1 m_1, j_2 m_2 | j m) |j_1 m_1; j_2 m_2\rangle, \quad (2.1)$$

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle = \sum_{j m} (j_1 m_1, j_2 m_2 | j m) |(j_1, j_2) j m\rangle. \quad (2.2)$$

и представляют собой амплитуду вероятности того, что угловые моменты  $j_1, j_2$  с проекциями  $m_1, m_2$  связаны в суммарный угловой момент  $j$  с проекцией  $m$ . Так как  $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2$  и  $\mathbf{j}$  являются векторами, пусть и квантованными, должно выполняться правило треугольника:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2,$$

а также условие  $m_1 + m_2 = m$ . Очевидно, что  $(j m, 0 0 | j' m') = \delta_{j j'} \delta_{m m'}$ . Коэффициенты Клебша—Гордана можно представить в различных явных формах, например через биномиальные коэффициенты или в виде интегрального выражения (см. [5], параграф 8.1). Для их расчетов существуют обширные таблицы [5], небольшая выдержка из которых приведена в конце главы, и различные калькуляторы (см., например, [15]).

Коэффициенты Клебша—Гордана обладают свойством ортонормированности:

$$\sum_{j m} (j_1 m_1, j_2 m_2 | j m) (j_1 m'_1, j_2 m'_2 | j m) = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}, \quad (2.3)$$

$$\sum_{m_1 m_2} (j_1 m_1, j_2 m_2 | j m) (j_1 m_1, j_2 m_2 | j' m') = \delta_{j j'} \delta_{m m'}. \quad (2.4)$$

Выведем первое из них. Для этого рассмотрим скалярное произведение двух вол-

новых функций из базиса  $|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle$  по состояниям базиса  $|(j_1 j_2) j m\rangle$ :

$$\begin{aligned}
 & \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 m'_1 j_2 m'_2 \rangle = \tag{2.5} \\
 & = \sum_{j m j' m'} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | (j_1 j_2) j m \rangle \langle (j_1 j_2) j m | j_1 m'_1 j_2 m'_2 \rangle \langle (j_1 j_2) j m | (j_1 j_2) j' m' \rangle = \\
 & = \sum_{j m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | (j_1 j_2) j m \rangle \langle (j_1 j_2) j m | j_1 m'_1 j_2 m'_2 \rangle \langle (j_1 j_2) j m | (j_1 j_2) j m \rangle
 \end{aligned}$$

Матричные элементы  $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | (j_1 j_2) j m \rangle$  – это и есть коэффициенты Клебша—Гордана  $(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m)$ . Комплексно-сопряженные матричные элементы  $\langle j m | j_1 m'_1 j_2 m'_2 \rangle$  равны коэффициентам Клебша—Гордана  $(j_1 m'_1, j_2 m'_2 | j m)$  при использовании согласования фаз Кондона—Шортли, в рамках которого все коэффициенты Клебша—Гордана являются действительными числами. С другой стороны, в силу ортогональности волновых функций в скалярном произведении (2.6):

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 m'_1 j_2 m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} . \tag{2.6}$$

Приравнивая данные результаты друг другу, получаем свойство ортонормированности (2.3). Второе свойство ортонормированности предлагается рассмотреть самостоятельно (см. задачу 2.1).

Хорошо известным примером использования коэффициентов Клебша—Гордана является включение спин-орбитального взаимодействия в оболочечную модель ядра или атома. В связи с наличием спин-орбитального взаимодействия в ядре проекция спина  $m_s$  и орбитального  $m_l$  момента нуклона являются “плохими” квантовыми числами, и вместо них приходится говорить о проекции полного момента  $m_j$ . Однако, благодаря коэффициентам Клебша—Гордана, можно представить волновую функцию протона (например,  $|1p_{1/2}, m = 1/2\rangle$ ) как сумму состояний с определенной проекцией спина и орбитального момента:

$$\begin{aligned}
 |1p_{1/2}, m = 1/2\rangle & = \sum_{\substack{m_l = 0, \pm 1, \\ m_s = \pm 1/2}} (1 m_l, 1/2 m_s | 1/2 1/2) |1m_l; 1/2 m_s\rangle = \tag{2.7} \\
 & = (1 0, 1/2 1/2 | 1/2 1/2) |10; 1/2 1/2\rangle + (1 1, 1/2 -1/2 | 1/2 1/2) |11; 1/2 -1/2\rangle .
 \end{aligned}$$

Для расчетов коэффициентов Клебша—Гордана можно воспользоваться *re-*

куррентным соотношением:

$$\begin{aligned}
& \sqrt{(j-m)(j+m+1)}(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m + 1) = \\
& = \sqrt{(j_1 + m_1)(j_1 - m_1 + 1)}(j_1 m_1 - 1, j_2 m_2 | j m) + \\
& + \sqrt{(j_2 + m_2)(j_2 - m_2 + 1)}(j_1 m_1, j_2 m_2 - 1 | j m). \tag{2.8}
\end{aligned}$$

Чтобы его получить, подействуем повышающим оператором на функцию системы в представлении связанных моментов  $|(j_1 j_2) j m\rangle$  и ее же, разложенную на компоненты, и спроектируем на состояние  $\langle j_1 m_1; j_2 m_2 |$ :

$$\begin{aligned}
& \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | \hat{J}_+ | (j_1, j_2) j m \rangle = \\
& \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1 m'_1, j_2 m'_2 | j m \rangle \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | (\hat{J}_+^{(1)} + \hat{J}_+^{(2)}) | j_1 m'_1; j_2 m'_2 \rangle, \tag{2.9}
\end{aligned}$$

Затем напрямую воспользуемся соотношением (1.14) для левой части и (1.15) для правой части, заменив матричный элемент на сопряженный:

$$\begin{aligned}
& \sqrt{(j-m)(j+m+1)}/2 \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | (j_1, j_2) j m + 1 \rangle = \tag{2.10} \\
& \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1 m'_1, j_2 m'_2 | j m \rangle \langle j_1 m'_1, j_2 m'_2 | (\hat{J}_-^{(1)} + \hat{J}_-^{(2)}) | j_1 m_1; j_2 m_2 \rangle^* = \\
& \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1 m'_1, j_2 m'_2 | j m \rangle (\sqrt{(j_1 + m_1)(j_1 - m_1 + 1)}/2 \langle j_1 m'_1, j_2 m'_2 | j_1 m_1 - 1; j_2 m_2 \rangle^* + \\
& \sqrt{(j_2 + m_2)(j_2 - m_2 + 1)}/2 \langle j_1 m'_1, j_2 m'_2 | j_1 m_1; j_2 m_2 - 1 \rangle^*).
\end{aligned}$$

Второе рекуррентное соотношение:

$$\begin{aligned}
& \sqrt{(j+m)(j-m+1)}(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m - 1) = \\
& = \sqrt{(j_1 - m_1)(j_1 + m_1 + 1)}(j_1 m_1 + 1, j_2 m_2 | j m) + \\
& + \sqrt{(j_2 - m_2)(j_2 + m_2 + 1)}(j_1 m_1, j_2 m_2 + 1 | j m), \tag{2.11}
\end{aligned}$$

предлагается получить самостоятельно в задаче 2.9.

Из рекуррентного соотношения (2.8) следует, что

$$\frac{\langle j_1 m_1, j_2 m_2 - 1 | j j \rangle}{\langle j_1 m_1 - 1, j_2 m_2 | j j \rangle} = -\sqrt{\frac{(j_1 + m_1)(j_1 - m_1 + 1)}{(j_2 + m_2)(j_2 - m_2 + 1)}}. \tag{2.12}$$

Теперь можно получить необходимые для разложения волновой функции протона значения коэффициентов  $(1 m, 1/2 m' | 1/2 1/2)$ :

$$\begin{cases} (10, 1/2 1/2 | 1/2 1/2)^2 + (11, 1/2 -1/2 | 1/2 1/2)^2 = 1 \\ 0 \cdot (11, 1/2 1/2 | 1/2 \frac{3}{2}) = \sqrt{2}(10, 1/2 1/2 | 1/2 1/2) + (11, 1/2 -1/2 | 1/2 1/2). \end{cases} \quad (2.13)$$

Учитывая, что по согласованию фаз  $(j_1 j_1, j_2 m_2 | j j)$  и  $(j_2 j_2, j_1 m_1 | j j)$  должны быть положительны ([5], параграф 8.1), в результате получаем:

$$(10, 1/2 1/2 | 1/2 1/2) = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (11, 1/2 -1/2 | 1/2 1/2) = \sqrt{\frac{2}{3}}. \quad (2.14)$$

При сложении обычных векторов в физическом пространстве выполняется соотношение  $\hat{j}_1 + \hat{j}_2 = \hat{j}_2 + \hat{j}_1$ , однако для квантового углового момента перестановочные соотношения несколько сложнее:

$$(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m) = (-1)^{j_1+j_2-j} (j_1 - m_1, j_2 - m_2 | j - m) \quad (2.15)$$

$$= (-1)^{j_1+j_2-j} (j_2 m_2, j_1 m_1 | j m) = \quad (2.16)$$

$$(-1)^{j_2+m_2} \frac{\sqrt{2j+1}}{\sqrt{2j_1+1}} (j - m, j_2 m_2 | j_1 - m_1) \quad (2.17)$$

$$= (-1)^{j_1-m_1} \frac{\sqrt{2j+1}}{\sqrt{2j_2+1}} (j_1 m_1, j - m | j_2 - m_2) \quad (2.18)$$

Из перестановочного соотношения (2.16) следует, что

$$|(j_1 j_2) J\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} |(j_2 j_1) J\rangle. \quad (2.19)$$

Корень вида  $\sqrt{2j+1}$  часто встречается в алгебре углового момента, и поэтому обычно используется его краткие обозначения:  $\hat{j} \equiv [j] \equiv \sqrt{2j+1}$ .

Иногда вместо коэффициентов Клебша–Гордана пользуются  $3j$ -символами Вигнера. Они определяются как:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_3+m_3+2j_1} \frac{1}{\hat{j}_3} (j_1 - m_1, j_2 - m_2 | j_3 m_3). \quad (2.20)$$

Обратное соотношение:

$$(j_1 m_1, j_2 m_2 | j_3 m_3) = (-1)^{j_1 - j_2 + m_3} \hat{j}_3 \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

предлагается вывести самостоятельно в задаче 2.13.

Физический смысл  $3j$ -символа – амплитуда вероятности того, что три угловых момента  $j_1$ ,  $j_2$  и  $j_3$  с проекциями  $m_1$ ,  $m_2$  и  $m_3$  складываются в полный момент, равный нулю.

$3j$ -символы обладают более простыми свойствами симметрии, чем коэффициенты Клебша–Гордана. Во-первых,  $3j$ -символы, получаемые при четных перестановках столбцов, равны друг другу. При нечетных перестановках возникает фазовый множитель  $(-1)^{j_1 + j_2 + j_3}$ . Во-вторых, такой же фазовый множитель возникает при изменении знака проекции всех трех моментов:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Рассмотрим частный, но крайне важный случай, когда две частицы имеют одинаковый спин и противоположные проекции, и определим, какой полный момент они могут дать и с какой вероятностью. Например, для спина  $1/2$ :

$$|1/2^{1/2}; 1/2^{-1/2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(1/2^{1/2})00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |(1/2^{1/2})10\rangle; \quad (2.23)$$

для момента 1:

$$|11; 1-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(11)00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |(11)10\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |(11)20\rangle. \quad (2.24)$$

На первый взгляд, полученные выражения кажутся противоречивыми, так как два противоположно направленных вектора в сумме не дают ноль, и даже более того, две частицы со спином  $1/2$  с равной вероятностью складываются в спин 0 и 1. Следует иметь в виду, что выражение «противоположно направленные вектора» для квантовых величин не следует трактовать так, как это делается в геометрии для классических векторов: для квантовых векторов можно говорить только о противоположности одной из их проекций.

На рисунке 2.1 приведена классическая интерпретация квантового сложения моментов. Два момента  $1/2$  с противоположной проекцией на ось  $z$  в общем случае

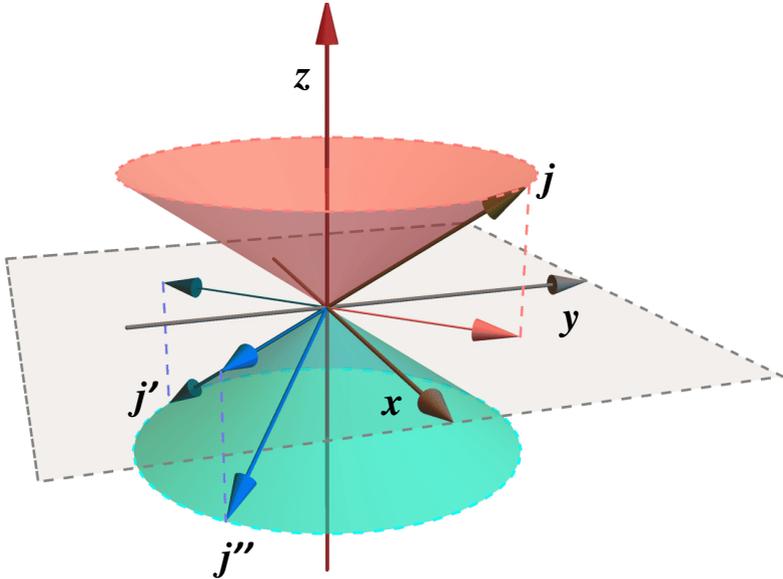


Рис. 2.1: Иллюстрация векторной модели сложения квантовых моментов.

могут быть произвольным образом направлены вдоль конической поверхности, один момент выше плоскости симметрии, второй – ниже. Пусть первый вектор ориентирован как  $\mathbf{j}$ . Если второй вектор ориентирован как  $\mathbf{j}'$ , сумма  $\mathbf{j} + \mathbf{j}'$  будет равна 0. Если же второй момент ориентирован как  $\mathbf{j}''$ , то сумма  $\mathbf{j} + \mathbf{j}''$  будет равна 1.

В результате какой-либо реакции (ионизации, расщепления, рассеяния) ее продукты часто неравномерно распределены по проекциям момента. Пусть относительная заселенность некоторой проекции  $W_{jm}$ , так что  $\sum_m W_{jm} = 1$ . В этом случае  $W_{jm}$  будут иметь смысл диагональных элементов матрицы плотности. Для описания неравномерности заселения различных проекций одного момента используется понятие поляризационных тензоров. Самыми часто встречающимися-

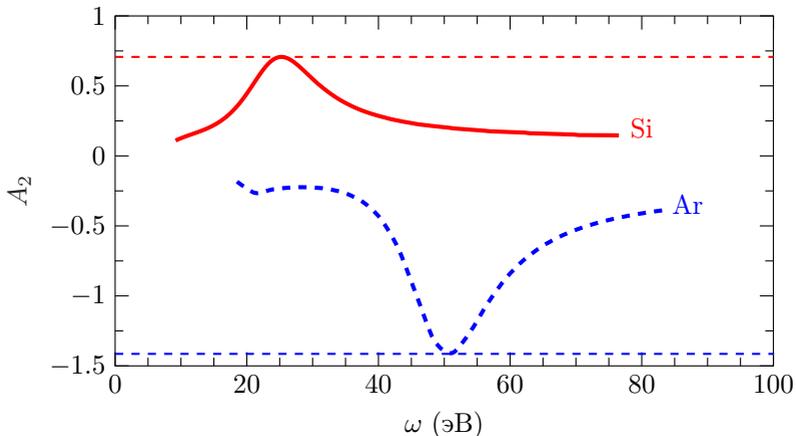


Рис. 2.2: Выстроенность однократно заряженных ионов аргона и кремния как функция энергии налетающего фотона после ионизации линейно поляризованным полем:  $3p^6 \ ^1S + \omega \rightarrow 3p^5 \ ^2P + e^-$  и  $3p^2 \ ^3P + \omega \rightarrow 3p^1 \ ^2P + e^-$ . Пунктирные линии отмечают максимальное и минимальное значения, определенные в задаче 2.14.

ся являются *ориентация*  $A_1$  и *выстроенность*  $A_2$ , определяемые как

$$A_1 = \frac{\sum_m (-1)^{j-m} (j m, j - m | 1 0) W_{jm}}{\sum_m (-1)^{j-m} (j m, j - m | 0 0) W_{jm}}, \quad (2.25)$$

$$A_2 = \frac{\sum_m (-1)^{j-m} (j m, j - m | 2 0) W_{jm}}{\sum_m (-1)^{j-m} (j m, j - m | 0 0) W_{jm}}, \quad (2.26)$$

где  $W_{jm}$  – заселенность конкретной проекции  $m$  момента  $j$ .

На рисунке 2.2 приведен пример выстроенности атомов аргона и кремния после ионизации их линейно поляризованным полем. Можно видеть, что выстроенность является функцией энергии фотона, но при этом максимальное и минимальные значения удовлетворяют значениям, найденным в задаче 2.14.

## Задачи к главе 2

- 2.1. Получить свойство ортонормированности (2.4). (1 балл\*)
- 2.2. Две частицы со спинами 1 и 2 находятся каждая в состоянии с проекцией спина на ось  $z$ , равной нулю. Найти распределение суммарного спина этих

- частиц. (1 балл\*)
- 2.3. Две частицы со спинами 1 и 2 находятся в состоянии с суммарным спином, равным 2, и проекцией, равной  $-1$ . Найти распределение по состояниям с различными проекциями спинов частиц. (1 балл\*)
- 2.4. Покажите, что базис спаренных и неспаренных состояний имеет одинаковую размерность. (2 балла\*)
- 2.5. Две частицы имеют равный момент и проекции  $m_1 = j$ ,  $m_2 = j - 1$ . Каким моментом может обладать полная система, если момент каждой из частиц (а)  $j = 1/2$ , (б)  $j = 1$ , (в)  $j = 2$ ? (0.5 баллов за ответ)
- 2.6. Разложить волновую функцию протона  $1p_{3/2}$  с (а)  $m = 3/2$ , (б)  $m = 1/2$  по состояниям с определенной проекцией спина и орбитального момента. (0.5 баллов за ответ)
- 2.7. Выразить через одночастичные функции дважды-возбужденные автоионизационные состояния атома гелия  $2p3p^1P$ ,  $2p3d^1P$  для проекции их суммарного орбитального момента  $M = 0$ . Отметим, что при фотовозбуждении линейно поляризованным излучением возбуждается именно эта проекция. (1 балл за АИС)
- 2.8. Рассмотрим гиперядро  ${}^6_\Lambda\text{He}$ , в состав которого входят 2 протона, 3 нейтрона и 1  $\Lambda$ -гиперон. В предположении, что в основном состоянии данное гиперядро обладает спином 1 ( $\Lambda$ -гиперон при этом находится на  $s$ -уровне), разложите волновую функцию гиперядра по состояниям, характеризующимся различными проекциями  $\Lambda$ -гиперона и неспаренного нейтрона (проекция спина гиперядра равна 0). (1 балл)
- 2.9. Получить рекуррентное соотношение (2.11). (2 балла\*)
- 2.10. Используя одно из рекуррентных соотношений (2.8, 2.11), получить коэффициенты Клебша—Гордана  $(1/2\ 1/2, 1/2\ -1/2 | 1\ 0)$  и  $(1/2\ -1/2, 1/2\ 1/2 | 1\ 0)$ . Использовать  $(j_1 \pm j_1, j_2 \pm j_2 | (j_1 + j_2) \pm (j_1 + j_2))$ . (1 балл)
- 2.11. Используя перестановочные соотношения, определить коэффициент Клебша—Гордана  $(j_1\ m_1, j_2\ m_2 | 0\ 0)$ . Использовать утверждение  $(j_1\ m_1, 0\ 0 | j_2\ m_2) = \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2}$ . (1 балл\*)
- 2.12. Покажите, что  $(j_1\ 0, j_2\ 0 | j_3\ 0) = 0$ , если сумма  $j_1 + j_2 + j_3$  нечетная. (1 балл)

- 2.13. Получить соотношение (2.21). (1 балл\*)
- 2.14. Определите максимальное и минимальное значения ориентации и выстроенности для системы с  $j = 1$ . (2 балла)
- 2.15. Показать, что для системы двух тождественных фермионов, находящихся на одной оболочке  $nl$ ,  $L + S$ -четное. (1 балл\*)

Таблица коэффициентов Клебша—Гордана

$j_1 m_1$	$j_2 m_2 \backslash j m$	0	1	1	2	2	2	3	3	3	3
		0	0	1	0	1	2	0	1	2	3
$1/2^1/2$	$1/2^1/2$	-	-	1	-	-	-	-	-	-	-
$1/2^1/2$	$1/2^{-1}/2$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	-	-	-	-	-	-	-
11	11	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-
11	10	-	-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	-	-	-	-
11	1-1	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	-	-	-	-	-	-
10	10	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	-	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	-	-	-	-	-	-
$3/2^3/2$	$1/2^1/2$	-	-	-	-	-	1	-	-	-	-
$3/2^3/2$	$1/2^{-1}/2$	-	-	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	-	$\frac{1}{2}$	-	-	-	-	-
$3/2^1/2$	$1/2^1/2$	-	-	$-\frac{1}{2}$	-	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	-	-	-	-	-
$3/2^1/2$	$1/2^{-1}/2$	-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	-	-	-	-	-
$3/2^3/2$	$3/2^3/2$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
$3/2^3/2$	$3/2^1/2$	-	-	-	-	-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-
$3/2^3/2$	$3/2^{-1}/2$	-	-	$\sqrt{\frac{3}{10}}$	-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	-	$\frac{1}{\sqrt{5}}$	-	-
$3/2^3/2$	$3/2^{-3}/2$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2\sqrt{5}}$	-	$\frac{1}{2}$	-	-	$\frac{1}{2\sqrt{5}}$	-	-	-
$3/2^1/2$	$3/2^1/2$	-	-	$-\sqrt{\frac{2}{5}}$	-	0	-	-	$\sqrt{\frac{3}{5}}$	-	-
$3/2^1/2$	$3/2^{-1}/2$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2\sqrt{5}}$	-	-	$\frac{1}{2}$	-	$\frac{3}{2\sqrt{5}}$	-	-	-
22	11	-	-	-	-	-	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	-	-	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	-
22	10	-	-	-	-	-	-	-	$\frac{1}{\sqrt{15}}$	-	-
22	1-1	-	-	$\sqrt{\frac{3}{5}}$	-	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	-	-	-	-	-
21	11	-	-	-	-	-	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	-	-	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	-
21	10	-	-	$-\sqrt{\frac{3}{10}}$	-	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	-	-	$2\sqrt{\frac{2}{15}}$	-	-
21	1-1	-	$\sqrt{\frac{3}{10}}$	-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	-	$\frac{1}{\sqrt{5}}$	-	-	-
20	11	-	-	$\frac{1}{\sqrt{10}}$	-	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	-	-	$\sqrt{\frac{2}{5}}$	-	-
20	10	-	$-\sqrt{\frac{2}{5}}$	-	0	-	-	$\sqrt{\frac{3}{5}}$	-	-	-

Также можно воспользоваться онлайн-ресурсами для расчета коэффициентов Клебша—Гордана (например, [15]) или пакетами функций для стандартных языков программирования (например, для MATLAB [16]).

### Глава 3 Углы Эйлера

Соотношение, связывающее координаты произвольной точки в системе отсчета  $S$  с координатами той же точки, но в повернутой на углы Эйлера системе  $\tilde{S}$ , можно записать в следующем виде:

$$\tilde{\mathbf{r}} = \hat{g}(\omega)\mathbf{r}, \quad (3.1)$$

где  $\omega = (\alpha, \beta, \gamma)$  – совокупность параметров поворота.

Углы Эйлера  $(\alpha, \beta, \gamma)$ , выбранные в качестве параметров поворота, задают последовательность поворотов для перехода из системы координат  $S$  к системе  $\tilde{S}$ : на угол  $\alpha$  вокруг изначальной оси  $z$ , на угол  $\beta$  вокруг новой оси  $y$  и на угол  $\gamma$  вокруг повернутой оси  $z$  (рис. 3.1).

Рассмотрим поворот на угол  $\alpha$  вокруг оси  $z$ . Явный вид матрицы поворота, связывающий координаты вектора в повернутой системе координат  $\mathbf{r}'$  и начальной:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

При повороте вокруг оси  $y$ , очевидно, неизменной остается соответствующая координата;

$$\begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Наконец, третий поворот отличается от (3.2) заменой угла  $\alpha$  на  $\gamma$ :

$$\begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Произведение (3.4)×(3.3)×(3.2) дает итоговую матрицу поворота  $\hat{g}(\omega)$ :

$$g(\omega) = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma & \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \beta \cos \gamma \\ -\cos \alpha \cos \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma & -\sin \alpha \cos \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \beta \sin \gamma \\ \cos \alpha \sin \beta & \sin \alpha \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

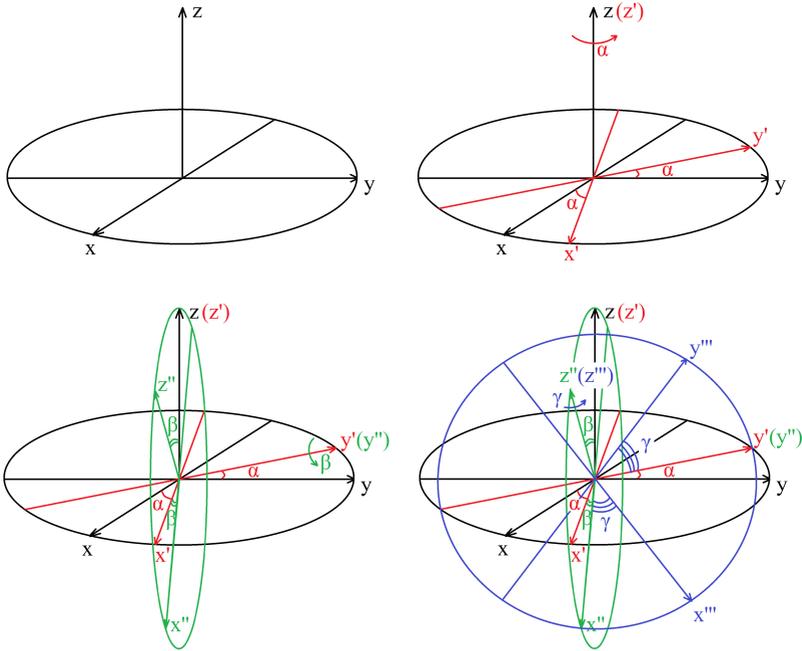


Рис. 3.1: Последовательность поворотов системы координат на углы Эйлера  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ .

Координаты вектора в новой системе координат (пассивный поворот) совпадают с координатами вектора, повернутого на углы  $(-\gamma, -\beta, -\alpha)$ , в старой системе координат (активный поворот).

Выбор углов Эйлера не является однозначным, то есть поворот на углы  $\alpha, \beta, \gamma$  и  $\pi + \alpha, -\beta, \pi + \gamma$  приводит к одному и тому же результату.

На практике необходимость поворота системы координат возникает в различных случаях.

(а) Направить ось  $z$  в некотором определенном направлении. Например, направить ось  $z$  вдоль диагонали куба, образованного ортами. То есть новая ось  $z'$  в старой системе координат имеет компоненты  $\{1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}\}$ . Очевидным подходом будет решать систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hat{g}(\omega) \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

но решение этой системы слегка громоздко. Проще воспользоваться ответом задачи 3.1 и решить обратную задачу:

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} = \hat{g}^{-1}(\omega) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Тогда получается система:

$$\begin{cases} \cos \alpha \sin \beta = 1/\sqrt{3}, \\ \sin \alpha \sin \beta = 1/\sqrt{3}, \\ \cos \beta = 1/\sqrt{3}. \end{cases} \quad (3.8)$$

Решение этой системы  $\beta = \pm \arccos 1/\sqrt{3}$ , а  $\alpha = \pi/4$  или  $\alpha = 5\pi/4$ , первому случаю соответствует знак  $+$ , второму знак  $-$ . На примере этой задачи мы убедились в неоднозначности выбора углов Эйлера. Важным для понимания является тот факт, что в такой постановке задачи угол  $\gamma$  не определен. Если по условиям задачи важна только ориентация оси квантования  $z$ , то угол  $\gamma$  произволен.

(b) Предположим, мы дополняем предыдущую задачу условием, чтобы новая ось  $x$  лежала в плоскости  $xy$  начальной системы. Это значит, что орт новой оси  $\mathbf{n}'_x$  в начальной системе имеет компоненты  $\{a, b, c\}$ , удовлетворяющие условиям  $c = 0$  (так как лежит в плоскости) и  $a/\sqrt{3} + b/\sqrt{3} = 0$  (так как должно быть ортогонально орту  $\mathbf{n}'_z$ ). То есть для новой оси  $\mathbf{n}'_x = \{1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}, 0\}$ . Действуя аналогично (3.7), мы получаем три уравнения с одинаковыми решениями. Самое простое из них  $-\sin \beta \cos \gamma = 0$ , то есть  $\gamma = \pm \pi/2$ .

Если два орта, например  $x'$  и  $z'$ , зафиксированы, то третий определяется их векторным произведением  $[\mathbf{n}_z, \mathbf{n}_x]$ .

Полезно напомнить некоторые базовые формулы геометрии:

- Уравнение плоскости:  $ax + by + cz + d = 0$ . Поскольку нас интересуют повороты, а не трансляции, то плоскость должна проходить через начало координат, и  $ax + by + cz = 0$ .
- Вектор, нормальный к плоскости, имеет компоненты, пропорциональные  $a, b, c$ .

Получим явный вид оператора поворота. Рассмотрим сперва поворот на бесконечно малый угол  $\delta\phi$ . Приращение координат:

$$\delta x = -R \sin \phi \delta\phi = -y \delta\phi; \quad (3.9)$$

$$\delta y = R \cos \phi \delta\phi = x \delta\phi. \quad (3.10)$$

Оператор бесконечно малого поворота вокруг оси  $z$ :

$$\hat{R} = 1 + \delta x \frac{\partial}{\partial x} + \delta y \frac{\partial}{\partial y} = 1 + i \hat{J}_z \delta\phi \quad (3.11)$$

Если теперь надо совершить поворот на конечный угол  $\Delta\phi$ , разобьем угол на  $n$  малых частей и рассмотрим предельный переход к  $n \rightarrow \infty$ :

$$\hat{D} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + i \hat{J}_z \frac{\Delta\phi}{n} \right)^n = \exp(i \hat{J}_z \Delta\phi) \quad (3.12)$$

Очевидно, что если поворачивается не вектор, а система координат то

$$\hat{D} = \exp(-i \hat{J}_z \Delta\phi) \quad (3.13)$$

Пусть  $|jm\rangle$  – вектор состояния некоторой физической системы с моментом  $j$  и его проекцией  $m$  на ось  $z$  в системе координат  $S$ . Пусть  $|\widetilde{jm}\rangle$  – вектор другого состояния той же физической системы с тем же моментом  $j$  и тем же значением проекции  $m$  на ось  $z$ , но уже в повернутой системе координат  $\widetilde{S}$ . Выражение для перехода из состояния  $|jm\rangle$  в состояние  $|\widetilde{jm}\rangle$  можем записать следующим образом:

$$|\widetilde{jm}\rangle = \hat{R}(\omega)|jm\rangle, \quad (3.14)$$

где  $\hat{R}(\omega) = e^{-i\alpha\hat{j}_z} e^{-i\beta\hat{j}_y} e^{-i\gamma\hat{j}_z}$  – унитарный оператор, характеризующий поворот системы на соответствующий набор углов Эйлера  $\omega(\alpha, \beta, \gamma)$ .

Для операторов физических величин соответствующее преобразование будет иметь

следующий вид:

$$\tilde{A} = \hat{R}(\omega)\hat{A}\hat{R}^{-1}(\omega), \quad (3.15)$$

### Задачи к главе 3

- 3.1. Получить выражение, обратное к (3.5). (1 балл\*)
- 3.2. Найти углы Эйлера для поворота на угол  $120^\circ$  вокруг диагонали куба OD (преобразование, совмещающее куб с собой,  $A'B'C' \rightarrow B'C'A'$ , см. рис. 3.2). (1 балл)

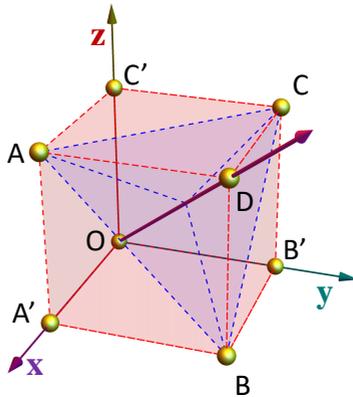


Рис. 3.2: Поворот куба вокруг главной диагонали.

- 3.3. Найти углы Эйлера для поворота системы координат, такой что ось  $z'$  направлена вдоль  $(0,1,1)$ , а ось  $x'$  осталась в плоскости  $(xOy)$ . (1 балл)
- 3.4. Ось квантования  $z$  направлена от основания правильного тетраэдра к его вершине, а ось  $x$  параллельна одному из ребер (см. рис. 3.3а). Найти углы Эйлера, соответствующие ориентации оси квантования параллельно каждому ребру. (3 балла, по 0.5 за ответ)
- 3.5. Поваренная соль имеет кубическую кристаллическую структуру, где ни один из атомов Cl не соседствует с другим (см. рис. 3.3б). Начало координат

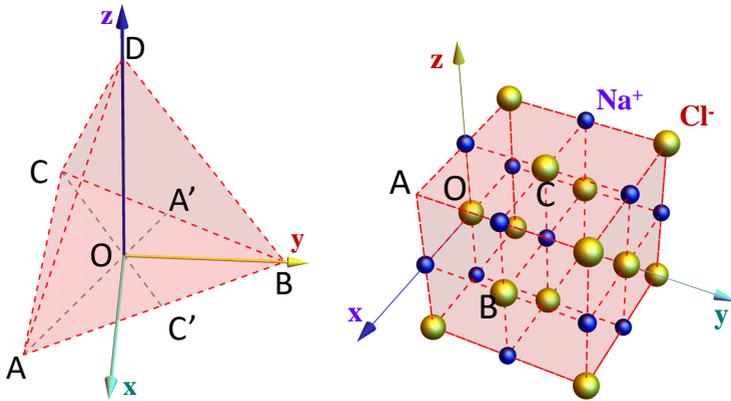


Рис. 3.3: Система координат, связанная с тетраэдром (а) и кристаллом поваренной соли (b).

находится на одном из атомов  $\text{Cl}^-$  и оси ориентированы вдоль кристаллической решетки. Найти углы Эйлера для перехода в систему координат, где ось квантования направлена вдоль  $\text{Cl}^-$ - $\text{Cl}^-$  (вдоль  $OA$ ,  $OB$  и  $OC$ ). (1.5 балла, по 0.5 за ответ)

- 3.6. Используя задачу 1.20 доказать, что состояние  $|\widetilde{jm}\rangle$ , полученное путем поворота системы на углы Эйлера, имеет такой же полный момент, что и состояние  $|jm\rangle$ . (0.5 балла)
- 3.7. Показать, что матричный элемент оператора не зависит от того, в какой системе ( $S$  или  $\widetilde{S}$ ) он вычисляется. (0.5 балла\*)
- 3.8. Построить оператор  $\widetilde{r}$ , используя правило (3.15). (2 балла)
- 3.9. Показать, как преобразуется оператор спина  $\hat{s}$  для частицы со спином  $s = 1/2$  после поворота системы вокруг оси  $z$  на угол  $\alpha$ . Привести явный вид  $\widetilde{\hat{s}}_i$ . (2 балла\*)

## Глава 4 $D$ -функции Вигнера

Перепишем немного иначе выражение (3.14), добавив разложение по промежуточному состоянию  $|jm'\rangle$  и обозначив получившийся матричный элемент оператора  $\hat{R}(\omega)$  как  $D_{m',m}^j(\alpha, \beta, \gamma)$ :

$$|\widetilde{j, m}\rangle = \sum_{m'} |jm'\rangle \langle jm' | \hat{R}(\omega) | j, m \rangle = \sum_{m'} |jm'\rangle D_{m',m}^j(\alpha, \beta, \gamma). \quad (4.1)$$

Таким образом, мы получили определение  $D$ -функции (матрицы конечных поворотов):

$$D_{m_1 m_2}^j(\alpha, \beta, \gamma) \equiv \langle jm_1 | e^{-i\alpha \hat{J}_z} e^{-i\beta \hat{J}_y} e^{-i\gamma \hat{J}_z} | jm_2 \rangle. \quad (4.2)$$

Данное определение можно переписать, подействовав правой и левой частями оператора на соответствующие части матричного элемента и введя обозначение *малой  $d$ -функции Вигнера*  $d_{m_1 m_2}^j(\beta) = \langle jm_1 | e^{-i\beta \hat{J}_y} | jm_2 \rangle$ :

$$D_{m_1 m_2}^j(\alpha, \beta, \gamma) \equiv e^{-i\alpha m_1} d_{m_1 m_2}^j(\beta) e^{-i\gamma m_2}. \quad (4.3)$$

Для  $D$ -функций справедливы следующие соотношения:

а) Унитарность:

$$\sum_m D_{m\mu}^{*j}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m\mu'}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \delta_{\mu\mu'}. \quad (4.4)$$

б) Соотношение ортогональности:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^\pi \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} d\alpha D_{m\mu}^{*j}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m'\mu'}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \\ = \frac{8\pi^2}{2j+1} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{\mu\mu'}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

в) Произведение  $D$ -функций одного аргумента:

$$\begin{aligned} D_{m_1 \mu_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m_2 \mu_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) = \\ \sum_{JM M'} (j_1 m_1, j_2 m_2 | J M) (j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | J M') D_{M M'}^J(\alpha, \beta, \gamma). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Доказательство:

С одной стороны,

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{m'_1 m'_2} D_{m'_1 m_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m'_2 m_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) |j_1 m'_1 j_2 m'_2\rangle. \quad (4.7)$$

с другой стороны:

$$\begin{aligned} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= \sum_{JM} (j_1 m_1, j_2 m_2 | JM) |(j_1 j_2) JM\rangle = \\ &= \sum_{JMM'} (j_1 m_1, j_2 m_2 | JM) |(j_1 j_2) JM'\rangle D_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \\ &= \sum_{JMM'\mu'_1 \mu'_2} (j_1 m_1, j_2 m_2 | JM) (j_1 \mu'_1, j_2 \mu'_2 | JM') \times \\ &\quad \times D_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma) |j_1 \mu'_1; j_2 \mu'_2\rangle. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Приравнивая правые части выражений (4.7) и (4.8) и умножая их слева на  $\langle j_1 \mu_1; j_2 \mu_2 |$ , получаем (4.6).

Существует соотношение, обратное к (4.6) – теорема о сложении  $D$ -функций:

$$\begin{aligned} D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \\ \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ m'_1 m'_2}} (j_1 m_1, j_2 m_2 | JM) (j_1 m'_1, j_2 m'_2 | JM') \times \\ \times D_{m_1 m'_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m_2 m'_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Это соотношение предлагается доказать самостоятельно в задаче 4.8.

Очевидно, что для малых  $d$ -функций соотношения (4.6) и (4.9) тоже выполняются ( $d_{m_1 m_2}^j(\beta) = D_{m_1 m_2}^j(\alpha = 0, \beta, \gamma = 0)$ ).

d) Последовательность поворотов на углы  $\omega_1 = (\alpha_1, \beta_1, \gamma_1)$  и  $\omega_2 = (\alpha_2, \beta_2, \gamma_2)$ :

$$D_{m_1 m_2}^j(\omega_1 \oplus \omega_2) = \sum_{\mu} D_{m_1 \mu}^j(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1) D_{\mu m_2}^j(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2). \quad (4.10)$$

е) Частные случаи с нулевыми проекциями:

$$D_{m0}^l(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}^*(\beta, \alpha), \quad (4.11)$$

$$D_{0\mu}^l(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l-\mu}(\beta, \gamma), \quad (4.12)$$

$$D_{00}^l(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l0}(\beta, \gamma) = P_l(\cos \beta). \quad (4.13)$$

ф) Свойства симметрии d-функций:

$$d_{m\mu}^j(\beta) = (-1)^{m-\mu} d_{-m-\mu}^j(\beta) = (-1)^{m-\mu} d_{\mu m}^j(\beta). \quad (4.14)$$

г) Интеграл от трех  $D$ -функций с одинаковыми аргументами:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^\pi \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} d\alpha D_{m\mu}^{*j}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m_1\mu_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m_2\mu_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) \\ &= \frac{8\pi^2}{2j+1} (j_1 m_1, j_2 m_2 | j m) (j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j \mu). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Это крайне важное свойство получается последовательным применением теоремы о сложении  $D$ -функций (4.6) и свойства ортогональности (4.5).

С помощью теоремы о сложении  $D$ -функций (4.9) функция любого ранга может быть выражена через  $D$ -функции ранга  $1/2$ . Последняя была найдена при решении задачи 1.21. А именно, поворот на угол  $\beta$  вокруг оси  $y$  осуществляется оператором:

$$\exp[-i\beta\hat{S}_y] = \hat{I} \cos \beta/2 - i\hat{\sigma}_y \sin \beta/2 = \begin{pmatrix} \cos \beta/2 & -\sin \beta/2 \\ \sin \beta/2 & \cos \beta/2 \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

С использованием теоремы о сложении (4.9) и выражения (4.16), можно получить рекуррентное соотношение, позволяющее вычислить  $d$ -функции любого ранга:

$$\begin{aligned} d_{\kappa q}^k(\theta) &= \sum (k^{-1/2} \kappa \mp 1/2, 1/2 \pm 1/2 | k \kappa) (k^{-1/2} q \mp 1/2, 1/2 \pm 1/2 | k q) \\ &\quad \times d_{\kappa \mp 1/2, q \mp 1/2}^{k-1/2}(\theta) d_{\pm 1/2 \pm 1/2}^{1/2}(\theta). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Сумма в (4.17) берется по проекциям  $\pm 1/2$ . В результате применения рекуррент-

ных соотношений  $D$ -функции можно выразить, например, через полиномы Якоби:

$$d_{m_1 m_2}^j(\beta) = \xi \left[ \frac{s!(s + \mu + \nu)!}{(s + \mu)!(s + \nu)!} \right]^{1/2} (\sin \beta/2)^\mu (\cos \beta/2)^\nu P_s^{\mu, \nu}(\cos \beta), \quad (4.18)$$

где  $\mu = |m_1 - m_2|$ ,  $\nu = |m_1 + m_2|$  и  $s = j - (\mu + \nu)/2$ , а множитель  $\xi = 1$ , если  $m_1 \leq m_2$  и  $\xi = (-1)^{m_2 - m_1}$ , если  $m_1 > m_2$ .

Приведем несколько соотношений, полезных при использовании полиномиального представления  $D$ -функций:

Полином Лежандра:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n. \quad (4.19)$$

Присоединенный полином Лежандра:

$$P_n^m(x) = (-1)^m (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x). \quad (4.20)$$

Сферическая гармоника:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (4.21)$$

Полином Якоби:

$$P_n^{a;b}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-a} (1+x)^{-b} \frac{d^n}{dx^n} (1-x)^a (1+x)^b (1-x^2)^n. \quad (4.22)$$

Производная полинома Якоби порядка  $k$ :

$$\frac{d^k}{dx^k} P_n^{a;b}(x) = \frac{\Gamma(a+b+k+n+1)}{2^k \Gamma(a+b+n+1)} P_{n-k}^{(a+k);(b+k)}(x). \quad (4.23)$$

Одним из фундаментальных опытов квантовой механики является эксперимент Штерна-Герлаха, показавший наличие у частиц собственного магнитного момента. Рассмотрим пучок частиц, распространяющийся в направлении оси  $y$  в присутствии градиента магнитного поля в направлении оси  $z$ . Если частицы нейтральные, то пучок расщепляется на  $2j + 1$  компоненту. Опыт рассматривается как одно из первых указаний на существование спина у частиц. Для заряженных

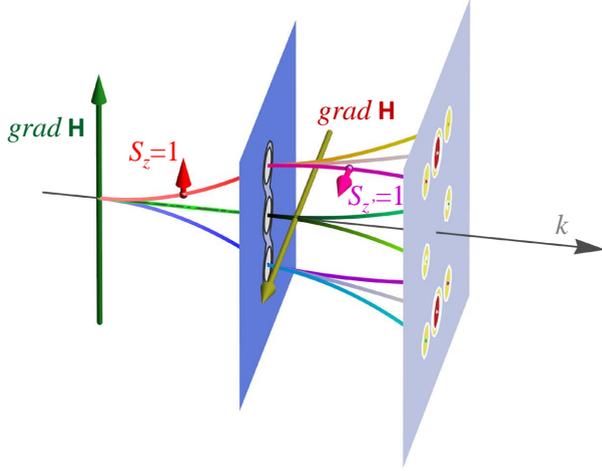


Рис. 4.1: Двойной опыт Штерна-Герлаха.

частиц пучок расщепляется на большее число компонент из-за взаимодействия заряда с магнитным полем.

Рассмотрим прохождение пучка частиц со спином  $\mathbf{1}$  через два прибора Штерна-Герлаха, ориентированных в направлении осей  $z$  и  $x$  (см. рис. 4.1). После прохождения первого прибора пучок расщеплен на состояния с определенной проекцией магнитного квантового числа на ось  $z$ :  $|1m\rangle$ . Для того, чтобы понять, как поведут себя эти частицы после прохождения второго прибора, повернем ось квантования в направлении оси  $z$ , то есть на углы Эйлера  $\{0, \pi/2, 0\}$ :

$$\begin{aligned} |\widetilde{11}\rangle &= \sum_{m'} d_{m'1}^1(\pi/2) |1m'\rangle = \frac{1}{2}|11\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle + \frac{1}{2}|1-1\rangle; \\ |\widetilde{10}\rangle &= \sum_{m'} d_{m'0}^1(\pi/2) |1m'\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1-1\rangle; \\ |\widetilde{1-1}\rangle &= \sum_{m'} d_{m'-1}^1(\pi/2) |1m'\rangle = \frac{1}{2}|11\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle + \frac{1}{2}|1-1\rangle. \end{aligned}$$

Обратите внимание, что состояния после поворота остаются ортонормированными.

Сферические гармоники  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  (4.11)–(4.12) являются собственными функциями квадрата оператора орбитального момента  $\hat{\mathbf{L}}^2$  и его проекции  $\hat{L}_z$ , введен-

ного в главе 1 (1.2) с собственными значениями  $l(l+1)$  и  $m$ , соответственно. Поэтому квадрат модуля сферической функции дает плотность вероятности распределения угловых координат частицы с определенными значениями  $l, m$ . Так, частица, находящаяся в состоянии  $l = 1, m = 0$ , имеет угловое распределение (вероятность быть обнаруженной в определенном направлении)  $\cos^2 \theta$  и локализована преимущественно около оси квантования. Для частицы  $l = 1, m = \pm 1$  угловое распределение  $\sin^2 \theta$ . Обратите внимание, что любое состояние с определенным значением орбитального момента и его проекции является аксиально симметричным.

Плоская волна, описывающая распространение частицы в направлении  $\mathbf{k}$  представляется в виде разложения по сферическим гармоникам:

$$\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\mathbf{n}_k) Y_{lm}(\mathbf{n}_r). \quad (4.24)$$

здесь  $j_l(kr)$  – сферическая функция Бесселя ранга  $l$ .

Если состояние системы описывается когерентной суперпозицией состояний с определенными значениями  $l, m$ :

$$|\Psi\rangle = \sum_{lm} \alpha_{lm} |lm\rangle, \quad (4.25)$$

то соответствующее угловое распределение:

$$\begin{aligned} W(\theta, \varphi) &= \sum_{\substack{lm \\ l'm'}} \alpha_{lm} \alpha_{l'm'} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) = \\ &= \sum_{\substack{kqlm \\ l'm'}} \alpha_{lm} \alpha_{l'm'} (-1)^{m'} \frac{\hat{l}'}{\sqrt{4\pi\hat{k}}} (l0, l'0 | k0)(lm, l' - m' | kq) Y_{kq}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Возникновение состояний, являющихся когерентной смесью, характерно для ионизации излучением с эллиптической поляризацией. Для распадов, чаще всего, проекция определена начальным и конечным состоянием ядра. Рассмотрим в качестве примера  $\alpha$ -распад ядра  $2^+, M_i = 0$  с образованием ядра  $1^-, M_f = 0$ . Испущенная  $\alpha$ -частица может иметь орбитальный момент  $l = 1, 3$  и только одну проекцию  $m = 0$ :

$$|\Psi\rangle = \alpha|10\rangle + \beta|30\rangle, \quad (4.27)$$

Угловое распределение такой частицы:

$$\begin{aligned}
W(\theta) &= \frac{1}{4\pi} \sum_k \left( 3|\alpha|^2 (10, 10 | k 0)^2 + 2\sqrt{21} \Re[\alpha\beta^*] (10, 30 | k 0)^2 + \right. \\
&\quad \left. + 7|\beta|^2 (30, 30 | k 0)^2 \right) P_k(\cos \theta) = \\
&= \frac{1}{4\pi} \left[ (|\alpha|^2 + |\beta|^2) + \left( 2|\alpha|^2 + \frac{4|\beta|^2}{3} + \frac{6\sqrt{21} \Re[\alpha\beta^*]}{7} \right) P_2(\cos \theta) + \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{18|\beta|^2}{11} + \frac{8\sqrt{21} \Re[\alpha\beta^*]}{7} \right) P_4(\cos \theta) + \frac{100|\beta|^2}{33} P_6(\cos \theta) \right]. \quad (4.28)
\end{aligned}$$

Отсутствие в угловом распределении полиномов Лежандра нечетных рангов характерно для распадов с сохранением пространственной четности.

Важно напомнить, что в соответствии с базовыми принципами квантовой механики, суммирование по ненаблюдаемым величинам производится *некогерентно*. Например, при распаде ядра с определенной проекцией  $M_i$  конечное ядро может оказаться в состояниях с различной проекцией  $M_f$ , и коэффициенты  $\alpha_{lm}$  в (4.26) пропорциональны коэффициентам Клебша-Гордана  $(J_f M_f, l m | J_i M_i)$ , но при суммировании  $M_f$  принимает одно и тоже значение в  $\alpha_{lm}$  и в  $\alpha_{l'm'}$ .

Если в процессе испускается несколько частиц, то их угловое распределение трансформируется в *функцию угловой корреляции* – вероятность обнаружить вторую частицу под некоторым углом  $\{\theta_2, \varphi_2\}$ , если первая частица обнаружена под углом  $\{\theta_1, \varphi_1\}$ . Тривиальным примером угловой корреляции является двух-частичный распад, когда фрагменты всегда летят в противоположных направлениях. Рассмотрим функцию угловой корреляции для цепочки из двух  $\alpha$ -распадов  $2^+ \rightarrow 1^- \rightarrow 0^+$  для проекции момента исходного ядра  $M_0 = 2$  и 1, считая, что оба раза  $\alpha$ -частица испускается с  $l = 1$  и пренебрегая импульсом отдачи. Для начальной проекции  $M_0 = 2$  оба перехода происходят с  $m_{l,1} = m_{l,2} = 1$  и тогда:

$$\mathcal{F}(\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) = Y_{11}(\theta_1, \varphi_1) Y_{11}(\theta_2, \varphi_2) Y_{11}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{11}^*(\theta_2, \varphi_2) \sim \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2. \quad (4.29)$$

Для начального состояния  $M_0 = 1$  только один из переходов происходит с изме-

нением проекции, а второй ее сохраняет:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) &= \frac{1}{2} \left( Y_{11}(\theta_1, \varphi_1) Y_{10}(\theta_2, \varphi_2) + Y_{10}(\theta_1, \varphi_1) Y_{11}(\theta_2, \varphi_2) \right) \times \\ &\times \left( Y_{11}(\theta_1, \varphi_1) Y_{10}(\theta_2, \varphi_2) + Y_{10}(\theta_1, \varphi_1) Y_{11}(\theta_2, \varphi_2) \right)^* \sim \quad (4.30) \\ &\sim \sin^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + \cos^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 + \frac{1}{2} \sin 2\theta_1 \sin 2\theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2). \end{aligned}$$

В этом случае функция угловой корреляции уже не является произведением угловых распределений двух частиц и даже теряет аксиальную симметрию.

---

## Задачи к главе 4

- 4.1. Доказать соотношение (4.4). (1 балл\*)
- 4.2. Рассмотреть прохождение пучка частиц со спином  $3/2$  через систему из двух приборов Штерна-Герлаха, ориентированных перпендикулярно. (1 балл, по 0.25 балла за ответ)
- 4.3. Для углов  $(\pi/2, -\arcsin 1/\sqrt{3}, 0)$  (один из ответов задачи 3.4) получить вид  $|10\rangle$ ,  $|11\rangle$  и  $|20\rangle$ ,  $|22\rangle$ . (2 балла, по 0.5 балла за ответ)
- 4.4. Проверить выполнение свойства ортогональности (4.5), используя представление  $d$ -функций через полиномы Якоби и их ортогональность (2 балла):

$$\begin{aligned} &\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta P_n^{\alpha;\beta}(x) P_m^{\alpha;\beta}(x) dx = \\ &= \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(n+1)\Gamma(n+\alpha+\beta+1)} \delta_{nm}. \quad (4.31) \end{aligned}$$

- 4.5. Доказать свойства симметрии  $d$ -функций (4.14). (1 балл)
- 4.6. Используя свойства  $D$ -функций, получить формулу для произведения двух сферических функций с одинаковыми аргументами (1 балл\*):

$$\begin{aligned} Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) &= \quad (4.32) \\ &= \frac{\hat{l}_1 \hat{l}_2}{\sqrt{4\pi}} \sum_l \hat{l}^{-1} (l_1 0, l_2 0 | l 0) (l_1 m_1, l_2 m_2 | l m) Y_{lm}(\theta, \phi). \end{aligned}$$

- 4.7. Получить соотношения (4.11) – (4.13).  
(1 балл за 4.11, по 0.5 балла за 4.12 и 4.13)
- 4.8. Доказать соотношение (4.9). (1 балл)
- 4.9. Считая известными  $d$ -функции ранга  $1/2$ , вывести  $d$ -функции единичного ранга. (1 балл, по 0.25 за функцию)
- 4.10. Считая известными  $d$ -функции единичного ранга, вывести сферические гармоники второго ранга. (1.25 балла, по 0.25 за функцию\*)
- 4.11. Представить произведение двух  $Y$ -функций ( $Y_{21}(\theta, \varphi)$  и  $Y_{10}(\theta, \varphi)$ ) в виде разложения по  $Y$ -функциям. (1 балл)
- 4.12. Представить произведение двух полиномов Лежандра 2 и 5 рангов в виде суммы по полиномам Лежандра. (1 балл)
- 4.13. Показать, что  $d$ -функции вида  $d_{\pm j \pm j}^j$  ( $j \in \mathcal{N}$ ) могут быть представлены через  $d$ -функции с нулевой проекцией.  
Например,  $d_{22}^2(\theta) = \frac{1}{3} + \frac{1}{2}d_{00}^1(\theta) + \frac{1}{6}d_{00}^2(\theta)$ . (1 балл)
- 4.14. Найти  $d_{mm'}^j(0)$  и  $d_{mm'}^j(\pi)$ . (1 балл)
- 4.15. После поворота на некоторые углы Эйлера собственные вектора момента  $\mathbf{1}$  трансформировались следующим образом:

$$\begin{aligned}
 |\widetilde{11}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}|11\rangle + \sqrt{\frac{5}{6}}|1-1\rangle; \\
 |\widetilde{10}\rangle &= -\sqrt{\frac{5}{12}}|11\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle + \frac{1}{\sqrt{12}}|1-1\rangle.
 \end{aligned}$$

Определить вид  $|\widetilde{1-1}\rangle$  в повернутой системе координат. (2 балла)

- 4.16. Найти распределение направлений импульсов частицы в состоянии  $|lm\rangle$ .  
(2 балла)
- 4.17. Ядро распадается из состояния  $|JM\rangle$ , с определенным значением углового момента и его проекции на некоторую ось, и испускает  $\alpha$ -частицу с моментом  $l$ . Найти угловое распределение  $\alpha$ -частиц, просуммировав по всем возможным ориентациям момента остаточного ядра  $J_f$ : (а)  $J = 2, M = 2, l = 2, J_f = 0$ ; (б)  $J = 2, M = 2, l = 2, J_f = 2$ . (1 балл за (а)\*, 2 балла за (б))

- 4.18. Ядро с моментом  $J_0 = 0$ , испускает  $\alpha$ -частицу и переходит в ядро с  $J_1 = 1$ , которое в свою очередь, испускает  $\alpha$ -частицу и переходит в ядро  $J_2 = 0$ . Определить функцию угловой корреляции для двух вылетевших  $\alpha$ -частиц. Эффектами отдачи пренебречь. (3 балла)
- 4.19. Волновая функция частицы с  $s = 1/2$  представляется в виде линейной комбинации состояний с определенным значением проекции момента  $\Psi = \alpha|1/2, 1/2\rangle + \beta|1/2, -1/2\rangle$ . Показать, что существует система координат, в которой данная частица имеет определенную проекцию спина. (1 балл)

## Таблица $D$ -функций

$d_{1/2,1/2}^{1/2} = \cos \frac{\theta}{2}$	$d_{1/2,-1/2}^{1/2} = -\sin \frac{\theta}{2}$	
$d_{00}^1 = \cos \theta$		
$d_{11}^1 = \frac{1}{2}(1 + \cos \theta)$	$d_{10}^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta$	$d_{1-1}^1 = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta)$
$d_{3/2,3/2}^{3/2} = \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) \cos \frac{\theta}{2}$	$d_{3/2,1/2}^{3/2} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \cos \frac{\theta}{2} \sin \theta$	$d_{1/2,1/2}^{3/2} = \frac{1}{2}(3 \cos \theta - 1) \cos \frac{\theta}{2}$
$d_{3/2,-3/2}^{3/2} = -\frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \sin \frac{\theta}{2}$	$d_{3/2,-1/2}^{3/2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \frac{\theta}{2} \sin \theta$	$d_{1/2,-1/2}^{3/2} = -\frac{1}{2}(3 \cos \theta + 1) \sin \frac{\theta}{2}$
$d_{22}^2 = \frac{1}{4}(1 + \cos \theta)^2$	$d_{21}^2 = -\frac{1}{2}(1 + \cos \theta) \sin \theta$	$d_{20}^2 = \frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \theta$
$d_{2-2}^2 = \frac{1}{4}(1 - \cos \theta)^2$	$d_{2-1}^2 = -\frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \sin \theta$	
$d_{11}^2 = \frac{1}{2}(2 \cos^2 \theta + \cos \theta - 1)$	$d_{10}^2 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta$	$d_{1-1}^2 = -\frac{1}{2}(2 \cos^2 \theta - \cos \theta - 1)$
$d_{00}^2 = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$		

## Глава 5 $6j$ -символы

Суммирование трех моментов  $\hat{j}_1, \hat{j}_2, \hat{j}_3$  в полный момент системы  $\mathbf{J}$  с проекцией  $M$  можно произвести различными способами, которые будут отличаться схемами сложения. Например, мы можем сложить два момента  $\hat{j}_1, \hat{j}_2$  в промежуточный момент  $\mathbf{J}_{12}$  и прибавить к нему момент  $\hat{j}_3$ . Или по-другому: прибавить момент  $\hat{j}_1$  к уже сложенным моментам  $\hat{j}_2, \hat{j}_3$  в промежуточный момент  $\mathbf{J}_{23}$  (рис. 5.1). Построенные таким образом вектора состояний  $|j_1 j_2(J_{12}), j_3 : JM\rangle$  и  $|j_1, j_2 j_3(J_{23}) : JM\rangle$  будут связаны друг с другом следующим унитарным преобразованием:

$$\begin{aligned} |j_1, j_2 j_3(J_{23}) : JM\rangle &= \\ &= \sum_{J_{12}} \langle j_1 j_2(J_{12}), j_3 : J | j_1, j_2 j_3(J_{23}) : J \rangle |j_1 j_2(J_{12}), j_3 : JM\rangle, \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} |j_1 j_2(J_{12}), j_3 : JM\rangle &= \\ &= \sum_{J_{23}} \langle j_1 j_2(J_{12}), j_3 : J | j_1, j_2 j_3(J_{23}) : J \rangle |j_1, j_2 j_3(J_{23}) : JM\rangle, \end{aligned} \quad (5.2)$$

где коэффициенты  $\langle j_1 j_2(J_{12}), j_3 : J | j_1, j_2 j_3(J_{23}) : J \rangle \equiv U(j_1 j_2 J j_3; J_{12} J_{23})$  с точностью до множителя совпадают с  $6j$ -символами Вигнера:

$$\langle j_1 j_2(J_{12}), j_3 : J | j_1, j_2 j_3(J_{23}) : J \rangle = (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \hat{J}_{12} \hat{J}_{23} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{matrix} \right\}. \quad (5.3)$$

Кроме  $6j$ -символов в литературе встречаются также коэффициенты Рака, отличающиеся от первых лишь фазовым множителем:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{matrix} \right\} = (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} W(j_1 j_2 J j_3; J_{12} J_{23}). \quad (5.4)$$

$6j$ -символы обладают свойством ортогональности, которое предлагается доказать в задаче 5.3:

$$\sum_{J_{12}} \hat{J}_{12}^2 \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J'_{23} \end{matrix} \right\} = \frac{\delta_{J_{23} J'_{23}}}{\hat{J}_{23}^2}. \quad (5.5)$$

В приведенной записи (5.3)  $6j$ -символа совершенно очевидно, какие векторы

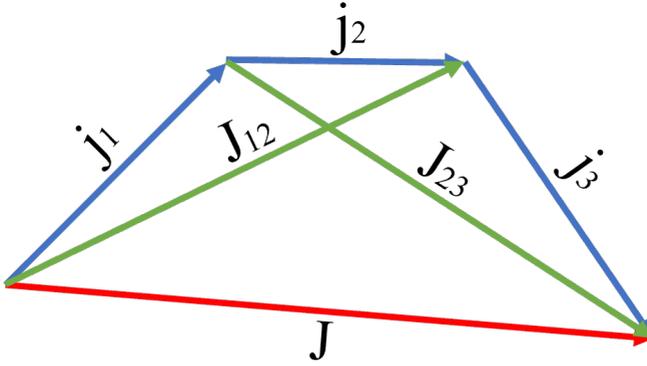


Рис. 5.1: Различные способы сложения моментов  $j_1, j_2, j_3$  в полный момент системы  $J$  (схемы связи).

должны удовлетворять правилу треугольника:  $\{j_1 j_2 J_{12}\}$ ,  $\{j_2 j_3 J_{23}\}$ ,  $\{j_1 J_{23} J\}$  и  $\{j_{12} j_3 J\}$ .

$6j$ -символы инвариантны относительно любой, не обязательно циклической, перестановки столбцов и перестановки любых двух элементов верхней строки с соответствующими двумя нижними. Например:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} j_1 & J_{12} & j_2 \\ j_3 & J_{23} & J \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} j_3 & j_2 & J_{23} \\ j_1 & J & J_{12} \end{matrix} \right\} \dots \quad (5.6)$$

Можно получить выражение для  $6j$ -символа через коэффициенты Клебша—Гордана:

$$\begin{aligned} & (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \hat{J}_{12} \hat{J}_{23} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & J & J_{23} \end{matrix} \right\} = \\ & = \sum_{\substack{m_1 m_2 m_3 \\ M_{12} M_{23}}} (j_1 m_1, j_2 m_2 | J_{12} M_{12})(J_{12} M_{12}, j_3 m_3 | J M) \times \\ & \quad \times (j_1 m_1, J_{23} M_{23} | J M)(j_2 m_2, j_3 m_3 | J_{23} M_{23}). \end{aligned} \quad (5.7)$$

Также можно воспользоваться онлайн-ресурсами для расчета  $6j$ -символов (на-

пример, [17]) или пакетами функций для стандартных языков программирования (например, для **MATLAB** [16]).

6j-символы используются, в частности, для суммирования произведений коэффициентов Клебша–Гордана. Большое количество таких формул суммирования можно найти в [5] (параграфы 8.7.1–8.7.5 и приложения) или в [4] (приложения А.89–А.91). Для примера выведем одну из формул суммирования (А.89 [4]). Последовательно разлагая волновую функцию трех частиц через три одночастичные функции, и группируя в другом порядке, получаем:

$$\begin{aligned}
 & |j_1 j_2(J_{12}), j_3 : JM\rangle = \\
 & = \sum_{m_1 m_2 M_{12} m_3} (j_1 m_1, j_2 m_2 | J_{12} M_{12})(J_{12} M_{12}, j_3 m_3 | JM) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle = \\
 & = \sum_{\substack{m_1 m_2 M_{12} m_3 \\ J_{23} M_{23} J' M'}} (j_1 m_1, j_2 m_2 | J_{12} M_{12})(J_{12} M_{12}, j_3 m_3 | JM) \times \\
 & \quad \times (j_1 m_1, J_{23} M_{23} | J' M')(j_2 m_2, j_3 m_3 | J_{23} M_{23}) |j_1, (j_2 j_3) J_{23} : J' M'\rangle
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

Умножим выражение (5.8) на  $(J_{12} M'_{12}, j_3 m'_3 | JM)$  и возьмем сумму по  $\sum_{JM}$ . Тогда, используя свойство ортонормированности коэффициентов Клебша–Гордана (переобозначая  $M'_{12} \rightarrow M_{12}$  и  $m'_3 \rightarrow m_3$ ), получаем

$$\begin{aligned}
 & \sum_{JM} |j_1 j_2(J_{12}), j_3 : JM\rangle (J_{12} M_{12}, j_3 m_3 | JM) = \\
 & = \sum_{\substack{m_1 m_2 M_{23} \\ J_{23} J' M'}} (j_1 m_1, j_2 m_2 | J_{12} M_{12})(j_1 m_1, J_{23} M_{23} | J' M') \times \\
 & \quad \times (j_2 m_2, j_3 m_3 | J_{23} M_{23}) |j_1, j_2 j_3(J_{23}) : J' M'\rangle.
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

Умножив теперь левую и правую части (5.9) на  $\langle j_1, j_2 j_3(J_{23}) : \bar{J} \bar{M} |$ , получаем:

$$\begin{aligned}
 & (-1)^{j_1+j_2+j_3+J} \hat{J}_{12} \hat{J}_{23} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ & j_3 & J_{23} \end{matrix} \right\} (J_{12} M_{12}, j_3 m_3 | JM) \\
 & = \sum_{m_1 m_2 M_{23}} (j_1 m_1, j_2 m_2 | J_{12} M_{12})(j_1 m_1, J_{23} M_{23} | JM)(j_2 m_2, j_3 m_3 | J_{23} M_{23}),
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

При выводе выражения (5.10) был использован стандартный прием переноса коэффициента Клебша–Гордана из одной части равенства в другую с примене-

нием свойства ортонормированности. Пусть имеется следующее соотношение

$$\sum_{m_1 m_2} f(j_1, m_1, j_2, m_2)(j_1 m_1, j_2 m_2 | JM) = F(j_1, j_2, J, M), \quad (5.11)$$

где  $f(j_1, m_1, j_2, m_2)$  и  $F(j_1, j_2, J, M)$  – некоторые функции моментов и проекций, как правило, комбинации различных  $nj$ -символов. Умножим обе части выражения на  $(j_1 m'_1, j_2 m'_2 | JM)$  и просуммируем по  $J, M$ :

$$\begin{aligned} \sum_{JM} \sum_{m_1 m_2} f(j_1, m_1, j_2, m_2)(j_1 m_1, j_2 m_2 | JM)(j_1 m'_1, j_2 m'_2 | JM) \\ = \sum_{JM} F(j_1, j_2, J, M)(j_1 m'_1, j_2 m'_2 | JM), \end{aligned} \quad (5.12)$$

Используя свойство ортонормированности коэффициентов Клебша–Гордана и переобозначая  $m'_1 \rightarrow m_1, m'_2 \rightarrow m_2$ , получаем:

$$f(j_1, m_1, j_2, m_2) = \sum_{JM} F(j_1, j_2, J, M)(j_1 m_1, j_2 m_2 | JM). \quad (5.13)$$

Важным примером применения  $6j$ -символов является переход между различными схемами связи. Тип связи в атомах определяется соотношением величины кулоновского взаимодействия, спин-орбитального и спин-спинового. Примеры расчетов матричных элементов соответствующих операторов приведены в задачах главы 7 (7.11, 7.7, 7.10).

Спин-орбитальное расщепление состояний легких атомов, как правило, хорошо описывается в **LS-схеме связи**, в которой сначала связываются все орбитальные моменты электронов в полный орбитальный момент  $\mathbf{L} = \sum_k \mathbf{l}_k$ , а их спины – в полный спин  $\mathbf{S} = \sum_k \mathbf{s}_k$ , и затем суммарный орбитальный момент и суммарный спин связываются в полный момент  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ .

Спин-орбитальное расщепление состояний тяжелых атомов лучше описывается в  **$j\dot{j}$ -схеме связи**, в которой орбитальный момент и спин электронов сначала связываются друг с другом  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ , а потом полные моменты  $\mathbf{j}$  отдельных частиц – в полный момент системы  $\mathbf{J} = \sum_k \mathbf{j}_k$ .

Для некоторых атомов из “середины” таблицы Менделеева лучше использовать **промежуточную  $jK$ -схему связи**, если в них можно отделить кор (группу тесно связанных электронов) и один отдаленный электрон. В этой схеме связи

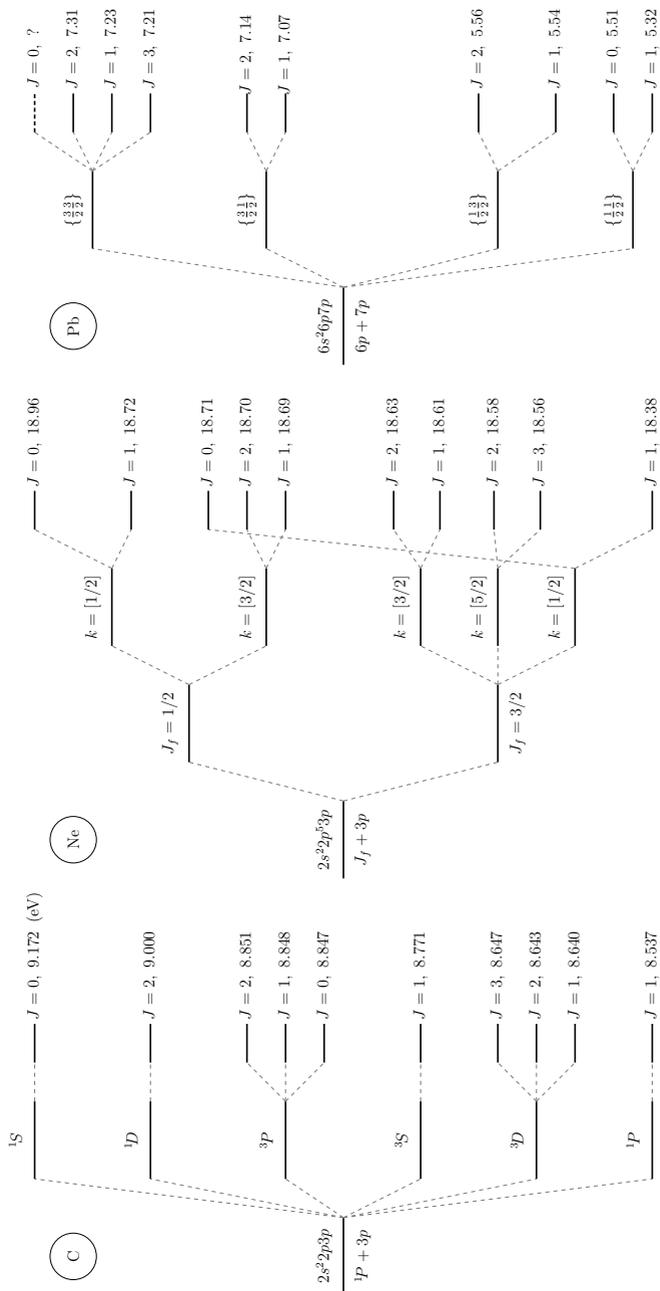


Рис. 5.2: Возбужденные уровни углерода с конфигурацией  $2s^2 2p^2 3p$  лучше всего описываются в  $LS$ -схеме связи, возбужденные уровни неона с конфигурацией  $2s^2 2p^5 3p$  лучше всего описываются в  $JK$ -схеме связи, а возбужденные уровни свинца с конфигурацией  $6s^2 6p^7 7p$  лучше всего описываются в  $jj$ -схеме связи. Данные взяты из NIST [18].

орбитальный момент одного выделенного электрона связывается с полным моментом оставшихся электронов (кором)  $\mathbf{J}_f$  в новое квантовое число  $\mathbf{K} = \mathbf{J}_f + \mathbf{l}$ , а затем добавляется спин отдельного электрона, формируя полный момент системы  $\mathbf{J} = \mathbf{k} + \frac{1}{2}$ . Для формул перехода см. задачи 5.6-5.7.

Однако полное число наблюдаемых уровней, которым можно приписать определенную энергию, не зависит от схемы связи. Так, число уровней с конфигурациями  $2s^2 2p3p$  и  $2s^2 2p^5 3p$  в углероде и неоне (рис. 5.2), термы которых можно получить, рассматривая одинаковую электронную конфигурацию  $2p3p$  (дырка в  $2p$ -оболочке ведет себя, как один  $2p$  электрон) в  $LS$ - и  $jK$ -схемах связи, одинаково. То же число уровней с конфигурацией  $6s^2 6p7p$  в свинце, которая отличается от таковой для углерода только главным квантовым числом, но лучше всего описывается уже в  $jj$ -схеме связи.

## Задачи к главе 5

- 5.1. С помощью  $6j$ -символов выразить волновые функции вида  $|j_1 j_2 (J_{12}), j_3 : J\rangle$  через волновые функции, отвечающие следующим схемам связи:
  - a)  $j_1 + (j_2 + j_3)$ , b)  $j_1 + (j_3 + j_2)$ , c)  $(j_2 + j_3) + j_1$ ,
  - d)  $j_2 + (j_3 + j_1)$ , e)  $j_2 + (j_1 + j_3)$ , f)  $(j_3 + j_1) + j_2$ ,
  - g)  $j_3 + (j_1 + j_2)$ , h)  $j_3 + (j_2 + j_1)$ , i)  $(j_2 + j_1) + j_3$ .
 (3 балла\*)
- 5.2. Вывести связь между  $6j$ -символом и коэффициентами Клебша—Гордана — выражение (5.7). (2 балла\*)
- 5.3. Получить свойство ортогональности (5.5). (1 балл)
- 5.4. Две частицы имеют спин  $1/2$  и  $3/2$ , соответственно. Орбитальный момент первой частицы относительно второй 1, а ее полный момент равен  $3/2$ . Полный момент системы 2. Разложить волновую функцию системы по состояниям с определенным спином. (1 балл)
- 5.5. Спин-четность ядра  ${}_{13}^{28}\text{Al}$  в основном состоянии  $3^+$ . В одночастичной модели оболочек разложить волновую функцию двух неспаренных нуклонов в данном изотопе по состояниям с их определенным суммарным спином. (1 балл)
- 5.6. Осуществите переход между  $jj$ - и  $jK$ -схемами связи. (2 балла)

- 5.7. Осуществите переход между  $LS$ - и  $jK$ -схемами связи. (2 балла)
- 5.8. Некоторые авторы вместо  $LS$ -схемы связи используют  $SL$ -схему связи, в которой порядок связи полного орбитального момента и полного спина системы в ее полный момент  $J$  обратный. Какие поправки необходимо сделать при использовании полученных ими результатов? (0.5 балла)
- 5.9. Пользуясь результатом задачи 5.7, представьте возбужденные уровни неона на  $2s^2 2p^5 ({}^2P_{1/2}) 4s [1/2]_1$  и  $2s^2 2p^5 ({}^2P_{3/2}) 4s [3/2]_1$  в виде разложения по  $LS$ -термам. (1 балл)
- 5.10. На основе (5.7) получить формулу для  $6j$ -символа с нулевым моментом:

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & 0 \end{Bmatrix} = \delta_{ae} \delta_{bd} \frac{(-1)^{a+b+c}}{\hat{a}\hat{b}}. \quad (5.14)$$

(1 балл)

- 5.11. Получить формулу пересвязки для двух коэффициентов Клебша—Гордана ([5] стр. 533):

$$\begin{aligned} & \sum_{\kappa} \frac{(-1)^{b-a+\kappa}}{2q+1} (a \alpha, b \beta | q \kappa) (c \gamma, d \delta | q - \kappa) = \\ & = \sum_{x, \xi} (-1)^{c+a+\xi} (a \alpha, c \gamma | x \xi) (b \beta, d \delta | x - \xi) \begin{Bmatrix} a & b & q \\ d & c & x \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

(2 балла\*)

- 5.12. Вывести формулу суммирования:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha, \beta, \delta} (-1)^{a-\alpha} (a \alpha, b \beta | c \gamma) (d \delta, b \beta | e \epsilon) (d \delta, a - \alpha | f \phi) \\ & = (-1)^{b+c+d+f} \hat{c} \hat{f} (c \gamma, f \phi | e \epsilon) \begin{Bmatrix} a & b & c \\ e & f & d \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

(2 балла)

- 5.13. Используя перестановочные соотношения, поместить  $a$  на место  $c$  и  $d$ :

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix}.$$

(1 балл\*)

- 5.14. Сколько  $6j$ -символов тождественно равны некоторому исходному  $6j$ -символу с шестью разными моментами? (1 балл)

## Глава 6 $9j$ -символы

Как и в случае с тремя моментами, существуют различные способы (схемы) сложения четырех моментов  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{j}_2$ ,  $\mathbf{j}_3$  и  $\mathbf{j}_4$  в полный момент системы  $\mathbf{J}$  с проекцией  $M$ . Соответствующие векторы состояния будут выглядеть следующим образом:

- a)  $|j_1 j_2(J_{12}), j_3, j_4(J_{34}) : JM\rangle$ ,
- b)  $|j_1 j_3(J_{13}), j_2, j_4(J_{24}) : JM\rangle$ ,
- c)  $|j_1 j_4(J_{14}), j_2, j_3(J_{23}) : JM\rangle$ .

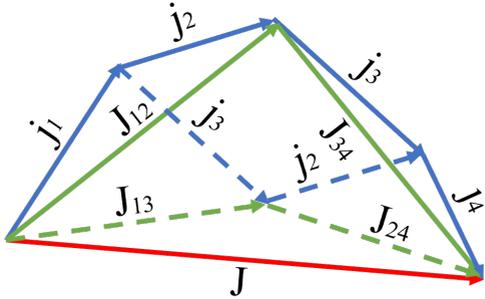


Рис. 6.1: Различные способы сложения моментов  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{j}_2$ ,  $\mathbf{j}_3$ ,  $\mathbf{j}_4$  в полный момент системы  $\mathbf{J}$  (схемы связи).

Коэффициент перехода от одной схемы связи к другой выражается через  $9j$ -символ Вигнера. Например, осуществим переход от схемы сложения а) к схеме б):

$$\begin{aligned}
 & |j_1 j_2(J_{12}), j_3 j_4(J_{34}) : JM\rangle = \\
 & = \sum_{J_{13} J_{24}} \langle j_1 j_2(J_{12}), j_3 j_4(J_{34}) : J | j_1 j_3(J_{13}) j_2 j_4(J_{24}) : J \rangle |j_1 j_3(J_{13}), j_2 j_4(J_{24}) : JM\rangle \\
 & = \sum_{J_{13} J_{24}} \hat{J}_{12} \hat{J}_{34} \hat{J}_{13} \hat{J}_{24} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} |j_1 j_3(J_{13}), j_2 j_4(J_{24}) : JM\rangle.
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

$9j$ -символ может быть представлен в виде суммы произведений шести коэф-

фициентов Клебша–Гордана:

$$\begin{aligned} & \hat{J}_{12} \hat{J}_{34} \hat{J}_{13} \hat{J}_{24} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\} = & (6.2) \\ & = \sum_{m_i M_{kl}} (j_1 m_1, j_2 m_2 | J_{12} M_{12})(j_3 m_3, j_4 m_4 | J_{34} M_{34})(J_{12} M_{12}, J_{34} M_{34} | J M) \\ & \quad (j_1 m_1, j_3 m_3 | J_{13} M_{13})(j_2 m_2, j_4 m_4 | J_{24} M_{24})(J_{13} M_{13}, J_{24} M_{24} | J M), \end{aligned}$$

где суммирование производится по проекциям всех моментов.

В  $9j$ -символе каждая строка и столбец удовлетворяют правилу треугольника.  $9j$ -символ инвариантен относительно циклической перестановки строк или столбцов, а также относительно транспонирования. При нециклической перестановке добавляется фаза  $(-1)^{\sum J}$ , где  $\sum J$  – сумма (арифметическая) всех моментов, присутствующих в  $9j$ -символе.

Рассмотрев три последовательные пересвязки моментов:

$|j_1 j_2(J_{12}), j_3 j_4(J_{34}) : J\rangle \longrightarrow |j_1, j_2 J_{34}(J_{234}) : J\rangle \longrightarrow |j_1 j_3(J_{13}), j_2 j_4(J_{24}) : J\rangle$ , можно представить  $9j$ -символ как сумму произведений трех  $6j$ -символов:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{array} \right\} = \sum_x \hat{x}^2 (-1)^{2x} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J_{12} \\ J_{34} & J & x \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} J_{34} & j_3 & j_4 \\ J_{24} & j_2 & x \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} J_{24} & J & J_{13} \\ j_1 & j_3 & x \end{array} \right\}. \quad (6.3)$$

Чаще всего потребность в использовании  $9j$ -символа возникает, когда нужно перейти от  $jj$ -связи к  $LS$ -связи или наоборот:

$$|l_1 s_1(j_1), l_2 s_2(j_2) : JM\rangle = \sum_{LS} \hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{L} \hat{S} \left\{ \begin{array}{ccc} l_1 & s_1 & j_1 \\ l_2 & s_2 & j_2 \\ L & S & J \end{array} \right\} |l_1 l_2(L), s_1 s_2(S) : JM\rangle. \quad (6.4)$$

$$|l_1 l_2(L), s_1 s_2(S) : JM\rangle = \sum_{j_1 j_2} \hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{L} \hat{S} \left\{ \begin{array}{ccc} l_1 & l_2 & L \\ s_1 & s_2 & S \\ j_1 & j_2 & J \end{array} \right\} |l_1 s_1(j_1), l_2 s_2(j_2) : JM\rangle. \quad (6.5)$$

## Задачи к главе 6

- 6.1. Основное состояние ядра  $^{14}\text{N}$  обладает спин-четностью  $1^+$ . Разложить волновую функцию двух неспаренных нуклонов в данном ядре, записанную в терминах  $\mathbf{j}\mathbf{j}$ -связи, в базисе  $\mathbf{L}\mathbf{S}$ -связи. (1 балл)
- 6.2. Разложить волновую функцию системы двух частиц  $np_{3/2}, n'p_{3/2}$  по состояниям с определенными значениями полного орбитального и спинового момента  $LS$  для всех возможных значений полного момента системы  $J$ . (2 балла)
- 6.3. Разложить волновую функцию системы двух частиц  $nd_{3/2}, n'p_{3/2}$  по состояниям с определенными значениями полного орбитального и спинового момента  $L, S$ , для всех возможных значений полного момента системы  $J$ . (2 балла)
- 6.4. При каком ограничении на моменты  $9j$ -символ с тремя одинаковыми строчками отличен от нуля? (1 балл\*)
- 6.5. Показать, что  $9j$ -символ с нулевым моментом вырождается в  $6j$ -символ:

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & 0 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{j_2+j_3+J_{13}+J_{12}}}{\hat{J}_{12}\hat{J}_{13}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_4 & j_3 & J_{13} \end{Bmatrix} \delta_{J_{12}J_{34}} \delta_{J_{13}J_{24}}. \quad (6.6)$$

(2 балла\*)

- 6.6. Вывести свойство ортогональности  $9j$ -символов:

$$\sum_{xy} \hat{x}^2 \hat{y}^2 \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & x \\ j_3 & j_4 & y \\ p & q & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & x \\ j_3 & j_4 & y \\ p' & q' & J \end{Bmatrix} = \delta_{pp'} \delta_{qq'} \frac{1}{\hat{p}^2 \hat{q}^2}. \quad (6.7)$$

(1 балл\*)

- 6.7. Используя перестановочные соотношения, поместить  $a$  на место  $c$ ,  $f$  и  $j$ :

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & j \end{Bmatrix}. \quad (6.8)$$

(по 0.25 балла за ответ\*)

6.8. Сколько  $9j$ -символов тождественно равны данному? Сколько равны ему с обратным знаком? (по 0.5 балла за ответ)

## Глава 7 Неприводимые тензорные операторы и теорема Вигнера-Эккарта

Неприводимым тензорным оператором  $\hat{T}_k$  ранга  $k$  называется совокупность  $2k + 1$  компонент  $\hat{T}_{kq}$  ( $q = -k, -k + 1, \dots, k - 1, k$ ), преобразующихся при поворотах системы координат так же, как собственные функции оператора углового момента:

$$\tilde{\hat{T}}_{kq} = \sum_{q'=-k}^k D_{q'q}^j \hat{T}_{kq'}. \quad (7.1)$$

Примерами неприводимых тензорных операторов являются:

- Единичный оператор  $I$  – неприводимый тензорный оператор 0 ранга.
- Операторы угловых моментов  $\hat{L}$ ,  $\hat{S}$  и  $\hat{J}$  – неприводимые тензорные операторы 1-го ранга (векторы).
- Операторы квадратов угловых моментов  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{S}^2$  и  $\hat{J}^2$  – неприводимые тензорные операторы нулевого ранга.
- Сферические функции  $Y_{lm}$  – компоненты неприводимого тензорного оператора ранга  $l$ .
- $T_{LM}$  – поляризационные операторы ранга  $L$ . Этими операторами описывается, например, поглощение фотона мультипольности  $L$  и магнитного числа  $M$ .
- Спиновые функции частицы со спином  $S$ .
- Символ Леви-Чевиты – неприводимый тензорный оператор 3-го ранга.

Упомянутые в главе 2 параметры ориентации (2.25) и выстроенности (2.26) являются частным случаем, точнее одной выбранной проекцией поляризационных операторов первого и второго рангов.

Неприводимое тензорное произведение двух неприводимых тензоров

$$\{U_{j_1} \otimes V_{j_2}\}_{jm} = \sum_{m_1 m_2} (j_1 m_1, j_2 m_2 | j m) U_{j_1 m_1} V_{j_2 m_2}. \quad (7.2)$$

Не стоит путать неприводимое тензорное произведение с прямым (обычным) тензорным произведением, которое обозначается тем же символом  $\otimes$  и

$(2j_1 + 1) \cdot (2j_2 + 1)$  компонент которого представляют из себя попарные произведения элементов исходных тензоров  $U_{j_1 m_1} \cdot V_{j_2 m_2}$ .

Скалярное произведение тензоров одинакового ранга определяется как

$$(U \cdot V) = \sum_m (-1)^{-m} U_{jm} V_{j-m} = \sum_m U_{jm} V_{jm}^*. \quad (7.3)$$

Скалярное произведение и тензорное произведение ранга 0 отличаются множителем, см. задачу 7.3. Вектора являются неприводимыми тензорными операторами первого ранга. Скалярное произведение тензоров первого ранга совпадает со скалярным произведением векторов

$$(U_1 \cdot V_1) = (\mathbf{A}\mathbf{B}). \quad (7.4)$$

Дифференциальные операции могут быть представлены в виде тензорных произведений операторов первого ранга:

$$\text{grad}F = \{\nabla_1 \otimes F_0\}_1, \quad (7.5)$$

$$\text{div}\mathbf{V} = -\sqrt{3}\{\nabla_1 \otimes \mathbf{V}_1\}_0, \quad (7.6)$$

$$\text{rot}\mathbf{V} = -i\sqrt{2}\{\nabla_1 \otimes \mathbf{V}_1\}_1. \quad (7.7)$$

где векторный оператор (ранг 1)  $\nabla$  в сферической системе координат

$$\nabla = \mathbf{n} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} [\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{L}}]. \quad (7.8)$$

Для матричных элементов тензорных операторов в квантовой механике важную роль играет *теорема Вигнера-Эккарта*:

$$\langle j' m' | T_{kq} | j m \rangle = \frac{\langle j m, k q | j' m' \rangle}{\sqrt{2j' + 1}} \langle j' || T_k || j \rangle. \quad (7.9)$$

Эта теорема факторизует зависимость матричных элементов от проекций и служит определением *приведенного матричного элемента*  $\langle j' || T_k || j \rangle$ .

Для вывода теоремы Вигнера-Эккарта рассмотрим матричный элемент в двух системах координат, отличающихся поворотом на углы Эйлера  $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ :

$$\langle j' m' | T_{kq} | j m \rangle = \sum_{\mu, \kappa, \mu'} \langle j' \mu' | D_{\mu' m'}^{j' *}(\alpha, \beta, \gamma) D_{\kappa q}^k(\alpha, \beta, \gamma) T_{\kappa \kappa} D_{\mu m}^j(\alpha, \beta, \gamma) | j \mu \rangle, \quad (7.10)$$

и проинтегрируем по  $\alpha, \beta, \gamma$ , используя выражение (4.15):

$$8\pi^2 \langle j' m' | T_{kq} | j m \rangle = \sum_{\mu, \kappa, \mu'} (j m, k q | j' m') (j \mu, k \kappa | j' \mu') \frac{8\pi^2}{2j' + 1} \langle j' \mu' | T_{k\kappa} | j \mu \rangle; \quad (7.11)$$

$$\langle j' m' | T_{kq} | j m \rangle = \frac{(j m, k q | j' m')}{\hat{j}'} \sum_{\mu, \kappa, \mu'} \frac{1}{\hat{j}'} (j \mu, k \kappa | j' \mu') \langle j' \mu' | T_{k\kappa} | j \mu \rangle. \quad (7.12)$$

Сумма в выражении (7.12) не зависит от проекций  $m, m', q$  и называется приведенным матричным элементом.

Приведенный матричный элемент единичного оператора можно найти по формуле:

$$\langle J' || \hat{I} || J \rangle = \delta_{JJ'} \sqrt{2J' + 1}. \quad (7.13)$$

Для приведенного матричного элемента оператора, представляющего собой тензорное произведение двух операторов, каждый из которых действует в своем собственном подпространстве (например, для операторов орбитального момента и спина), можно записать следующее разложение:

$$\begin{aligned} \langle \alpha' (j'_1 j'_2) j' || \{U_{k_1} \otimes V_{k_2}\}_k || \alpha (j_1 j_2) j \rangle &= \hat{k} \hat{j} \hat{j}' \left\{ \begin{matrix} j'_1 & j'_2 & j' \\ j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \end{matrix} \right\} \times \\ &\times \sum_{\alpha''} \langle \alpha' j'_1 || U_{k_1} || \alpha'' j_1 \rangle \langle \alpha'' j'_2 || V_{k_2} || \alpha j_2 \rangle. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Символом  $\alpha$  обозначен набор всех остальных, помимо углового момента, квантовых чисел, нужных для полной идентификации состояния. Если оба оператора (например, последовательного поглощения двух фотонов) действуют в общем подпространстве, то

$$\begin{aligned} \langle \alpha' j' || \{U_{k_1} \otimes V_{k_2}\}_k || \alpha j \rangle &= (-1)^{j+j'+k} \hat{k} \sum_{\alpha'' j''} \left\{ \begin{matrix} k_1 & k_2 & k \\ j & j' & j'' \end{matrix} \right\} \times \\ &\times \langle \alpha j' || U_{k_1} || \alpha'' j'' \rangle \langle \alpha'' j'' || V_{k_2} || \alpha j \rangle. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Найдем приведенные матричные элементы собственных функций оператора углового момента  $\langle l' m' | Y_k | l m \rangle$ :

$$\begin{aligned}
 \langle l' m' | Y_{kq} | l m \rangle &= \iint \sin \theta d\theta d\phi Y_{l'm'}^*(\theta, \phi) Y_{kq}(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) = \\
 &= \frac{\hat{l}' \hat{k}}{(4\pi)^{3/2}} \iint \sin \theta d\theta d\phi D_{m'0}^{l'}(\theta, \phi, \gamma) D_{q0}^{k*}(\theta, \phi, \gamma) D_{m0}^{l*}(\theta, \phi, \gamma) = \\
 &= \frac{\hat{l}' \hat{k}}{(4\pi)^{3/2}} \iint \sin \theta d\theta d\phi D_{m'0}^{l'}(\theta, \phi, \gamma) \times \\
 &\quad \times \sum_L D_{M0}^{L*}(\theta, \phi, \gamma) (l m, k q | L M) (l 0, k 0 | L 0). \tag{7.16}
 \end{aligned}$$

Проинтегрируем обе части по  $d\gamma$ :

$$2\pi \langle l' m' | Y_{kq} | l m \rangle = \frac{\hat{l}' \hat{k}}{(4\pi)^{3/2}} (l m, k q | l' m') (l 0, k 0 | l' 0) \frac{8\pi^2}{2l' + 1}. \tag{7.17}$$

Откуда, воспользовавшись теоремой Вигнера-Эккарта, получаем:

$$\langle l' | Y_k | l \rangle = \frac{\hat{l} \hat{k}}{\sqrt{4\pi}} (l 0, k 0 | l' 0). \tag{7.18}$$

Частым примером для вычисления приведенных матричных элементов является вычисление неприведенного матричного элемента для одной нулевой проекции ( $k \geq 1$ ) и двух равных оставшихся максимальных, так как для коэффициентов Клебша—Гордана существует простое выражение:

$$(j j, k 0 | j j) = \sqrt{\frac{2j \dots (2j - k + 1)}{(2j + 2) \dots (2j + k + 1)}}. \tag{7.19}$$

Например, найдем  $\langle j' | \hat{J} | j \rangle$ . Так как  $\langle j' m' | \hat{J}_z | j m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \hat{j}$  и  $J_z$  — компонента тензорного оператора, имеющая нулевую проекцию, то

$$\langle j' m' = j' | \hat{J}_z | j m = j \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} j = \frac{(j j, 1 0 | j' j')}{\sqrt{2j' + 1}} \langle j' | \hat{J} | j \rangle, \tag{7.20}$$

откуда, воспользовавшись формулой (7.19), получаем:

$$\langle j | \hat{J} | j \rangle = \delta_{jj'} \sqrt{j(j+1)(2j+1)}. \tag{7.21}$$

Непосредственным следствием теоремы Вигнера-Экарта являются правила отбора для оператора  $\hat{T}_{kq}$ : чтобы матричный элемент  $\langle j'm' | T_{kq} | jm \rangle$  был отличен от нуля, необходимо, чтобы выполнялись следующие соотношения:

$$q = m' - m, \quad (7.22)$$

$$|j' - j| \leq k \leq j' + j. \quad (7.23)$$

Операторы, не являющиеся неприводимыми тензорами, можно разложить в ряд по ним. Операторы, являющиеся функциями координат, представляют в виде разложения по сферическим функциям. Разложение для плоской волны было дано ранее (4.24). Для потенциала кулоновского взаимодействия:

$$\frac{q_1 q_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = 4\pi q_1 q_2 \begin{cases} \frac{1}{r_1} \sum_{lm} \frac{1}{2l+1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l Y_{lm}^*(\mathbf{n}_{r_1}) Y_{lm}(\mathbf{n}_{r_2}), & r_1 > r_2, \\ \frac{1}{r_2} \sum_{lm} \frac{1}{2l+1} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l Y_{lm}^*(\mathbf{n}_{r_1}) Y_{lm}(\mathbf{n}_{r_2}), & r_2 \geq r_1. \end{cases} \quad (7.24)$$

Особенное внимание стоит уделить тензорным операторам второго ранга, являющимся комбинацией декартовых компонент. Обычный тензор второго ранга  $T_{ik}$  ( $i, k = x, y, z$ ) имеет 9 компонент и является приводимым. Он представляется в виде суммы скалярного неприводимого тензора (1 компонента), тензора 1-го ранга (3 компоненты) и неприводимого тензора 2-го ранга (5 компонент). Для начала представим тензор в виде суммы диагонального тензора  $E\delta_{ik}$ , антисимметричного тензора  $A_{ik}$  и симметричного тензора  $S_{ik}$ :

$$T_{ik} = E\delta_{ik} + A_{ik} + S_{ik}, \quad (7.25)$$

$$E = \frac{1}{3} \sum_i T_{ii}, \quad (7.26)$$

$$A_{ik} = \frac{1}{2} (T_{ik} - T_{ki}), \quad (7.27)$$

$$S_{ik} = \frac{1}{2} (T_{ik} + T_{ki} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \sum_l T_{ll}). \quad (7.28)$$

Из компонент симметричного тензора  $S_{ik}$  со следом, равным нулю, конструируется неприводимый тензор второго ранга:

$$Q_{20} = S_{zz}, \quad (7.29)$$

$$Q_{2\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{2}{3}}(S_{zx} \pm S_{zy}), \quad (7.30)$$

$$Q_{2\pm 2} = \frac{1}{\sqrt{6}}(S_{xx} - S_{yy} \pm 2iS_{xy}). \quad (7.31)$$

Если  $T_{ik} = x_i x_k$  ( $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ ,  $x_3 = z$ ), то оператор (7.29) имеет физический смысл оператора квадрупольного момента.

Для тензорных произведений нескольких операторов можно обсуждать порядок связи тензорных операторов. Соответствующие соотношения можно найти, например, в главе “Изменение схемы связи в неприводимых тензорных произведениях” [5]. Здесь мы приведем один важный пример, применимый для коммутирующих операторов:

$$\{(P \otimes Q)_m \otimes (T \otimes R)_l\}_k = \sum_{ij} \hat{m} \hat{l} \hat{i} \hat{j} \begin{Bmatrix} p & q & m \\ t & r & l \\ i & j & k \end{Bmatrix} \{(P \otimes T)_i \otimes (Q \otimes R)_j\}_k. \quad (7.32)$$

ранги неприводимых тензорных операторов  $P, Q, T, R$  равны, соответственно,  $p, q, r, t$ . Это соотношение аналогично выражению для перехода от  $LS$  к  $jj$  схеме связи (6.4) и имеет такой же физический смысл. Применим его, например, к практически важному случаю произведения проекции спиновых операторов  $\sigma^{(1,2)}$  не некоторое выбранное направление  $\mathbf{n}$ :

$$\begin{aligned} (\sigma^{(1)} \cdot \mathbf{n})(\sigma^{(2)} \cdot \mathbf{n}) &= 3\{\{\sigma_1^{(1)} \otimes \mathbf{n}\}_0 \otimes \{\sigma_1^{(2)} \otimes \mathbf{n}\}_0\}_0 \\ &= 3 \sum_i \hat{i}^2 \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ i & i & 0 \end{Bmatrix} \{\{\sigma_1^{(1)} \otimes \sigma_1^{(2)}\}_i \otimes \{\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}\}_i\}_0 \\ &= \sum_i \hat{i} \{\{\sigma_1^{(1)} \otimes \sigma_1^{(2)}\}_i \otimes \{\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}\}_i\}_0. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Произведение нулевого ранга  $\{\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}\}_0 = -1/\sqrt{3}$ , произведение 1-го ранга, будучи пропорциональным векторному произведению  $\{\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}\}_1$  равно 0, произведение 2-го ранга  $\{\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}\}_2$  пропорционально сферическим гармоникам 2-го ранга.

## Задачи к главе 7

- 7.1. Определить ранг операторов  $\hat{J}^n$ ,  $\hat{L}^n$ ,  $\hat{S}^n$ . (1 балл\*)
- 7.2. Разложить  $\exp(i\hat{S})$  по неприводимым тензорным операторам, определить их ранги. (1 балл)
- 7.3. Получить связь между скалярным произведением неприводимых операторов и их неприводимым тензорным произведением нулевого ранга. (1 балл\*)
- 7.4. Найти связь между тензорным произведением первого ранга и векторным произведением двух векторов. (1 балл)
- 7.5. Получить приведенный матричный элемент  $\langle j || \hat{J}^2 || j \rangle$ . (1 балл\*)
- 7.6. Получить приведенный матричный элемент  $\langle (j'_1 j'_2) j' || \hat{O} || (j_1 j_2) j \rangle$  при условии, что оператор действует только на первый или второй момент. (по 1.5 балла за ответ\*)
- 7.7. Получить приведенный матричный элемент  $\langle (ls) j || (\hat{L}\hat{S}) || (ls) j \rangle$ . (2 балла\*)
- 7.8. Получить приведенный матричный элемент угловой части оператора координаты  $\langle lm || \hat{r} || lm \rangle$ . (1 балл)
- 7.9. Доказать, что

$$\sum_{mq} |\langle j' m' | T_{kq} | jm \rangle|^2 = \frac{1}{2j'+1} |\langle j' || T_k || j \rangle|^2, \quad (7.34)$$

$$\sum_{mm'} |\langle j' m' | T_{kq} | jm \rangle|^2 = \frac{1}{2k+1} |\langle j' || T_k || j \rangle|^2. \quad (7.35)$$

(по баллу за выражение, второе\*)

- 7.10. Вычислить спиновую часть матричного элемента тензорных сил:

$$\langle l_1 l_2 LS : J | \frac{(\boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{r}_{12})(\boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} - \frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2) | l'_1 l'_2 L' S' : J' \rangle. \quad (7.36)$$

(3 балла)

- 7.11. Свести к радиальным интегралам матричный элемент кулоновского взаимодействия двух частиц:

$$\langle l_1 l_2 : L || \frac{q_1 q_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} || l_1 l_2 : L' \rangle. \quad (7.37)$$

(по 2 балла за прямой и обменный элемент, один \*)

- 7.12. Найти связь прямого и обратного приведенного матричного элемента. (1 балл\*)
- 7.13. Получить разложение плоской волны  $\exp(ikr)$  по сферическим гармоникам. (2 балла)
- 7.14. Для частицы со спином  $S$  вектор  $\mathbf{S}/S$  называется вектором поляризации. Среднее значение этого вектора по некоторому состоянию называется степенью поляризации. Определить степень поляризации частицы  $s = 1/2$  в состоянии (а)  $|(ls)jm = j\rangle$  для  $j = l + 1/2$  и  $j = l - 1/2$  (\*); (б) тоже в состоянии  $j = l + 1/2, m = l - 1/2$ . (2 балла)
- 7.15. Состояние  $|(ls)jm\rangle$  распадается с испусканием частицы со спином  $s = 1/2$ . Определить степень поляризации частицы, вылетающей в направлении  $\{\theta, \varphi\}$  для  $l = 2, j = 3/2, m = 1/2$ . (2 балла)

## Глава 8 Поляризованное электромагнитное поле

Для начала рассмотрим геометрические (поляризационные) свойства электромагнитного поля. Электромагнитное поле – пучок фотонов в любой системе координат распространяется (движется) со скоростью света. Поляризация поля может быть как чистой, так и смешанной, и описывается в терминах матрицы плотности. Выберем в качестве базиса состояния фотона с определенным волновым вектором и спиральностью  $|\vec{k}\lambda\rangle$  и пусть  $\lambda = +1$  соответствует правополяризованному полю,  $\lambda = -1$  – левополяризованному (отметим, что такое соглашение используется в квантовой электродинамике, в оптике и классической электродинамике соглашение обратное).

Матрица плотности фотона на базисе  $|\vec{k}\lambda\rangle$  представляется через параметры Стокса  $P_i$ :

$$\rho_{\lambda,\lambda'} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_3 & -P_1 + iP_2 \\ -P_1 - iP_2 & 1 - P_3 \end{pmatrix}. \quad (8.1)$$

Параметры Стокса удовлетворяют неравенству  $P_1^2 + P_2^2 + P_3^2 \leq 1$ , в случае равенства фотон полностью поляризован.

Очевидно, что физический смысл параметра  $P_3$  – это степень циркулярной (круговой) поляризации:

$$P_3 = \frac{\langle k\lambda = +1 | \rho | k\lambda = +1 \rangle - \langle k\lambda = -1 | \rho | k\lambda = -1 \rangle}{\langle k\lambda = +1 | \rho | k\lambda = +1 \rangle + \langle k\lambda = -1 | \rho | k\lambda = -1 \rangle}. \quad (8.2)$$

Чтобы понять физический смысл параметров  $P_{1,2}$ , рассмотрим волну, линейно поляризованную под углом  $\phi$  к оси  $x$ :

$$|\mathbf{k}e_\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -e^{-i\phi} |\vec{k}, \lambda = 1\rangle + e^{i\phi} |\vec{k}, \lambda = -1\rangle \right). \quad (8.3)$$

Тогда вероятность, что фотон с матрицей плотности (8.1) будет наблюдаться в состоянии  $|\mathbf{k}e_\phi\rangle$ :

$$W(\phi) = (1 + P_1 \cos 2\phi + P_2 \sin 2\phi)/2, \quad (8.4)$$

то есть параметры  $P_1$  и  $P_2$  – это степень линейной поляризации фотона в направлении  $0$ ,  $\pi/2$  и  $\pi/4$ ,  $3\pi/4$  соответственно. Подчеркнем, что для фотона (электромагнитной волны) нет разницы между направлениями вектора поляризации,

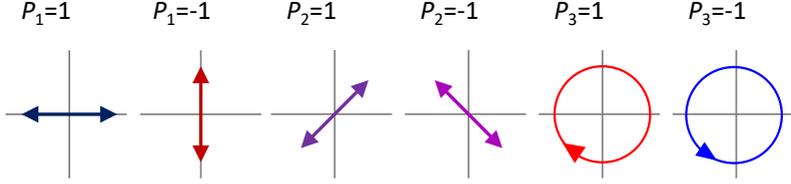


Рис. 8.1: Вектор напряженности электромагнитного поля для различных параметров Стокса.

отличающимися на  $\pi$ .

Состояние  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$  с определенным волновым вектором  $\mathbf{k} = \{k, \theta, \varphi\}$  и спиральностью  $\lambda$  может быть разложено в ряд по состояниям с определенным моментом и четностью  $|pLM\rangle$ :

$$|\mathbf{k}, \lambda\rangle = \sum_{pLM} \langle pLM | \mathbf{k}, \lambda \rangle |pLM\rangle, \quad (8.5)$$

$$\langle pLM | \mathbf{k}, \lambda \rangle = \frac{\hat{L}}{\sqrt{8\pi}} \lambda^p D_{M\lambda}^L(\varphi, \theta, 0). \quad (8.6)$$

Здесь  $p$  отличает электрические ( $p = 0$ ) и магнитные ( $p = 1$ ) фотоны. Внимательный читатель заметит, что в разложении (8.5)–(8.6) отсутствует сферическая функция Бесселя  $j_l(\mathbf{k}\mathbf{r})$ , которая содержится в разложении плоской волны (4.24). Эту часть мы обсудим позднее, обсуждая взаимодействие поля с мишенями – атомами и ядрами. На поляризационные характеристики этот множитель влияния не оказывает.

Из (8.5)–(8.6) следуют правила отбора по полному моменту и его проекции при поглощении или испускании фотона определенной мультипольности:

$$|\mathbf{J}_i + \mathbf{J}_f| \leq L, \quad (8.7)$$

$$M_i - M_f = \pm 1, \quad (8.8)$$

где первое равенство справедливо в любой системе координат, а второе – только в собственной системе, где ось  $z$  совпадает с направлением распространения фотона. Индекс  $i$  относится к начальному состоянию системы,  $f$  – к конечному. Для полей круговой (циркулярной) поляризации правила отбора по проекции в других системах координат довольно сложны. Однако существует выделенная и практи-

чески важная ситуация, когда поле линейно поляризовано, а система координат выбрана так, что ось  $z$  параллельна вектору поляризации  $\mathbf{E}$  ( $z \parallel \mathbf{E}$ ). Рассмотрим электрические дипольные и квадрупольные переходы в такой системе координат.

Непосредственно из выражения для линейной поляризованной вдоль оси  $x$  волны (8.3) и представления (8.5)–(8.6), подставляя  $L = 1(2)$  для дипольной (квадрупольной) компоненты и углы  $\varphi = 0$ ,  $\theta = \pi/2$ , получаем:

$$\begin{aligned}
 |E1e_\phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sum_M (-D_{M1}^1(0, \pi/2, 0)|E1, M\rangle + D_{M-1}^1(0, \pi/2, 0)|E1, M\rangle) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left( -\frac{1}{2}|E1, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|E1, 0\rangle - \frac{1}{2}|E1, 1\rangle \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2}|E1, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|E1, 0\rangle + \frac{1}{2}|E1, 1\rangle \right) \\
 &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} |E1, 0\rangle, \tag{8.9}
 \end{aligned}$$

то есть линейно поляризованное поле в системе координат  $z \parallel \mathbf{E}$  можно рассматривать как поле с  $|\mathbf{k}\lambda = 0\rangle$ .

$$\begin{aligned}
 |E2e_\phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{5}{8\pi}} \sum_M (-D_{M1}^2(0, \pi/2, 0)|E2, M\rangle + D_{M-1}^2(0, \pi/2, 0)|E2, M\rangle) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{5}{8\pi}} \left( -\frac{1}{2}|E2, -2\rangle - \frac{1}{2}|E2, -1\rangle + \frac{1}{2}|E2, 1\rangle + \frac{1}{2}|E2, 2\rangle \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2}|E2, -2\rangle - \frac{1}{2}|E2, -1\rangle + \frac{1}{2}|E2, 1\rangle - \frac{1}{2}|E2, 2\rangle \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{5}{8\pi}} (|E2, -1\rangle + |E2, 1\rangle). \tag{8.10}
 \end{aligned}$$

Для магнитной дипольной и квадрупольной составляющей правила отбора предлагается получить в задаче 8.2.

Рассмотрим переход системы из поляризованного состояния  $i = |1^- m\rangle$  в состояние  $f = |0^+\rangle$  с испусканием гамма-кванта и определим степень его круговой и линейной поляризации.

Данный переход является электрическим дипольным. Матрица плотности ко-

нечного состояния:

$$\begin{aligned}\rho_{\lambda,\lambda'} &= \frac{3|\langle f || \hat{D} || i \rangle|^2}{8\pi} D_{m\lambda}^1(\varphi, \theta, \psi) D_{m\lambda'}^{1*}(\varphi, \theta, \psi) \\ &= \frac{3|\langle f || \hat{D} || i \rangle|^2}{8\pi} \sum_{kq} (-1)^{m'-\lambda'} (1 m, 1 - m | k 0) \times (1 \lambda, 1 - \lambda' | k q) D_{0q}^k(\varphi, \theta, \psi).\end{aligned}\quad (8.11)$$

Оператор  $\hat{D}$  - оператор электрического дипольного перехода, его явный вид определен позднее. Эта матрица нормирована не на единицу, а на полную вероятность процесса. Угол  $\psi$  нужен для того, чтобы зафиксировать каким-либо образом оси  $x, y$  в собственной системе координат фотона.

Для  $m = 0$  разрешенные ранги  $k = 0, 2$  (выстроенность  $A_2 = -\sqrt{2}$ ), и из свойств коэффициентов Клебша—Гордана очевидно, что степень циркулярной поляризации  $P_3 = 0$ . Опустив множитель  $|\langle f || \hat{D} || i \rangle|^2/4\pi$ , получим:

$$\rho \sim \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{20}(\theta, \psi) & -\sqrt{6} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{22}(\theta, \psi) \\ -\sqrt{6} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{2-2}(\theta, \psi) & 1 - \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{20}(\theta, \psi) \end{pmatrix} \equiv \quad (8.12)$$

$$\equiv \frac{3}{4} \begin{pmatrix} \sin^2 \theta & -\sin^2 \theta \exp[2i\psi] \\ -\sin^2 \theta \exp[-2i\psi] & \sin^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (8.13)$$

Мы явно выделили при  $Y$ -функциях множитель  $\sqrt{4\pi}/(2k+1)$ , возникающий при переходе от  $D$ -функций к сферическим гармоникам.

Таким образом, след, определяющий угловое распределение фотонов, ведет себя как

$$\rho_{11} + \rho_{-1-1} \sim \sin^2 \theta,$$

а параметры Стокса - как

$$-P_1 + iP_2 = \rho_{1-1}/(\rho_{11} + \rho_{-1-1}) = -\exp[2i\psi].$$

Как упоминалось ранее, угол  $\psi$  нужен, чтобы определить ориентацию осей  $x, y$  в собственной системе фотона. Например,  $\psi = 0$  означает, что ось  $y$  осталась перпендикулярной лабораторной оси квантования, в которой была определена проекция начального состояния. Таким образом, при распаде поляризованного состояния с  $m = 0$  все испущенные фотоны линейно поляризованы в плоскости, содержащей ось квантования (ту ось, относительно которой определена проекция начального состояния), но вероятность испускания фотонов падает как  $\sin^2 \theta$ , и

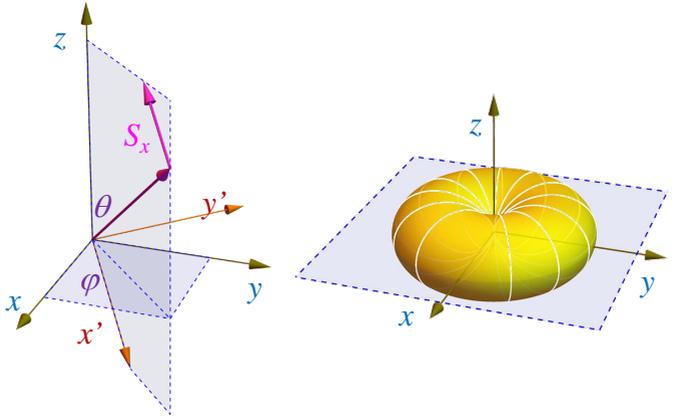


Рис. 8.2: Иллюстрация к задаче об испускании фотона из состояния  $m = 0$ .  $S_x$  указывает направление поляризации испущенного излучения; справа - форма углового распределения испущенных фотонов.

вдоль оси квантования фотоны не испускаются (см. рис. 8.2).

Для  $m = 1$  разрешенные ранги  $k = 0, 1, 2$  (выстроенность  $A_2 = 1/\sqrt{2}$ , ориентация  $A_1 = -\sqrt{3/2}$ ):

$$\rho \sim \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{3}{2} \cos \theta + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{20}(\theta, \psi) & \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{22}(\theta, \psi) \\ \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{2-2}(\theta, \psi) & 1 - \frac{3}{2} \cos \theta + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{20}(\theta, \psi) \end{pmatrix} \equiv \quad (8.14)$$

$$\equiv \frac{3}{8} \begin{pmatrix} 1 + 2 \cos \theta + \cos^2 \theta & \sin^2 \theta \exp[2i\psi] \\ \sin^2 \theta \exp[-2i\psi] & 1 - 2 \cos \theta + \cos^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (8.15)$$

Угловое распределение фотонов имеет вид  $\rho_{11} + \rho_{-1-1} \sim 1 + \cos^2 \theta$ , а степень круговой и линейной поляризации, таким образом:

$$P_3 = \frac{\rho_{11} - \rho_{-1-1}}{\rho_{11} + \rho_{-1-1}} = \frac{2 \cos \theta}{1 + \cos^2 \theta}, \quad (8.16)$$

$$P_1 + iP_2 = \frac{\rho_{1-1}}{\rho_{11} + \rho_{-1-1}} \frac{\sin^2 \theta \exp[2i\psi]}{1 + \cos^2 \theta}. \quad (8.17)$$

То есть фотоны, испущенные в направлении оси квантования, обладают правой поляризацией, против - левой, а в направлении, перпендикулярном оси кванто-

вания, поляризованы линейно.

Перейдем теперь к описанию взаимодействия электромагнитного поля с атомарными или ядерными мишенями, и операторам, определяющим вероятность электромагнитного перехода. Оператор взаимодействия классического электромагнитного поля с атомом представляются в двух формах:

- “форма скорости” (сравни с классическим лагранжианом взаимодействия заряженной частицы с э/м полем  $\mathcal{L} = (p - \frac{e}{c}A)^2/2m - e\phi$ ):

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{v}} = \frac{1}{c} \mathbf{A} \mathbf{p}, \quad (8.18)$$

где  $\mathbf{A} = \sum_{\lambda} \mathbf{e}_{\lambda} A(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})} + \mathbf{e}_{\lambda}^* A^*(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r})}$  – векторный потенциал э/м поля,  $\mathbf{p}$  – импульс электрона в атоме.

- “форма длины”

$$\hat{H}_{\text{int}}^{\text{l}} = \mathbf{E} \mathbf{r}, \quad (8.19)$$

где  $\mathbf{E}$  – вектор напряженности э/м поля,  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор электрона в атоме.

Разложение (8.18) в ряд по мультипольным операторам – довольно громоздкая задача и не входит в рамки этого курса. В результате получается электрический и магнитный операторы взаимодействия в виде:

$$Q_{\kappa q} = q \sqrt{\frac{4\pi}{2\kappa + 1}} \sum_i r_i^{\kappa} Y_{\kappa q}(\theta_i, \varphi_i), \quad (8.20)$$

$$M_{\kappa q} = \frac{1}{\kappa + 1} \frac{q}{c} \sqrt{\frac{4\pi}{2\kappa + 1}} \sum_i \nabla r_i^{\kappa} Y_{\kappa q}(\theta_i, \varphi_i) \hat{\mathbf{l}}_i. \quad (8.21)$$

Суммирование в (8.20)–(8.21) выполняется по всем частицам системы, например, по электронам атома. Оператор (8.21) учитывает только “координатную” часть углового момента, учет спина для частиц с  $s = 1/2$  приводит к замене  $\hat{\mathbf{l}}/(\kappa + 1) \rightarrow \hat{\mathbf{l}}/(\kappa + 1) + \hat{\mathbf{s}}$ .

Рассмотрим электрический оператор ранга  $k$ , действующий на частицу в потенциале и переводящий ее из состояния  $|\alpha l m s m_s\rangle$  в состояние  $|\alpha' l' m' s' m'_s\rangle$ , и представим координатную часть волновой функции как  $P_l(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ .

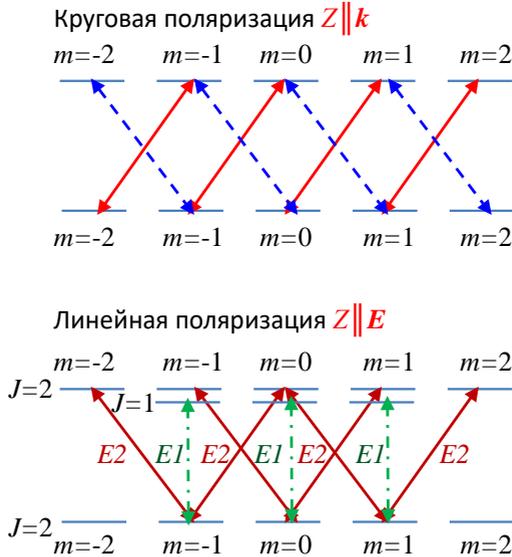


Рис. 8.3: Правила отбора по проекции момента в различных системах координат.

Соответствующий матричный элемент перехода:

$$\langle \alpha' l' m' s' m'_s | Q_{kq} | \alpha l m s m_s \rangle = \langle s' m'_s | s m_s \rangle \cdot \int r^k P_l(r) P_{l'}(r) dr \cdot \langle l' m' | Y_{kq} | l m \rangle. \quad (8.22)$$

Первый множитель в правой части (8.22) выражает то, что электрические операторы, зависящие только от координат, не действуют на спиновую часть волновой функции, и, соответственно, спин и его проекция сохраняются. Второй множитель включает в себя зависимость от динамических параметров, таких как энергия испущенной частицы или главное квантовое число возбуждаемой оболочки. Этот множитель будет различным для различных атомов или ионов даже при одинаковых квантовых числах. Третий множитель был определен в главе 7 (7.18) и содержит правила отбора по орбитальному квантовому числу ( $\Delta l \leq k$ ,  $l + l' + k$  – четное). Этот множитель определяет геометрические или поляризационные характеристики процесса. Благодаря такой факторизации (8.22) можно видеть, что системы со сферической симметрией обладают одинаковыми правилами отбора вне зависимости от того, потенциал это, атом, ион или ядро.

Применим мультипольное разложение и теорему Вигнера-Эккарта к фото-

возбуждению. Сравним, например, вероятности фотовозбуждения за счет E1 перехода под действием правого, левого, линейного поляризованного и неполяризованного фотона (последнее в двух системах координат) из  $1p_{3/2}$  в  $1d_{5/2}$ , считая, что начальное состояние полностью поляризовано в  $m = 1/2$ :

$$\begin{aligned}
 W_{1p_{3/2} \rightarrow 1d_{5/2}}^{right} &= \frac{(3/2 \ 3/2, 1 \ 1 | 5/2 \ 5/2)^2}{6} \langle 1p_{3/2} || \hat{D} || 1d_{5/2} \rangle^2, \\
 W_{1p_{3/2} \rightarrow 1d_{5/2}}^{left} &= \frac{(3/2 \ 3/2, 1 \ -1 | 5/2 \ 1/2)^2}{6} \langle 1p_{3/2} || \hat{D} || 1d_{5/2} \rangle^2, \\
 W_{1p_{3/2} \rightarrow 1d_{5/2}}^{lin} &= \frac{(3/2 \ 3/2, 1 \ 1 | 5/2 \ 5/2)^2 + (3/2 \ 3/2, 1 \ -1 | 5/2 \ 1/2)^2}{12} \langle 1p_{3/2} || \hat{D} || 1d_{5/2} \rangle^2, \\
 W_{1p_{3/2} \rightarrow 1d_{5/2}}^{un} &= \frac{(3/2 \ 3/2, 1 \ 1 | 5/2 \ 5/2)^2 + (3/2 \ 3/2, 1 \ -1 | 5/2 \ 1/2)^2}{12} \langle 1p_{3/2} || \hat{D} || 1d_{5/2} \rangle^2.
 \end{aligned}$$

Получается, что вероятность возбуждения из таким образом поляризованного состояния под действием правого поля в 10 раз выше, чем под действием левого поля. Вероятности возбуждения неполяризованным и линейно поляризованным излучением совпадают между собой. Важно, что если применять правила отбора для электрической дипольной компоненты линейно поляризованного поля (8.9), то проекция начального состояния должна быть определена в этой системе координат  $z || \mathbf{E}$ , то есть альтернативно можно записать:

$$W_{1p_{3/2} \rightarrow 1d_{5/2}}^{lin} = \frac{\sum_m |d_{m,3/2}^{3/2}(\pi/2)|^2 (3/2 \ m, 1 \ 0 | 5/2 \ m)^2}{6} \langle 1p_{3/2} || \hat{D} || 1d_{5/2} \rangle^2. \quad (8.23)$$

Часто при взаимодействии атомов и ядер с электромагнитным полем процесс можно рассматривать как одночастичный. Когда в атоме или ядре только одна частица находится сверх заполненных оболочек, это приближение, как правило, является очень хорошим. Но даже для частично-заполненных оболочек одночастичное приближение позволяет ухватить основные особенности процесса. В одночастичном приближении для перехода между двумя конфигурациями  $nl^k 2S+1 L + \gamma \rightarrow nl^{k-1} 2S_f+1 L_f + ml'$  считается, что переход происходит за счет одной частицы  $nl \rightarrow ml'$ , а остальная часть системы (кор) остается в прежнем состоянии.

## Задачи к главе 8

- 8.1. Показать, что приведенный матричный элемент магнитного дипольного оператора  $\langle (l' s') j' | \hat{L} + 2\hat{S} | (l s) j \rangle$  отличен от нуля только между подуровнями одной оболочки  $l = l', s = s'$ , найти его величину. (1 балл\*)
- 8.2. Получить вид магнитной дипольной и квадрупольной компоненты линейно поляризованной плоской волны в системе координат, где  $z \parallel \mathbf{E}$ . (2 балла\*)
- 8.3. Второй член разложения взаимодействия электромагнитной волны с частицей имеет вид  $(\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{p})(\mathbf{k} \mathbf{r})$ , где вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  определяет поляризацию. Используя формулы для изменения порядка связи тензорных операторов, представить его в виде электрических и магнитных операторов. (2 балла)
- 8.4. Сравнить вероятности фотовозбуждения за счет E1 перехода под действием правого, левого, неполяризованного и линейного (последнее в двух системах координат) поля из  $1f_{5/2}$  в  $2d_{5/2}$ , считая что начальное состояние полностью поляризовано  $m = 3/2$  в системе координат, где ось  $z$  совпадает с направлением распространения поля. Сравнить ее с вероятностью обратного перехода из  $m = 5/2$  под действием правого поля и из  $m = 1/2$  под действием левого. (3 балла\*)
- 8.5. В одночастичной модели оболочек вероятность фотовозбуждения неполяризованного состояния  $1p_{3/2}$  в состояние  $1f_{5/2}$  равна  $W$ . Пренебрегая зависимостью волновой функции от полного момента, определить вероятность следующих процессов:
- (а) фотовозбуждения неполяризованного состояния  $1p_{3/2}$  в состояние  $1f_{7/2}$ ;
  - (б) фотовозбуждения состояния  $1p_{3/2}$ , поляризованного таким образом, что заселены только проекции  $m = \pm 1/2$  (поровну), линейно поляризованном полем в состоянии  $1f_{7/2}$ ; Выстроенность такого состояния, определенная в соответствии с (2.26),  $A_2 = 1$ .
  - (в) фотовозбуждения состояния  $1p_{3/2}$ , поляризованного таким образом, что заселены только проекции  $m = 1/2, 3/2$  (поровну), право- и левополяризованным полем. Поляризация приведена в собственной системе фотона.
- (3 балла)
- 8.6. Записать приведенный дипольный матричный элемент фотовозбуждения в приближении  $LS$ -связи через матричный элемент одночастичного возбуждения. (1 балл)

- 8.7. Записать приведенный дипольный матричный элемент фотовозбуждения в приближении  $jK$ -связи через матричный элемент одночастичного возбуждения. (1 балл)
- 8.8. Часто дипольным матричным элементом перехода в форме скорости называется выражение  $\langle b | \nabla | a \rangle$ , а матричным элементом в форме длины –  $\langle b | \mathbf{r} | a \rangle$ . Исходя из определений гамильтониана в формах скорости (8.18) и длины (8.19), покажите почему. (0.5 балла)
- 8.9. Показать эквивалентность дипольных матричных элементов фотовозбуждения (фотоионизации) в форме длины и скорости. (3 балла)

## Тест 1

Состояние  $|JM\rangle$  является собственной функцией операторов  $\hat{J}^2$  и  $\hat{J}_z$ . Какие из нижеприведенных выражений не имеют смысла или обращаются в ноль?

$$\langle 3/2\ 1/2 | \hat{J}^2 | 3/2\ 3/2 \rangle \quad (\text{T.1})$$

$$\langle 2\ 1 | \hat{J}^2 | 2\ 1 \rangle \quad (\text{T.2})$$

$$\langle 2\ 1 | \hat{J}^2 | 1\ 1 \rangle \quad (\text{T.3})$$

$$\langle 2\ 1 | \hat{J}_z | 1\ 1 \rangle \quad (\text{T.4})$$

$$\langle 1\ 1 | \hat{J}_z | 1\ 1 \rangle \quad (\text{T.5})$$

$$\langle 2\ 3 | \hat{J}_z | 2\ 3 \rangle \quad (\text{T.6})$$

$$\hat{J}_+ | 3/2\ 1 \rangle \quad (\text{T.7})$$

$$\hat{J}_+ | 1\ 1 \rangle \quad (\text{T.8})$$

$$\hat{J}_+ | 2\ 1 \rangle \quad (\text{T.9})$$

$$\langle 2\ 2 | \hat{J}_x | 2\ 1 \rangle \quad (\text{T.10})$$

$$\langle 2\ 1 | \hat{J}_x | 1\ 1 \rangle \quad (\text{T.11})$$

$$\langle 2\ 1 | \hat{J}_x | 2\ 1 \rangle \quad (\text{T.12})$$

## Тест 2

Какие из коэффициентов Клебша-Гордона  $(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m)$  не имеют смысла или равны нулю?

$$(11, 1 - 1 | 20) \quad (\text{T.1})$$

$$(21, 1 - 1 | 40) \quad (\text{T.2})$$

$$(10, 3/2 - 1 | 3/2 - 1) \quad (\text{T.3})$$

$$(1/2 1/2, 3/2 1/2 | 3 1) \quad (\text{T.4})$$

$$(1/2 1/2, 3/2 - 1/2 | 2 1) \quad (\text{T.5})$$

$$(10, 3/2 - 1/2 | 3/2 1/2) \quad (\text{T.6})$$

$$(20, 3 0 | 20) \quad (\text{T.7})$$

$$(1/2 1/2, 3/2 - 1/2 | 1 0) \quad (\text{T.8})$$

$$(1/2 0, 3/2 - 1/2 | 2 - 1/2) \quad (\text{T.9})$$

$$(10, 3 0 | 20) \quad (\text{T.10})$$

$$(20, 3/2 0 | 1/2 0) \quad (\text{T.11})$$

$$(21, 2 - 1 | 20) \quad (\text{T.12})$$

### Тест 3

Какие из D-функций, Y-функций или полиномов Лежандра не имеют смысла или равны нулю?

$$D_{\frac{3}{2}2}^2(\alpha, \beta, \gamma) \quad (\text{T.1})$$

$$D_{\frac{3}{2}1/2}^2(\alpha, \beta, \gamma) \quad (\text{T.2})$$

$$D_{01}^{3/2}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (\text{T.3})$$

$$D_{21}^1(\alpha, \beta, \gamma) \quad (\text{T.4})$$

$$D_{11}^1(0, 0, 0) \quad (\text{T.5})$$

$$D_{1-1}^1(0, 0, 0) \quad (\text{T.6})$$

$$Y_{11}(\theta, \phi) \quad (\text{T.7})$$

$$Y_{12}(\theta, \phi) \quad (\text{T.8})$$

$$Y_{\frac{3}{2}1/2}(\theta, \phi) \quad (\text{T.9})$$

$$Y_{\frac{3}{2}1}(\theta, \phi) \quad (\text{T.10})$$

$$Y_{11}(0, 0) \quad (\text{T.11})$$

$$Y_{10}(0, 0) \quad (\text{T.12})$$

$$P_2(\cos \theta) \quad (\text{T.13})$$

$$P_{1/2}(\cos \theta) \quad (\text{T.14})$$

$$P_1(\cos 0) \quad (\text{T.15})$$

$$P_1(\cos \pi/2) \quad (\text{T.16})$$

## Тест 4

Какие из 6j или 9j символов не имеют смысла или равны нулю?

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 0 & 1 \\ & 2 & 3 & 2 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.1})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 3 & 1 \\ & 2 & 0 & 2 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.2})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 0 & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.3})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 1/2 & 1 \\ & 1/2 & 1 & 2 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.4})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ & 1 & 1 & 3/2 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.5})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 1/2 & 3/2 & 3/2 \\ & 1 & 2 & 2 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.6})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 1/2 & 1 \\ & 1/2 & 1/2 & 1 \\ & 3/2 & 1 & 2 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.7})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 0 & 1 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & 2 & 2 & 2 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.8})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 2 & 2 & 2 \\ & 2 & 2 & 2 \\ & 2 & 2 & 2 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.9})$$

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ & 1 & 1 & 1 \\ & 1 & 1 & 1 \end{matrix} \right\} \quad (\text{T.10})$$

## Список литературы

1. Теоретический практикум, Части 1–3 / В. В. Балашов [и др.]. — Москва, НИИЯФ МГУ, 1971–1972.
2. Теоретический практикум, Части 1–2 / В. В. Балашов [и др.]. — Москва, Издательство Московского Университета, 1979–1980.
3. Теоретический практикум / В. В. Балашов [и др.]. — Москва, Энергоатомиздат, 1984.
4. *Balashov V. V., Grum-Grzhimailo A. N., Kabachnik N. M. Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions: A Practical Theory Course.* — New York, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000.
5. Квантовая теория углового момента и ее приложения. Т. 1 / Д. А. Варшалович [и др.]. — Москва, Физматлит, 2017.
6. *Zar P. Теория углового момента: О пространственных эффектах в физике и химии.* — Москва, Мир, 1993.
7. *Юцис А., Бандзайтис А. Теория момента количества движения в квантовой механике.* — Вильнюс, Минтис, 1965.
8. *Эдмондс А. Угловые моменты в квантовой механике.* - В сб.: Деформация атомных ядер. — Москва, Издательство иностранной литературы, 1958.
9. *Биденхарн Л., Лаук Д. Угловой момент в квантовой физике. Теория и приложения.* — Москва, Мир, 1984.
10. *Brink D. M., Satchler G. R. Angular Momentum.* — Oxford, Clarendon Press, 1968.
11. *Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения: Пер. с англ.* — Москва, Мир, 1983.
12. *Devanathan V. Angular Momentum Techniques in Quantum Mechanics.* — Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 2002.
13. *Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров.* — Москва, Издательство иностранной литературы, 1949.

14. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика: Нерелятивистская теория. Т. 3. — Москва, Наука, 1989.
15. Clebsch–Gordan calculator. — URL: [wolframalpha.com/input?i=Clebsch-Gordan+calculator](http://wolframalpha.com/input?i=Clebsch-Gordan+calculator).
16. Angular Momentum Coefficients. — URL: [mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/31729-angular-momentum-coefficients](http://mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/31729-angular-momentum-coefficients).
17. Wigner coefficient calculator. — URL: [www-stone.ch.cam.ac.uk/wigner.shtml](http://www-stone.ch.cam.ac.uk/wigner.shtml).
18. A. Kramida [и др.]. — 2023. — NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.11). Available: [physics.nist.gov/asd](http://physics.nist.gov/asd) [2024, September 1]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.