

Gian-Carlo Rota, *Editor*
Encyclopedia of Mathematics and its Applications
Volume 8

Section: Mathematics Physics
Peter A. Carruthers, *Section Editor*

**Angular
Momentum
in Quantum
Physics**
**Theory
and Application**

L. C. Biedenharn

Physics Department
Duke University
Durham, North Carolina

J. D. Louck

Los Alamos National Laboratory
University of California
Los Alamos, New Mexico

Addison-Wesley
Publishing Company
Reading, Massachusetts
1981

Л.Биденхарн
Дж.Лаук

УГЛОВОЙ МОМЕНТ В КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ

Теория
и приложения
В 2-х томах

Том 2

Перевод с английского

д-ра физ.-мат. наук

А. У. Климыка,

канд. физ.-мат. наук

А. М. Гаврилика



Москва
«Мир»
1984

Оглавление

ГЛАВА 7. НЕКОТОРЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ К ФИЗИЧЕСКИМ ЗАДАЧАМ	
1. Вводные замечания	
2. Принципы, лежащие в основе приложений	
Литература	
3. Эффект Зеемана	
Литература	
4. Нерелятивистский атом водорода	
Литература	
5. Атомная спектроскопия	
Литература	
6. Электромагнитные процессы	
Литература	
7. Метод углового момента в формулировке квантовой механики на языке матрицы плотности	
Литература	
8. Угловые корреляции и угловые распределения в реакциях	
Литература	
9. Некоторые приложения к структуре ядра	
Литература	
10. Системы отсчета, жестко связанные с телом: спектры молекул типа сферического волчка	
Литература	
Приложение	
Литература	
Список обозначений	
Предметный указатель	

309

309

309

311

311

319

319

342

344

399

403

422

424

442

444

456

457

487

489

579

585

612

616

635

ББК 22.314

Б 59

УДК 530.145/539.1

Биденхарн Л., Лаук Дж.

Б 59 Угловой момент в квантовой физике: в 2 томах. Т. 2. — Пер. с англ. — М.: Мир, 1984. — 343 с., илл.

Монография известных американских физиков-теоретиков Л. Биденхарна и Дж. Лаука посвящена методам и результатам теории углового момента и их использованию в различных физических задачах. Второй том содержит широкий круг применений аппарата углового момента к таким задачам квантовой физики, как эффект Зеемана, спектроскопия многоэлектронных атомов и молекул, мультипольное электромагнитное излучение, угловые распределения в реакциях, структура ядра и т.д. В приложении даны таблицы коэффициентов и операторов Вигнера и Рака, сферических и тензорных функций и редуцированных матричных элементов.

Рассчитана на научных работников, аспирантов и студентов старших курсов соответствующих специальностей

Б 1704020000 — 045 55 — 84, ч. 1
041(01) — 84

ББК 22.314
530.1

Редакция литературы по физике

Л. Биденхарн, Джеймс Лаук

УГЛОВОЙ МОМЕНТ В КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ

Том 2

Научн. редактор Н. Л. Телеснин. Мл. научн. редакторы И. А. Зяновьева, В. И. Аксенова.

Художник В. К. Бисенгалев. Художественный редактор В. А. Захаров.

Технические редакторы Н. Б. Панфилова, Т. К. Такташова. Корректор Н. А. Вавилова

ИБ № 3527

Подписано к печати 30.01.84. Формат 60 × 90¹/₁₆. Бумага офсетная № 1. Гарнитура таймс.

Печать офсетная. Объем: 10,75 бум. л. Усл. печ. л. 21,50. Усл. кр. отт. 21,50. Уч.-изд. л. 24,88.

Изд. № 2/2592. Тираж 4000 экз. Зак. № 108 Цена 4 р. 10 к.

Набрано в издательстве «Мир», на фотонаборном комплексе «Компьюграфик»

129820, Москва, И-110, ГСП, 1-й Рижский пер., 2.

Отпечатано в Тульской типографии Союзполиграфпрома при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли г. Тула, проспект им. В. И. Ленина, 109

Copyright © 1981 by Addison-Wesley Publishing Company, Inc.

© Перевод на русский язык, «Мир», 1984

Некоторые приложения к физическим задачам

1. Вводные замечания

Основные понятия и методы теории углового момента в настоящее время проникли почти повсеместно в современную квантовую физику; вряд ли найдется хоть один выпуск физического журнала, в котором не использовались бы непосредственно в какой-нибудь из статей конструкции углового момента. Поэтому было бы весьма неразумно, если не вовсе невозможно стремиться к какому-то окончательному (или даже весьма подробному) обзору приложений.

В силу этого цель настоящей книги гораздо более скромна: мы концентрируем внимание на нескольких типичных приложениях теории в возможно более разнообразных контекстах и главное внимание уделяем иллюстрации основных принципов. Но при рассмотрении каждой конкретной области приложения мы не стремимся дать исчерпывающее изложение, а вместо этого предпочитаем достаточно подробно описывать новые или по крайней мере не общеизвестные аспекты предмета (хорошим примером может служить обсуждение в разд. 6 результата, принадлежащего Казимиру).

2. Принципы, лежащие в основе приложений

Прежде чем обратиться к конкретным примерам, полезно дать краткий обзор принципов, лежащих в основе приложений. Мы уже видели, что симметрия в квантовой физике есть преобразование над векторами состояния (активная точка зрения — векторы в гильбертовом пространстве преобразуются, а операторы остаются фиксированными) и над наблюдаемыми (пассивная точка зрения — векторы в гильбертовом пространстве остаются фиксированными, а операторы подвергаются преобразованию)¹⁾, такое, что все вероятности сохраняются (разд. 14 гл. 3). Воспользовавшись теоремой Вигнера, мы находим, что это приводит либо к унитарной, либо к антиунитарной реализации симметрии при помощи операторов.

Физические задачи, наиболее подходящие для решения симметричными методами, характеризуются принадлежностью к линейным многообразиям, которые имеют конечный базис; мы уже упоминали (в гл. 1), что это объясняет воз-

¹⁾ Это противопоставление «активного» и «пассивного» преобразований в гильбертовом пространстве и операторном пространстве заимствовано из работы Хаутаппеля и др. [1]; оно согласуется с определением активного и пассивного преобразований в $\mathbb{R}^3$, которое дано в разд. 2 гл. 2, когда $\mathbb{R}^3$ рассматривается как линейное пространство.

росшее значение симметрии в квантовой физике в противоположность классической физике (где такие многообразия не встречаются).

Отсюда следует, что в приложениях, где полной симметричной структурой является группа Пуанкаре $\mathcal{P}$ или группа Галилея $\mathcal{G}$, наиболее важным является случай, когда состояния ограничены¹⁾ так, что пространственные компоненты импульса равны нулю (т.е. состояния инвариантны относительно пространственных трансляций), а энергия имеет определенное значение E .

В действительности общая $\mathcal{P}$ или $\mathcal{G}$ -инвариантность ограничивается подгруппой вращений, расширенной различными возможными отражениями (если они имеют место). Эта точка зрения используется, например, в спектроскопии, где рассматривается только *внутренняя* энергия заданной системы, а не кинетическая энергия ее как целого.

Помимо малоинтересного случая, когда отсутствуют состояния с нулевым импульсом и фиксированной энергией, следует различать два важнейших случая²⁾: 1) выделенные состояния принадлежат дискретному спектру гамильтониана и 2) выделенные состояния принадлежат непрерывному спектру гамильтониана.

Оба случая достаточно важны. В первом случае нетрудно узнать задачу спектроскопии (молекулярной, атомной, ядерной и(или) адронной). Применение симметричных методов к спектроскопии было и остается одним из главных достижений в квантовой физике. Как это выразил Вигнер [1], «вряд ли будет преувеличением сказать, что все качественные правила спектроскопии, включая отношения интенсивностей мультиплетных спектров, могут быть выведены из принципов инвариантности — некоторые из них точные, другие приближенные». В разд. 3 — 5 обсуждаются примеры, взятые из атомной спектроскопии, в разд. 9 — примеры из ядерной спектроскопии, в разд. 10 — из молекулярной спектроскопии.

Для второго случая, когда состояния лежат в непрерывном спектре, нетрудно видеть, что система неограниченна и может разделяться на две или более составных частей. В соответствии с этим имеются два типа явлений, включающие непрерывные спектры, к которым принципы симметрии и, следовательно, аппарат углового момента применяются наиболее успешно. Первый тип явлений касается углового распределения продуктов распада и даже, что более важно, корреляций между направлениями движения последовательно испускаемых частиц в распаде. Второй тип процессов, для которых принципы инвариантности оказались наиболее полезными, относится к угловому распределению продуктов, получающихся в результате столкновений, т.е. угловых распределений в процессах

¹⁾ Ограниченные таким образом состояния образуют линейное многообразие, но, строго говоря, не лежат в исходном гильбертовом пространстве (поскольку это пространство не содержит состояний с точно определенным импульсом). Однако, используя предельный процесс, можно определить новое гильбертово пространство, элементы которого есть идеальные элементы (предельные случаи) (см. [1, 2, 3]).

²⁾ В принципе могут быть дискретные состояния, вложенные в континуум. Такой пример встречается в пертурбационном подходе к автоионизации в атоме гелия (работа Фано [4] и приведенные в ней ссылки, а также работа [5]).

рассеяния и реакциях. В разд. 8 обсуждаются примеры обоих типов приложений. Возможные измерения в этих двух типах явлений не ограничиваются наблюдением только направлений движения, но могут также включать измерения состояний поляризации одной или более из участвующих частиц (обладающих ненулевым спином). Метод углового момента имеет исключительное значение в измерениях поляризации, особенно в релятивистском режиме; этот вопрос обсуждается в разд. 6 и 7.

Первостепенное значение теории углового момента как в релятивистской, так и в нерелятивистской областях должно быть очевидным даже из этого краткого обзора (см. [1], с. 628).

Литература

1. Houtappel R. M. F., van Dam H., Wigner E. P., Rev. Mod. Phys., 37, 595 (1965).
Концептуальная основа и использование геометрических принципов инвариантности.
2. Neumann J., Ann. Math., 50, 401 (1949).
О кольцах операторов. Редукционная теория.
3. Mackey G. W. Ann. Math., 58, 193 (1953).
Индукированные представления локально компактных групп. II. Теорема взаимности Фробениуса.
4. Fano U., Phys. Rev., 124, 1866 (1961).
Влияние взаимодействия в конфигурации на интенсивности и сдвиги фаз.
5. Friedrichs K. O., Perturbation of Spectra in Hilbert Space, Lectures in Applied Mathematics, Vol. III, (Amer. Math. Soc., Providence, R.I., 1965. [Имеется перевод: Фридрихс К. О. Возмущение спектра операторов в гильбертовом пространстве. — М.: Мир, 1969.]

3. Эффект Зеемана

а. Немного истории. Эффект Зеемана в широком понимании есть действие поля на испускание (или поглощение) света. Еще Фарадей верил в существование такого эффекта и безуспешно пытался его обнаружить в 1845 г. и в последующие годы, но впервые этот эффект был обнаружен экспериментально в 1896 г. Зееманом, а затем подтвержден (и распространен) Престоном в 1896 — 1899 гг. В течение последующих двадцати пяти лет эффект Зеемана (а также его модификации для сильных полей — эффекты Пашена — Бака и Бака — Гаудсмита) был основным источником информации в атомной спектроскопии.

Объяснение этих спектроскопических данных Зеемана было ключевой проблемой, решение которой привело к открытию квантовой механики. Теория электронов Лоренца (1895 г.) легко могла объяснить «нормальный» зеемановский триплет, но она была совершенно неадекватной для гораздо более частых «аномальных» зеемановских спектров.

Обсуждение эффекта Зеемана является в настоящее время стандартной темой в учебниках физики. Наша цель при изложении этих вопросов состоит в том, чтобы подчеркнуть существенный вклад в сегодняшнее их понимание со стороны теории углового момента, а также проследить корни самой теории углового момента, представляющие собой индуктивные эмпирические построения на основе спектроскопических данных.

б. Нормальный эффект Зеемана. С точки зрения симметричных методов эффект Зеемана может быть охарактеризован как нарушение вращательной сим-

метрии в результате выделения специального направления — направления магнитного поля $\mathbf{B}$. Рассматривая схематически атом как фиксированное ядро, притягивающее электрон (посредством центральной силы), мы сводим задачу к изучению движения электрона, которое изменилось в присутствии магнитного поля.

Эта задача была решена классически Ларморов, вследствие чего появилась теорема Лармора: *действие (слабого) магнитного поля на движение частицы с массой m_0 и зарядом e (заключенной в конечную область пространства) сводится к наложению на первоначальное движение вращения с круговой частотой*

$$\omega_L = - \left(\frac{e}{2m_0c} \right) \mathbf{B} \quad (7.3.1)$$

вокруг оси, совпадающей с направлением поля.

Этот классический результат легко объясняет (ларморовские) смещенные частоты в нормальном зеэмановском спектре и даже более тонкие детали, такие, как поляризация. Мы воздержимся от этих подробностей, поскольку квантовое рассмотрение является одновременно и более простым, и более общим.

в. Квантовое рассмотрение. Квантовое рассмотрение (ньютоновская относительность) исходит из классического гамильтониана. В отсутствие магнитного поля имеем гамильтониан

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(r) \quad (7.3.2)$$

для электрона, движущегося в эффективном центральном потенциале $V(r)$.

Чтобы ввести магнитное поле, используют определенную классически подстановку для заряда e

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c,$$

где векторный потенциал $\mathbf{A}$ задается выражением $\mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathbf{B} \times \mathbf{x})$, в котором $\mathbf{B}$ обозначает постоянное магнитное поле.

Пренебрегая квадратичными членами в векторном потенциале («приближение слабого поля»), находим гамильтониан

$$H = H_0 - \left(\frac{e\hbar}{2m_0c} \right) \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}, \quad (7.3.3)$$

где $\mathbf{L}$ — (безразмерный) оператор орбитального углового момента

$$\mathbf{L} = -i\mathbf{x} \times \nabla. \quad (7.3.4)$$

Собственные значения оператора H легко найти, используя собственные функции исходного вращательно инвариантного гамильтониана H_0 (см. разд. 1 — 8 гл. 6). Мы видим, что l по-прежнему является хорошим квантовым числом, так как $[\mathbf{L}^2, H] = 0$. Таким образом, выбирая ось z параллельной полю $\mathbf{B}$, так что $\mathbf{B} = B\hat{e}_3$ и $\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} = BL_3$, мы получаем собственные значения $E(n, l, m)$ гамильтониана H , выраженные через собственные значения $E_0(n, l)$ оператора H_0 :

$$E(n, l, m) = E_0(n, l) - \left(\frac{e\hbar B}{2m_0c} \right) m. \quad (7.3.5)$$

Мы видим, что метод углового момента полностью определяет изменения энергетических уровней. Заметим далее, что магнитное поле сняло (пространственное) вырождение различных уровней. С точки зрения теории групп мы сузили группу симметрии $SO(3)$ до подгруппы $SO(2)$ путем выделения аксиального направления $\mathbf{B}$. Это нарушение симметрии не затронуло коммутационные соотношения для углового момента (которые были использованы при получении собственных значений гамильтониана). Это иллюстрирует простую, но весьма важную особенность: *коммутационные правила являются кинематическими построениями, независимыми от динамики.*

Метод углового момента решает также вторую часть задачи: нахождение поляризации и углового распределения испускаемого излучения. В разд. 6 мы рассмотрим систематически электромагнитное мультипольное излучение; для настоящей цели нам требуется лишь вспомнить, что для атомных спектров $r_{\text{ат}}/\lambda_{\text{rad}} \approx 10^{-2} - 10^{-3}$, так что присутствует только электрическое дипольное излучение. Таким образом, излучательная часть гамильтониана, индуцирующая оптические переходы (разд. 6), имеет вид

$$H_{\text{rad}} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}_{\text{rad}} = \frac{e\hbar}{m_0 c} (\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{p}) A_{\text{rad}}. \quad (7.3.6)$$

($\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ обозначает линейную поляризацию испускаемого света). Этот результат приводит к хорошо известной формуле (см. гл. IV в книге Бете и Салпентера [1]) для интенсивности излучения (на один атом) для перехода из состояния с более высокой энергией $E(n', l', m')$ в состояние с более низкой энергией $E(n, l, m)$

$$I = \frac{4e^2 \omega^4}{3c^3} |\langle n', l', m' | \mathbf{x} | n, l, m \rangle|^2. \quad (7.3.7)$$

где $\hbar\omega = E(n', l', m') - E(n, l, m)$.

Матричный элемент в формуле для интенсивности содержит векторные координаты $\mathbf{x}$, и на основе теоремы Вигнера — Экарта мы можем получить

$$\Delta l = \pm 1; \quad \Delta m = \pm 1, 0 \quad (7.3.8)$$

(см. равенства (6.100)).

Электрические дипольные переходы возможны только между состояниями различной четности, поскольку вектор $\mathbf{x}$ меняет знак при инверсии.

Рассмотрим для определенности уровень $l = 2$, распадающийся с излучением до уровня $l = 1$. Таким образом, $\Delta l = 1$ и для $\Delta m = \pm 1, 0$ имеется девять разрешенных электрических дипольных переходов. Мы получаем диаграмму энергетических уровней, изображенную на рис. 7.1. Таким образом, испускаемое излучение состоит из трех частот (нормальный триплет) $\omega_0 + \omega_L$, ω_0 , $\omega_0 - \omega_L$. Относительные интенсивности I_{+1} , I_0 , I_{-1} этих трех линий получаются из соотношения (7.3.7). Для линии $\omega_0 + k\omega_L$ находим

$$I_k = \sum_{m'm} (C_{m', -k, m}^{l+1, l})^2 = \frac{(2l+1)}{3}. \quad (7.3.9)$$

Таким образом, эти три линии имеют одинаковую полную интенсивность (проинтегрированную по всем направлениям). (Предполагается, что заселенность возбужденных состояний является равномерной.)

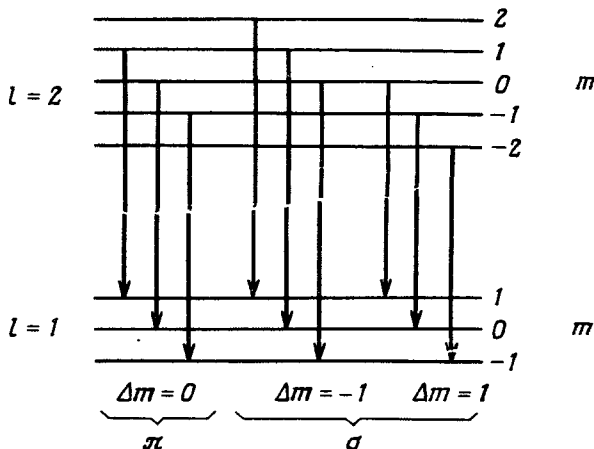


РИС. 7.1. Разрешенные электрические дипольные переходы между двумя уровнями с $l = 2$ и $l = 1$.

Для определения различных угловых распределений мы можем поступить следующим образом. Излучение с частотой $\omega_+ = \omega_0 + \omega_L$, если оно наблюдается вдоль направления магнитного поля, будет нести внутренний угловой момент величины $S = 1$ и проекции $M_S = 1$ ($S = 1$, поскольку излучение дипольное; $M_S = 1$, так как M_S излучения есть Δm уровней); следовательно, оно обладает правой круговой поляризацией.

Угловое распределение излучения с правой круговой поляризацией¹⁾ частоты $\omega = \omega_0 + \omega_L$ может быть найдено непосредственно из следующих соображений, основанных на теории углового момента: а) излучение несет угловой момент величины $S = 1$; б) вдоль направления движения $\mathbf{k}$ излучение несет одну единицу внутреннего углового момента (правая круговая поляризация) и в) для $\mathbf{k}$ вдоль направления поля $\mathbf{B}$ компонента углового момента $M_S = 1$. Отсюда следует, что вероятность наблюдения излучения вдоль произвольного направления $\mathbf{k}$ пропорциональна квадрату матрицы вращения:

$$\text{Вероятность} \propto |\mathcal{D}_{1,1}^1(R^k)|^2,$$

¹⁾ Предполагается, что детектор излучения в идеальном случае измеряет только излучение частоты $\omega_0 + \omega_L$ с правой круговой поляризацией.

где R^k — ортогональная матрица, которая вращает направление $\hat{e}_3$ до получения направления $\hat{k} = \mathbf{k}/k$. Находим,

$$|\mathcal{D}_{1,1}^1(R^k)|^2 = \sum_S (C_{1,-1,0}^{1,1S})^2 d_{0,0}^S(\cos \theta) \\ = \frac{1}{3} + \frac{1}{2}P_1(\cos \theta) + \frac{1}{6}P_2(\cos \theta), \quad (7.3.10)$$

где $\cos \theta = \hat{e}_3 \cdot \hat{k}$.

Эти рассуждения показывают, что вдоль направления магнитного поля имеются только две компоненты излучения (равной интенсивности): правая круговая (по часовой стрелке) с частотой $\omega = \omega_0 + \omega_L$ и левая круговая с частотой $\omega = \omega_0 - \omega_L$. Отметим, что это ассоциирование фиксирует знак заряда электрона (для противоположного заряда соотношение левого и правого переходит в противоположное); нормальный эффект Зеемана дал первое доказательство того, что излучающие заряды в атоме отрицательные. (Данные также дают значение отношения e/m_0 .)

Перпендикулярно направлению поля находим три компоненты, все линейно поляризованные; несмещенные компоненты ($\Delta m = 0$), как следует из (7.3.6), поляризованы вдоль $\mathbf{B}$; смещенные компоненты — перпендикулярно $\mathbf{B}$.

Заключаем, что нормальный эффект Зеемана может быть полностью описан непосредственно на основе теории углового момента.

г. *Аномальный эффект Зеемана.* Описание аномального эффекта Зеемана полностью определяется надлежащим учетом спина электрона. Решение проблемы не было получено быстро или без всяких усилий. Многие ученые (Зоммерфельд, Паули, Дирак) работали над этой проблемой, но решающего успеха достиг Ланде (см. формулу (7.3.19)). Принято считать, что спин (внутренний угловой момент) является релятивистским эффектом¹⁾; это неверно, как было показано при обсуждении галилеевой относительности в гл. 1 (см. примечание 3). В самом деле, не составляет особого труда надлежащим образом ввести в галилеев гамильтониан H_0 спин. Воспользовавшись тождеством $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$, где $\{\sigma_j\}$ — матрицы Паули, можно переписать гамильтониан H_0 в эквивалентной форме

$$H_0 = \frac{1}{2m_0} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 + V(r). \quad (7.3.11)$$

Это новое выражение приобретает смысл, когда вводится внешнее магнитное поле при помощи предписания калибровочной инвариантности $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e \mathbf{A}/c$. Используя правило Дирака $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$, находим

$$H = H_0 - \left(\frac{eh}{2m_0c} \right) \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} - \left(\frac{eh}{2m_0c} \right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (7.3.12)$$

¹⁾ Эта точка зрения основана на том факте, что уравнение Дирака для релятивистского электрона автоматически предсказывает значение спина электрона $\frac{1}{2}$ и значение g -фактора 2.

Поскольку спиновый угловой момент $S = \frac{1}{2}\sigma$, мы видим, что теперь взаимодействие выражается формулой

$$H' = -\frac{eh}{2m_0c}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} = -\frac{eh}{2m_0c}(\mathbf{J} + \mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}, \quad (7.3.13)$$

где $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

Определяя g -фактор как численное отношение магнитного момента к угловому моменту, из равенства (7.3.13) мы находим

$$g_{\text{орб}} = 1 \text{ и } g_{\text{спин}} = 2 \quad (7.3.14)$$

(в единицах магнетона Бора $-\frac{eh}{2m_0c}$).

Замечая далее, что H' коммутирует с L^2 и S^2 , мы видим, что подходящим базисом для вычисления поправки к энергии за счет H' является спаренный базис:

$$\begin{aligned} |n(l\frac{1}{2})jm\rangle &= \sum_{\mu\nu} C_{\mu\nu m}^{l\frac{1}{2}j} |n l \mu\rangle \otimes |\frac{1}{2} \nu\rangle \\ &= R_{nl} y^{(l\frac{1}{2})jm}. \end{aligned} \quad (7.3.15)$$

(см. соотношения (6.33) — (6.39) и (6.57)).

Кроме того, в теории возмущений первого порядка требуются только матричные элементы, диагональные по j . Поскольку $\mathbf{S}$ — векторный оператор по отношению к $\mathbf{J}$, то из теоремы Вигнера — Экарта следует (см. равенство (3.246) гл. 3)

$$\begin{aligned} \langle n(l\frac{1}{2})jm | S_\mu | n(l\frac{1}{2})jm \rangle &= (-1)^{j+1+l+1} [2(2j+1)]^{\frac{1}{2}} \langle \frac{1}{2} || S || \frac{1}{2} \rangle \begin{Bmatrix} j & l & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 & j \end{Bmatrix} C_{\mu m}^{j\frac{1}{2}j} \\ &= [j(j+1)]^{-1} \langle n(l\frac{1}{2})jm | (\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}) J_\mu | n(l\frac{1}{2})jm \rangle. \end{aligned} \quad (7.3.16)$$

Правая часть последнего равенства получена непосредственно из соотношений (6.87) и (6.89) гл. 6 путем замены $\mathbf{A}$ на $\mathbf{S}$, l на j и $\mathcal{Y}_{lm}$ на $|jm\rangle$.

Поскольку используется теория возмущений первого порядка, мы можем заменить оператор H' его сужением на $(2j+1)$ -мерное подпространство, которое натягивается на ортонормированные векторы (7.3.15) при $m = j, j-1, \dots, -j$:

$$H'_{\text{сужение}} = -\frac{eh}{2m_0c} \left(1 + \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}}{J^2} \right) \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}. \quad (7.3.17)$$

(Тогда этот оператор имеет такие же диагональные по j матричные элементы, как и оператор H' .)

Поскольку скалярное произведение $\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}$ в силу сложения угловых моментов может быть представлено в виде

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{J} = (J^2 + S^2 - L^2)/2, \quad (7.3.18)$$

мы получаем наиболее общий g -фактор для базиса (7.3.15) (формулу Ланде)

$$g = \left\langle n(l\frac{1}{2})jm \left| 1 + \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}}{J^2} \right| n(l\frac{1}{2})jm \right\rangle = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{j(j+1)}. \quad (7.3.19)$$

где для рассматриваемого случая имеем $s = 1/2$. Соответствующие энергетические уровни определяются соотношением (см. (7.3.5))

$$E[n(l\frac{1}{2})jm] = E_0(n, l) - \left(\frac{ehB}{2m_0c} \right) g m. \quad (7.3.20)$$

Заметим, что, как следует из теории углового момента, *фактор Ланде* $g - 1$ с точностью до инвариантных множителей является коэффициентом Рака.

Из этих результатов становится ясно, что сдвиги уровней уже не являются целым кратным ларморовской энергии $\hbar\omega_L$. Следовательно, характерный триплетный спектр нормального эффекта Зеемана утрачен. Точно так же ясно, что частота, поляризация и интенсивность каждой составляющей могут быть вычислены на основе соответствующих коэффициентов Вигнера и матриц вращения с помощью тех же методов, что и выше. Продолжение этих рассуждений привело бы нас к относительно малоинтересным деталям.

Важно заметить, однако, что взаимодействие (7.3.17) не совпадает полностью с взаимодействием (7.3.13), так как равенство (7.3.17) справедливо только для матричных элементов, диагональных по j . Теорема Вигнера — Экарта применима к векторному оператору $J + S$ в соотношении (7.3.13) и может быть использована для вычисления всех матричных элементов взаимодействия (7.3.13). Диагонализация получающейся матрицы гамильтониана представляется гораздо более сложной для аномального эффекта Зеемана, и результаты выглядят просто только в различных предельных случаях.

д. Связь с развитием теории углового момента. Разгадка сложностей аномальных спектров Зеемана оказалась монументальной задачей. Квантовой теорией Бора была введена в 1913 г. эвристическая идея квантования орбитального углового момента в атоме водорода (см. примечание в конце этого раздела). Электронные орбиты все еще рассматривались как классические с электроном, движущимся в плоскости, перпендикулярной направлению углового момента. Зоммерфельд и Вильсон в 1916 г. обобщили правило квантования Бора на фазовые интегралы теории Гамильтона — Якоби. Зоммерфельд в 1918 г. вводит понятие «пространственного квантования» углового момента; это эвристическая картина, в которой вектор L квантованного углового момента обладает дискретными ориентациями (отправная точка векторной модели).

Затем основное внимание было перенесено на проблему двух электронов, т.е. проблему атома гелия, и (такова сила неисследованных предшествовавших идей — в данном случае аналогия с орбитами планет вокруг Солнца) два электрона всегда рассматривались в одной плоскости (см. книгу Юргату и Ван дер Мерве [2], с. 2). Ланде вместе с Борном были первыми, кто разрушил это привычное представление, и именно Ланде в 1919 г. впервые рассмотрел сложение квантованных угловых моментов (он ввел для этой цели известную теперь векторную модель).

Однако только в 1923 г. после продолжительных числовых расчетов Ланде пришел к своему результату для g -фактора. Его замена величины L^2 на $l(l+1)$ (и аналогично для S^2 и J^2) была полностью эмпирической, так же как и принятое значение $g_{\text{спин}} = 2$.

Объяснение этих удивительных экспериментально найденных фактов было получено лишь позднее в квантовой теории углового момента, развитой Борном и Йорданом, а также Вигнером.

Любопытно заметить, что зоммерфельдовское «пространственное квантование» уже содержало в себе результат $J^2 = j(j+1)$. Чтобы убедиться в этом, заметим, что эта модель показывает, что $-j \leq m \leq j$ со значениями с интервалами в единицу. Взяв $J_3 \rightarrow m$ в качестве известного, вычислим $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$. Если усреднить по мультиплету, то получим

$$\langle J^2 \rangle = \frac{1}{2j+1} \sum_m (\langle J_1^2 \rangle + \langle J_2^2 \rangle + \langle J_3^2 \rangle). \quad (7.3.21)$$

Используя равенства $\langle J_1^2 \rangle = \langle J_2^2 \rangle = \langle J_3^2 \rangle = m^2$, поскольку при усреднении ни одному из направлений не отдается предпочтения перед другими (предположение, подобное «эргодичности»), находим

$$\langle J^2 \rangle = \frac{3}{2j+1} \sum_m m^2 = \frac{3}{2j+1} \left[\frac{j(j+1)(2j+1)}{3} \right]. \quad (7.3.22)$$

Таким образом, получаем искомое соотношение $J^2 = j(j+1)$ ¹⁾. Этот аргумент, как было отмечено в разд. 3 гл. 3, принадлежит Фейнману и легко может быть обобщен на высшие унитарные группы.

е. Заключительные замечания. Рассмотренный выше эффект Зеемана является весьма грубым по нынешним стандартам в спектроскопии. Методы оптической накачки, двойного резонанса (Броссель — Биттер), спектроскопия Мессбауэра и особенно лазерные источники высокой интенсивности позволили достигнуть качественно отличного разрешения. Тем не менее принципы использования метода углового момента остаются без изменения, и осложнения по существу относятся к деталям, причем физика ограничена только изобретательностью экспериментатора.

Тот факт, что g -фактор электрона несколько изменяется ($\sim 10^{-4}$) квантовыми эффектами (как электромагнитного поля, так и электрон-позитронного поля), хорошо известен физикам. Следует отметить, что современные эксперименты легко обнаруживают (через эффект Хэнли) качественные, причем значительные, изменения наблюдаемого g -фактора за счет электромагнитной среды. Хорошее обсуждение этого вопроса дал Кастлер [3].

ж. Примечание. Прекрасный обзор возникновения квантовой теории дан Германом [4]. Согласно этому обзору, первое предположение о том, что вращатель-

¹⁾ Отметим, что физическое объяснение появления «лишнего» члена j в выражении $j(j+1)$ следует искать в принципе неопределенности. Состояния ψ вида $J_+ \psi = 0$ (или $J_- \psi = 0$) обладают свойствами минимальной неопределенности [6]. Для такого состояния J_3 является точным и принимает максимальное собственное значение: $J_3 = j$. Тогда флуктуации величин J_1 и J_2 минимальны: $(\Delta J_1^2) = (\Delta J_2^2) = j/2$. Именно эти флуктуации величин J_1 и J_2 и дают «лишний» член.

ное движение должно быть квантованным, было сделано Нернстом в 1911 г. (см. [4], с. 144). Нильс Бьеррум применил эту идею к полосатому спектру в 1912 г. (см. [4], с. 144), но получил неудовлетворительные результаты, так как он выбрал квантованной *вращательную энергию*, а не *угловой момент*.

Удивительно, что Нильс Бор в своей классической работе [5] проквантовал энергию атома водорода в единицах *половины* постоянной Планка, причем значение $1/2$ было фактически *эмпирическим* и выбрано как наилучшая числовая подгонка в формуле Ридберга! Однако в последней части своей работы Бор дал «простое объяснение» своих результатов, явно провозглашая правило квантования (орбитального) углового момента (для каждого электрона) в единицах $\hbar/2\pi$.

Литература

1. Bethe H. A., Salpeter E. E., Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Atoms. Springer, Berlin, 1957. [Имеется перевод: Бете Г., Солпитеер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. — М.: Физматгиз, 1960.]
2. Yourgrau W., van der Merwe A. (eds.), Perspectives in Quantum Theory (Essays in honor of Alfred Lande). MIT Press, Cambridge, Mass., 1971.
Перспективы в квантовой теории.
3. Kastler A., How the Landé factor of an atom can be changed by putting the atom in a radiofrequency bath, *ibid.*, pp. 71 — 77.
Как можно изменить множитель Ланде для атома, поместив атом в радиочастотную ванну.
4. Hermann A., The genesis of the Quantum Theory, MIT Press, Cambridge, Mass., 1971.
Генезис квантовой теории.
5. Bohr N., Phil. Mag., 26, 1 (1913).
О строении атомов и молекул.
6. Biedenharn L. C., Louck J. D., Racah-Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

4. Нерелятивистский атом водорода

Задача об атоме водорода представляет собой блестящий пример применения общего метода углового момента. Именно с этой частной точки зрения мы рассмотрим эту задачу.

Паули [1] впервые определил энергетический спектр атома водорода (получив, таким образом, формулу Бальмера), используя алгебраические методы новой матричной механики. Эта проверка концепций матричной механики имела большое значение, но эффективность симметричной техники не была в полной мере оценена, поскольку последовавшее затем решение этой задачи на основе волновой механики Шредингера [2] было более доступным для физиков, и этот последний метод стал преобладающим.

Методы Паули были фундаментальными с другой точки зрения. Он осознал роль наблюдаемой Рунге — Ленца¹⁾ A_0 , определяемой выражением²⁾

$$A_0 \equiv \frac{\mathbf{x}}{r} + (2Zm_0e^2)^{-1}(\mathbf{L} \times \mathbf{p} - \mathbf{p} \times \mathbf{L}). \quad (7.4.1)$$

при образовании замкнутой матричной алгебры с наблюдаемой углового момента $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ (см. соотношения (7.4.8) и (7.4.9)).

Как мы увидим ниже, задача о нерелятивистском³⁾ атоме водорода может быть полностью решена с использованием свойств $\mathbf{L}$ и A_0 (мы рассмотрим как бесспиновый случай, так и случай спина 1/2).

Настоящий раздел включает в себя а) идентификацию алгебр Ли, определяемых посредством $\mathbf{L}$ и A_0 ; б) подробную разработку представлений алгебры (в конечном случае), которые реализуются на *собственных состояниях энергии* в двух базисах, соответствующих разделению уравнения Шредингера в параболических и сферических координатах; в) подробное обсуждение связи между сферическими гармониками в четырехмерном пространстве и представлением импульсного пространства для состояний атома водорода и г) изящное решение задачи об атоме водорода со спином (паулиевской частице), получаемое с использованием дираковского квантового числа каппа.

а. *Алгебраические аспекты.* Гамильтониан для электрона (заряда e и массы m_0), движущегося в кулоновском поле фиксированного ядра (с зарядом $-Ze$),⁴⁾ задается в виде

$$H = (2m_0)^{-1}\mathbf{p}^2 - Ze^2/r, \quad (7.4.2)$$

$$\text{где} \quad r = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{1/2}, \quad \mathbf{p}^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2. \quad (7.4.3)$$

Удобно воспользоваться безразмерными переменными, выбрав в качестве единицы длины a/Z , где $a = \hbar^2/m_0e^2$ — радиус первой боровской орбиты. Измеряя $\mathbf{L}$ в единицах $\hbar$, импульс $\mathbf{p}$ в единицах $\hbar Z/a$ и энергию H в единицах $Z^2e^2/2a$, мы находим для интересующих нас трех операторов следующие безразмерные представления:

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \mathbf{x} \times \mathbf{p}, \\ A_0 &= \frac{\mathbf{x}}{r} + \frac{1}{2}(\mathbf{L} \times \mathbf{p} - \mathbf{p} \times \mathbf{L}), \\ H &= \mathbf{p}^2 - \frac{2}{r}. \end{aligned} \quad (7.4.4)$$

¹⁾ Квантование наблюдаемой A_0 было также одним из первых примеров квантования классической наблюдаемой, выходящих за пределы фундаментальных правил квантования координат, линейных импульсов и угловых моментов; произведение классических наблюдаемых AB следует заменить симметризованным произведением $(AB + BA)/2$.

Превосходные обзоры, касающиеся исторических аспектов вектора Рунге — Ленца, даны Мак-Интошем [3] и Голдстейном [4]. Варианты вектора Рунге — Ленца обсуждаются Кобаяши [4а].

²⁾ Мы используем обозначение A_0 для физического оператора Рунге — Ленца, чтобы отличать его от нормированной формы A , введенной в (7.4.12).

³⁾ Это существенное ограничение, поскольку релятивистские (нарушающие симметрию) эффекты могут быть важными. Превосходное изложение релятивистской задачи Кулона дано в обзоре Мак-Интоша [3].

Заметим, что оператор Рунге — Ленца — Паули A_0 является векторным оператором по отношению к L :

$$[L_i, A_{0j}] = ie_{ijk}A_{0k}. \quad (7.4.5)$$

Чтобы взять матричные элементы, полезно также переписать A_0 в виде

$$A_0 = \frac{x}{r} + \frac{i}{2} [L^2, p]. \quad (7.4.6)$$

Оператор $A_0^2 = A_0 \cdot A_0$ связан с оператором углового момента L^2 и гамильтонианом H соотношением

$$A_0 \cdot A_0 = H(L^2 + 1) + 1. \quad (7.4.7)$$

Это соотношение является операторной формой классического соотношения для орбиты (закона конических сечений Кеплера).

Поскольку величина $A_0 \cdot A_0$ инвариантна относительно вращений (коммутирует с L), из равенства (7.4.7) видно, что одновременная диагонализация $A_0 \cdot A_0$ и L^2 решит также задачу на собственные значения для оператора H . Этим обуславливается вычисление коммутаторов оператора A_0 с H и с самим собой.

Свойства коммутаторной алгебры, которые получаются для H , L и A_0 , следующие:

$$L \times L = iL.$$

$$[L_i, A_{0j}] = ie_{ijk}A_{0k}; \quad (7.4.8)$$

$$A_0 \times A_0 = -iLH.$$

$$[H, L] = [H, A_0] = 0. \quad (7.4.9)$$

К соотношениям (7.4.7) — (7.4.9) следует также добавить соотношение

$$L \cdot A_0 = 0. \quad (7.4.10)$$

Имеются две существенные особенности, которые следует отметить в связи с коммутаторной алгеброй (7.4.9): а) гамильтониан H входит в коммутационные соотношения; б) векторный оператор A_0 , определенный согласно (7.4.4), не обладает свойством производной (см. (3.217) в гл. 3) (следствия обсуждаются ниже).

Рассмотрим следствия первой из этих особенностей. Хотя оператор H эрмитов, он не является положительно определенным и в соответствии с этим может иметь положительные, нулевое и отрицательные собственные значения:

$$H\Psi_E = E\Psi_E. \quad (7.4.11)$$

Таким образом, структура коммутационных соотношений (7.4.9) зависит от собственного пространства энергии, на котором действуют операторные соотношения (7.4.9). Следовательно, при интерпретации (7.4.9) на языке обычных обозначений алгебр Ли мы должны принять, что векторные пространства векторов состояния, на которых разрешено действие этих соотношений, являются собственными пространствами энергии.

Потребовав выполнения этих условий, мы можем теперь нормировать оператор A_0 :

$$A = \begin{cases} A_0(-H)^{-\frac{1}{2}} & \text{для } E < 0, \\ A_0 & \text{для } E = 0, \\ A_0(H)^{-\frac{1}{2}} & \text{для } E > 0. \end{cases} \quad (7.4.12)$$

Равенства (7.4.8) и (7.4.9) можно теперь привести к виду

$$\begin{aligned} L \times L &= iL, \\ [L_i, A_j] &= ie_{ijk}A_k, \\ A \times A &= \varepsilon iL, \end{aligned} \quad (7.4.13)$$

где $\varepsilon = 1, 0, -1$ для областей $E < 0, E = 0, E > 0$ соответственно. В результате перенормирования оператора A_0 равенства (7.4.7) и (7.4.10) принимают вид

$$\begin{aligned} (L^2 + \varepsilon A^2 + 1)H &= -1, & \varepsilon = \pm 1 \\ H(L^2 + 1) + 1 &= A^2, & \varepsilon = 0 \end{aligned} \quad (7.4.14)$$

$$L \cdot A = 0.$$

Рассмотрим теперь три алгебры Ли (7.4.13), соответствующие значениям $\varepsilon = +1, 0, -1$:

1. Для $\varepsilon = +1$ ($E < 0$, сферическая геометрия) коммутационные соотношения (7.4.13) имеют стандартный вид $SO(4) \supset SO(3)$ алгебры Ли группы собственных ортогональных матриц 4×4 , т.е. $SO(4)$. Фок [5] продемонстрировал, что $SO(4)$ является группой симметрии задачи Кеплера, записав уравнение Шредингера как интегродифференциальное уравнение в импульсном пространстве и установив связь волновых функций атома водорода в импульсном пространстве со сферическими гармониками в четырехмерном пространстве. Баргман [6] показал, что инфинитезимальные генераторы преобразований Фока есть угловой момент L и вектор Рунге — Ленца A . (Ниже мы рассмотрим импульсное представление с точки зрения алгебры операторов L и A .)

Соотношения (7.4.13) могут быть приведены к известному виду «сложения двух угловых моментов» путем замены базиса в алгебре

$$\begin{aligned} J(1) &\equiv \frac{1}{2}(L + A), \\ J(2) &\equiv \frac{1}{2}(L - A). \end{aligned} \quad (7.4.15)$$

Получаем известную форму $SU(2) \times SU(2)$ коммутационных соотношений

$$J(a) \times J(a) = iJ(a), \quad a = 1, 2$$

$$[J(1), J(2)] = 0. \quad (7.4.16)$$

Однако в силу соотношения $L \cdot A = 0$ инвариантные операторы $J^2(1)$ и $J^2(2)$ тождественно равны:

$$J^2(1) = J^2(2) = (L^2 + A^2)/4. \quad (7.4.17)$$

Мы можем теперь воспользоваться результатами теории связывания угловых моментов для получения возможных собственных значений E оператора H для случая $E < 0$. Поскольку операторы $J(1)$ и $J(2)$ эрмитовы, собственными значениями $J^2(1)$ и $J^2(2)$ являются $j_1(j_1 + 1)$ и $j_2(j_2 + 1)$ соответственно, и равенство (7.4.17) допускает только решение $j = j_1 = j_2$. Таким образом, собственные значения гамильтониана H для $E < 0$, получаемые на основе (7.4.14), имеют вид

$$E = -1/(2j + 1)^2, \quad (7.4.18)$$

где $j \in \{0, 1/2, 1, \dots\}$ (какие из этих значений j реализуются в действительности, еще нужно установить).

Полученные выше в равенствах (7.4.15) — (7.4.18) результаты соответствуют *связанным состояниям* атома водорода; явные собственные состояния энергии рассматриваются ниже. Целое число $2j + 1$ в формуле (7.4.18) в соотношении (7.4.22) отождествляется с *главным квантовым числом* n спектра связанных состояний.

2. Для $\varepsilon = -1$ ($E > 0$, гиперболическая геометрия) коммутационные соотношения (7.4.13) имеют стандартный вид $SO(3, 1) \supset SO(3)$ алгебры Ли группы Лоренца. В этом случае (см. с. 338) собственные значения и собственные функции могут быть получены путем замены главного квантового числа $n (= 2j + 1)$ в рассмотренном выше дискретном случае на величину $\pm i\eta$, где η — произвольное вещественное число ($0 < \eta < \infty$). На этом пути мы получаем после надлежащей нормировки радиальных собственных функций (см. [7, 8]) все волновые функции, соответствующие точному угловому моменту. В этом случае важно иметь в виду, что каждому значению энергии $E > 0$ соответствует бесконечное множество состояний, мультиплет для каждого значения $l = 0, 1, 2, \dots$ орбитального углового момента.

3. Для $\varepsilon = 0$ ($E = 0$, параболическая геометрия) равенства (7.4.13) показывают, что компоненты вектора Рунге — Ленца $A = A_0$ коммутируют с A_0 является векторным оператором по отношению к L . (Евклидова группа в трех измерениях.) Радиальные собственные функции можно получить, если взять предел $\eta \rightarrow \infty$ от гиперболических радиальных функций. Для $E = 0$ по-прежнему находим бесконечное множество состояний, соответствующих орбитальным угловым моментам $l = 0, 1, 2, \dots$ (см. [7, 8]).

Более глубокое рассмотрение этого континуума кулоновских состояний выходит за рамки настоящей книги, и мы отсылаем читателя к работе [8] и содержащимся там ссылкам на литературу.

б. *Свойства связанных состояний атома водорода*¹⁾. Применим теперь результаты по связыванию двух угловых моментов (гл. 3) к описанию связанных состояний атома водорода. Поскольку $J(1)$ и $J(2)$ действуют в одном и том же пространстве функций, тензорное произведение кет-векторов $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ интерпретируется теперь как функция со значениями

$$\Phi_{j_1 m_1; j_2 m_2}(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x} | j_1 m_1 \rangle \langle \mathbf{x} | j_2 m_2 \rangle. \quad (7.4.19)$$

¹⁾ Приведенное здесь изложение заимствовано из работы Мсадорса [9].

Сложение угловых моментов, представленное в (7.4.15), выражается следующим образом:

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

$$\mathbf{A} = \mathbf{J}(1) - \mathbf{J}(2). \quad (7.4.20)$$

Таким образом, состояния Ψ_{Elm} (см. разд. 1 — 8 гл. 6) точного орбитального углового момента являются «спаренными состояниями» угловых моментов $\mathbf{J}(1)$ и $\mathbf{J}(2)$.

Поскольку мы хотим сконцентрировать внимание на свойствах операторов $\mathbf{L}$ и $\mathbf{A}$ вместо $\mathbf{J}(1)$ и $\mathbf{J}(2)$, введем обозначения

$$\begin{aligned} m &= m_1 + m_2, \\ q &= m_1 - m_2. \end{aligned} \quad (7.4.21)$$

так что m и q являются собственными значениями L_3 и A_3 соответственно. Считая $j_1 = j_2 = j$ и определяя n согласно

$$n \equiv 2j + 1, \quad (7.4.22)$$

мы вводим также обозначение

$$\Phi_{nqm}(\mathbf{x}) \equiv \Phi_{(n-1)/2, (m+q)/2; (n-1)/2, (m-q)/2}(\mathbf{x}). \quad (7.4.23)$$

Используя соотношения (7.4.20) и стандартное действие оператора $\mathbf{J}(a)$ на состояния (7.4.19), находим (после учета сделанных выше изменений в обозначениях) следующие формулы действия операторов $\mathbf{L}$ и $\mathbf{A}$ на состояния (7.4.23):

$$\begin{aligned} L_+ \Phi_{nqm} &= \frac{1}{2}[(n-m-q-1)(n+m+q+1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n, q+1, m+1} \\ &+ \frac{1}{2}[(n-m+q-1)(n+m-q+1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n, q-1, m+1}, \\ L_- \Phi_{nqm} &= \frac{1}{2}[(n+m+q-1)(n-m-q+1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n, q-1, m-1} \\ &+ \frac{1}{2}[(n+m-q-1)(n-m+q+1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n, q+1, m-1}; \quad (7.4.24) \\ A_+ \Phi_{nqm} &= \frac{1}{2}[(n-m-q-1)(n+m+q+1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n, q+1, m+1} \\ &- \frac{1}{2}[(n-m+q-1)(n+m-q+1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n, q-1, m+1}, \\ A_- \Phi_{nqm} &= \frac{1}{2}[(n+m+q-1)(n-m-q+1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n, q-1, m-1} \\ &- \frac{1}{2}[(n+m-q-1)(n-m+q+1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n, q+1, m-1}. \quad (7.4.25) \end{aligned}$$

Мы имеем также уравнения на собственные значения

$$L_3 \Phi_{nqm} = m \Phi_{nqm},$$

$$A_3 \Phi_{nqm} = q \Phi_{nqm}.$$

$$(L^2 + A^2 + 1)\Phi_{nqm} = n^2\Phi_{nqm},$$

$$H\Phi_{nqm} = (-1/n^2)\Phi_{nqm}. \quad (7.4.26)$$

Для каждого целого $n \geq 1$, из равенств (7.4.21) и (7.4.22) находим, что области значений m и q в соотношениях (7.4.24) — (7.4.26) составляют

$$\begin{aligned} m &= n-1, n-2, \dots, -(n-1), \\ q &= n-|m|-1, n-|m|-3, \dots, -n+|m|+1; \end{aligned} \quad (7.4.27)$$

или альтернативно

$$\begin{aligned} q &= n-1, n-2, \dots, -(n-1), \\ m &= n-|q|-1, n-|q|-3, \dots, -n+|q|+1. \end{aligned} \quad (7.4.28)$$

Таким образом, для каждого n , допустимого в соотношениях (7.4.24) — (7.4.26), вырождение энергетического уровня

$$E_n = -1/n^2 \quad (7.4.29)$$

равно
$$\sum_q (2n-1) = n^2. \quad (7.4.30)$$

Все n^2 состояний $\{\Phi_{nqm}\}$, соответствующих значениям m и q , приведенным в (7.4.27), должны существовать, если существует $\Phi_{n,0,n-1}$. Сама функция $\Phi_{n,0,n-1}$ определяется с точностью до нормировки из уравнений

$$\begin{aligned} L_+ \Phi_{n,0,n-1} &= 0, & A_+ \Phi_{n,0,n-1} &= 0, \\ L_3 \Phi_{n,0,n-1} &= (n-1)\Phi_{n,0,n-1}, & A_3 \Phi_{n,0,n-1} &= 0. \end{aligned} \quad (7.4.31)$$

Единственное нормированное решение¹⁾ (см. разд. 2 гл. 6) этих уравнений имеет вид

$$\Phi_{n,0,n-1}(x) = \left(\frac{2}{n}\right)^{n+1} \frac{e^{-r,n}}{\sqrt{(2n)!}} y_{n-1,n-1}(x). \quad (7.4.32)$$

Это решение справедливо для каждого $n = 1, 2, 3, \dots$. Таким образом, в собственных значениях энергии (7.4.29) допускаются все положительные целые значения n . (Для проверки непротиворечивости результатов, заимствованных из теории углового момента, необходимо убедиться, что вектор **A** Рунге — Ленца — Паули действительно является эрмитовым оператором отно-

¹⁾ Произвольный фазовый множитель (который может зависеть от n) выбран таким образом, что знак радиальной функции

$$R_{n,n-1}(r) = \left(\frac{2}{n}\right)^{n+1} \frac{r^{n-1}}{\sqrt{(2n)!}} e^{-r,n}$$

согласуется с полученным ниже общим результатом (7.4.43). Если нормировка на единицу проведена в физическом пространстве, а не в безразмерном координатном пространстве, то правая часть выражения (7.4.32) умножается на дополнительный множитель $(Z/a)^{3/2}$.

сительно заданного равенством (6.8) внутреннего произведения, если ограничиться функциями $\Phi(x)$, принадлежащими конечномерному гильбертову пространству, натянутому на n^2 функций $\{\Phi_{nqm}: n \text{ конкретизировано}\}$.

Тогда свойство эрмитовости трех операторов L_3 , A_3 и $L^2 + A^2$ (или гамильтониана H) означает, что функции Φ_{nlm} ортогональны (ортонормированы, если проведена нормировка):

$$\int dx \Phi_{n'q'm'}^*(x) \Phi_{nqm}(x) = \delta_{n'n} \delta_{q'q} \delta_{m'm}. \quad (7.4.33)$$

Предыдущие результаты (7.4.19) — (7.4.33) являются реализациями абстрактной теории углового момента в несвязанном базисе $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$. Вигнеровские связанные состояния в соответствии с (7.4.20) являются более известными состояниями точного орбитального углового момента [10]

$$\Psi_{nlm} \equiv \sum_q C_{(m+q)/2, (m-q)/2, m}^{(n-1)/2, (n-1)/2, l} \Phi_{nqm}, \quad (7.4.34)$$

$$L^2 \Psi_{nlm} = l(l+1) \Psi_{nlm},$$

$$L_3 \Psi_{nlm} = m \Psi_{nlm},$$

$$H \Psi_{nlm} = -\frac{1}{n^2} \Psi_{nlm}, \quad (7.4.35)$$

где теперь для каждого $n = 1, 2, \dots$ области значений l и m таковы:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1,$$

$$m = l, l-1, \dots, -l. \quad (7.4.36)$$

Операторы $L_{\pm}$ действуют на состояния Ψ_{nlm} стандартным образом:

$$L_{\pm} \Psi_{nlm} = [(l \mp m)(l \pm m + 1)]^{\pm} \Psi_{n, l \pm 1, m \pm 1}. \quad (7.4.37)$$

Для полноты приведем также действие оператора Рунге — Ленца — Паули на связанный базис¹⁾ (7.4.34)

$$\begin{aligned} A_{\pm} \Psi_{nlm} = & \mp \left[\frac{(n+l+1)(n-l-1)(l \pm m+1)(l \pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{\pm} \Psi_{n, l \pm 1, m \pm 1} \\ & \pm \left[\frac{(n+l)(n-l)(l \mp m-1)(l \mp m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{\pm} \Psi_{n, l-1, m \pm 1}, \\ A_3 \Psi_{nlm} = & \left[\frac{(n+l)(n-l)(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{\pm} \Psi_{n, l-1, m} \end{aligned}$$

¹⁾ Симметрия коэффициентов во втором из равенств (7.4.38) относительно взаимной замены n и m совершенно неожиданна, поскольку n и m имеют различные физические интерпретации. Объяснение этой симметрии найдено совсем недавно в рамках общего рассмотрения радиальных интегралов [34].

$$+ \left[\frac{(n+l+1)(n-l-1)(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}} \Psi_{n, l+1, m}. \quad (7.4.38)$$

При получении этих формул была применена (к конечному векторному пространству функций, обладающих собственным значением энергии E_n) теорема Вигнера — Эккарта, причем редуцированные матричные элементы равны (см. табл. 8 в приложении)

$$\langle n, l+1 \| A \| nl \rangle = \left[\frac{(l+1)(n+l+1)(n-l-1)}{(2l+3)} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$\langle nl \| A \| nl \rangle = 0,$$

$$\langle n, l-1 \| A \| nl \rangle = - \left[\frac{l(n+l)(n-l)}{(2l-1)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (7.4.39)$$

(Напомним, что эти редуцированные матричные элементы относятся к сферическим компонентам $A_{+1} \equiv -A_+/\sqrt{2}$, $A_0 \equiv A_3$, $A_{-1} \equiv A_-/\sqrt{2}$.)

Выраженные равенствами (7.4.37) и (7.4.38) результаты можно переписать в весьма компактном виде, используя спиновые матрицы Паули и спиноры центрального поля (см. (7.4.94)).

в. Явные волновые функции атома водорода. Равенства (7.4.24), (7.4.25), (7.4.37) и (7.4.38) можно использовать различными способами для получения явного вида функций Φ_{nqm} и Ψ_{nlm} . Например, один из таких способов заключается в построении подходящих операторов сдвига для генерирования всех состояний из (см. (7.4.32))

$$\Psi_{n, n-1, n-1}(x) = \Phi_{n, 0, n-1}(x). \quad (7.4.40)$$

Эта процедура может служить демонстрацией того, что ассоциированная с операторами L и A алгебра $SO(4)$ полностью определяет (с точностью до фазовых и нормировочных условий) решение задачи на связанные состояния атома водорода. На стр. 337 дана явная процедура определения функций Ψ_{nlm} . Здесь мы приводим результаты для функций Ψ_{nlm} и Φ_{nqm} .

Из обсуждения в разд. 8 гл. 6 мы знаем, что волновые функции Ψ_{nlm} должны иметь вид

$$\Psi_{nlm}(x) = \left(\frac{2}{n} \right)^l F_{nl}(r) \mathcal{Y}_{lm}(x) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (7.4.41)$$

где

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{n} \right)^l F_{nl}(r). \quad (7.4.42)$$

Явное выражение для радиальной функции F_{nl} имеет вид (см. (7.4.104) — (7.4.108))

$$\begin{aligned} F_{nl}(r) &= (-1)^{n-l-1} \frac{2}{n^2} \left[\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-r/n} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{n} \right) \\ &= \frac{2(-1)^{n-l-1}}{n^2(2l+1)!} \left[\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-r/n} {}_1F_1 \left(-n+l+1; 2l+2; \frac{2r}{n} \right). \end{aligned} \quad (7.4.43)$$

В этом результате использовано следующее определение присоединенных полиномов Лагерра¹⁾:

$$L_k^{\alpha}(\xi) \equiv \sum_{s=0}^k \binom{k+\alpha}{k-s} \frac{(-\xi)^s}{s!} = \binom{k+\alpha}{k} {}_1F_1(-k; \alpha+1; \xi) \quad (7.4.44)$$

для $k = 0, 1, 2, \dots$ и произвольного параметра α , где ${}_1F_1(a; b; \xi)$ обозначает вырожденную гипергеометрическую функцию.

В формулах (7.4.41) — (7.4.43) r — безразмерное радиальное расстояние $r = ZR/a$, где R — физическое расстояние. Нормировка такова, что

$$\int_0^{\infty} r^2 dr [R_{nl}(r)]^2 = 1.$$

Функции $\Phi_{nqm}(\mathbf{x})$ заданы выражениями²⁾

$$\begin{aligned} \Phi_{nqm}(\mathbf{x}) = & \frac{(-1)^{n+m+q-1/2}}{n^2 \sqrt{\pi}} \left[\frac{\left(\frac{n-m+q-1}{2}\right)! \left(\frac{n-m-q-1}{2}\right)!}{\left(\frac{n+m+q-1}{2}\right)! \left(\frac{n+m-q-1}{2}\right)!} \right]^{1/2} \\ & \times \left(\frac{x_1 + ix_2}{n} \right)^m e^{-r/n} L_{(n-m+q-1)/2}^m \left(\frac{r+x_3}{n} \right) \\ & \times L_{(n-m-q-1)/2}^m \left(\frac{r-x_3}{n} \right), \end{aligned} \quad (7.4.45)$$

$$\Phi_{n,q,-m}(\mathbf{x}) = (-1)^m \Phi_{nqm}^*(\mathbf{x}), \quad (7.4.46)$$

где $m \geq 0$, а $r = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{1/2}$. (Мы специально записали выражение (7.4.45) в декартовой форме, так что преобразование (7.4.34) можно считать преобразованием, которое действует на функции, определенные в точках $\mathbf{x}$ пространства $\mathbb{R}_3$.)

Собственные функции (7.4.41) диагонализуют операторы H , L^2 и L_3 и, если выразить их в сферических полярных координатах, разлагаются в произведение функций $R(r)$ $\Theta(\theta)$ $\Phi(\phi)$.

¹⁾ В литературе часто используется альтернативное определение

$$\bar{L}_{k+\alpha}^{\alpha}(\xi) \equiv (-1)^{\alpha} (k+\alpha)! L_k^{\alpha}(\xi) = \frac{d^{\alpha}}{d\xi^{\alpha}} L_{k+\alpha}(\xi),$$

для $\alpha = 0, 1, 2, \dots$, где $\bar{L}_k$ — полином Лагерра.

²⁾ Как только функции Ψ_{nlm} определены, функции Ψ_{nqm} определяются единственным образом путем обращения равенства (7.4.34) (и наоборот). Нетривиальной является проверка того, что явные функции, заданные при помощи формул (7.4.45) и (7.4.46), совпадают с функциями, определяемыми равенством (7.4.34). Эту проверку можно осуществить, если воспользоваться соотношениями (7.4.24) и (7.4.25) для генерирования Φ_{nqm} из $\Phi_{n,0,n-1}$, как упоминалось выше.

Собственные функции (7.4.45) диагонализуют операторы H , L_3 и A_3 и, будучи выраженными в параболических координатах

$$x_1 = \sqrt{\xi\eta} \cos \phi, \quad x_2 = \sqrt{\xi\eta} \sin \phi, \quad x_3 = (\xi - \eta)/2,$$

$$0 \leq \xi < \infty, \quad 0 \leq \eta < \infty, \quad 0 \leq \phi < 2\pi. \quad (7.4.47)$$

разлагаются в произведение функций $F_1(\xi) F_2(\eta) \Phi(\phi)$. (Калнинс и др. [11] провели тщательное исследование связи между разделением переменных в задаче об атоме водорода и существованием различных полных наборов взаимно коммутирующих наблюдаемых; полное изложение дано в их статье. См. также работу [11a], где дано систематическое рассмотрение связи между симметрией и разделением переменных.)

г. *Представление импульсного пространства.* В примечании 4 к гл. 3 мы развили теорию матриц вращения с точки зрения кватернионов и сферических гармоник в четырехмерном пространстве. Сравнивая равенства (7.4.15) и (7.4.16), которым удовлетворяют генераторы (L, A) группы $SO(4)$ атома водорода, с равенствами (3.387), (3.389) и (3.391), которым удовлетворяют генераторы $\mathcal{J}, \mathcal{K}$ группы $SO(4)$ матриц вращения (жесткого ротатора), мы видим, что эти две структуры тождественны относительно соответствия

$$\begin{aligned} L &\rightarrow -i(\mathbf{x} \times \nabla), \\ A &\rightarrow -i\left(\mathbf{x} \frac{\partial}{\partial x_0} - x_0 \nabla\right), \\ J(1) &\rightarrow \mathcal{K}, \quad J(2) \rightarrow \mathcal{J}. \end{aligned} \quad (7.4.48)$$

(Мы ввели $p_0 = -i\partial/\partial x_0$ и $\mathbf{p} = -i\nabla$ в формулы примечания 4, чтобы p_0 и $\mathbf{p}$ обозначали здесь *координаты* импульсного пространства.)

Хотя оператор орбитального углового момента является тождественным в каждой реализации, вектор Рунге — Ленца — Паули A не может быть взят *равным* соответствующему оператору в соотношениях (7.4.48), поскольку один оператор обладает свойством производной, а другой A не обладает (см. [12]). Именно по этой причине функции (см. формулы (7.4.21) и (7.4.22), а также примечание 4 гл. 3)¹⁾

$$\Psi_{m'm}^j(x_0, \mathbf{x}) \equiv (-1)^{j+m'} \sqrt{\frac{2j+1}{2\pi^2}} D_{-m',m}^j(x_0, \mathbf{x}) \quad (7.4.49)$$

не могут быть непосредственно отождествлены с волновыми функциями атома водорода в координатном пространстве (выписанными в последнем разделе).

Связь гармонических функций (7.4.49) с задачей об атоме водорода обнаруживается, если точку $(x_0, \mathbf{x})$ на сфере S^3 представить через импульс $\mathbf{p}$, спроецированный на сферу S^3 [5, 13, 14]²⁾:

¹⁾ Генераторы $\mathcal{J}$ и $\mathcal{K}$ (см. примечание 4 гл. 3) стандартным образом действуют на функции $\Psi_{m'm}^j$.

²⁾ Приведенное здесь обсуждение тесно связано с изложением в работах [13, 14].

$$\begin{aligned}x &= 2p_0 \mathbf{p} / (p_0^2 + \mathbf{p}^2), \\x_0 &= (p_0^2 - \mathbf{p}^2) / (p_0^2 + \mathbf{p}^2),\end{aligned}\quad (7.4.50)$$

где $\mathbf{p}^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$, а p_0 — вещественный (числовой) параметр (который впоследствии будет отождествлен с $\sqrt{-E}$). Ниже мы увидим, что преобразование (7.4.50) оператора $-i(\mathbf{x}\partial/\partial\mathbf{x}_0 - x_0\nabla)$ позволяет ввести новый оператор $\mathcal{B}$, который простым образом связан с представлением импульсного пространства $\mathcal{A}$ вектора Рунге — Ленца — Паули (см. (7.4.58) и (7.4.62)). Именно это соотношение приводит непосредственно к появлению сферических гармоник четырехмерного пространства в волновых функциях атома водорода. (Соотношения $1 + x_0 = 2p_0^2/(p_0^2 + \mathbf{p}^2)$, $\mathbf{p} = p_0\mathbf{x}/(1 + x_0)$, будут полезны ниже при проведении вычислений.)

С помощью равенств (7.4.50) находим

$$\begin{aligned}\nabla &= \frac{p_0^2 + \mathbf{p}^2}{2p_0} \nabla_p, \\ \frac{\partial}{\partial x_0} &= -\frac{p_0^2 + \mathbf{p}^2}{2p_0^2} (\mathbf{p} \cdot \nabla_p),\end{aligned}\quad (7.4.51)$$

где

$$\nabla_p = \left(\frac{\partial}{\partial p_1}, \frac{\partial}{\partial p_2}, \frac{\partial}{\partial p_3} \right). \quad (7.4.52)$$

Подставляя эти выражения в (7.4.48), получаем преобразование

$$-i \left(\mathbf{x} \frac{\partial}{\partial x_0} - x_0 \nabla \right) = ip_0^{-1} \left[\mathbf{p}(\mathbf{p} \cdot \nabla_p) + \frac{(p_0^2 - \mathbf{p}^2)}{2} \nabla_p \right] \equiv \mathcal{B}. \quad (7.4.53)$$

(Следует обратить внимание, что $\mathcal{B}$ обладает свойством производной при действии на функции, имеющие вид произведения, например $\Phi(\mathbf{p})\Psi(\mathbf{p})$.)

С целью интерпретации этого результата (7.4.53) относительно оператора Рунге — Ленца — Паули $\mathbf{A}$, перепишем $\mathbf{A}$ (воспользовавшись базисным коммутатором $[x_i, p_j] = i\delta_{ij}$ и разложением $\mathbf{L} \times \mathbf{p} = -\mathbf{x}\mathbf{p}^2 + (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})\mathbf{p}$) в следующем виде:

$$\mathbf{A} = \left[\mathbf{p}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) + 3i\mathbf{p} + \mathbf{x} \left(\frac{1}{r} - \mathbf{p}^2 \right) \right] / \sqrt{-H}. \quad (7.4.54)$$

Вводя $\mathbf{x} = i\nabla_p$ в определение оператора $\mathcal{B}$ и используя коммутатор

$$\left[\frac{(p_0^2 - \mathbf{p}^2)}{2}, \nabla_p \right] = \mathbf{p}, \quad (7.4.55)$$

мы приводим оператор $\mathcal{B}$ к виду

$$\mathcal{B} = p_0^{-1} [\mathbf{p}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) + i\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{x}(p_0^2 - \mathbf{p}^2)]. \quad (7.4.56)$$

Наконец, обозначая через $\Phi'_n(\mathbf{p})$ собственную функцию гамильтониана H в импульсном представлении

$$H\Phi'_n = -\frac{1}{n^2} \Phi'_n = -p_0^2 \Phi'_n, \quad p_0 \equiv 1/n, \quad (7.4.57)$$

получаем искомое соотношение

$$(\mathcal{B} + 2ip)\Phi'_n(\mathbf{p}) = \mathcal{A}\Phi'_n(\mathbf{p}), \quad (7.4.58)$$

где через $\mathcal{A}$ обозначено импульсное представление оператора Рунге — Ленца — Паули (получаемое после подстановки $\mathbf{x} = i\nabla_{\mathbf{p}}$ в выражение (7.4.54)).

Для того чтобы связать соотношение (7.4.58) с теорией гармонических функций на S^3 , нам понадобится еще один результат. Положим

$$\Phi'_n(\mathbf{p}) = F(\mathbf{p})\Lambda_n(\mathbf{p}). \quad (7.4.59)$$

Далее, используя свойство производной оператора $\mathcal{B}$, находим

$$(\mathcal{B} + 2ip_0^{-1}\mathbf{p})\Phi'_n(\mathbf{p}) = [(\mathcal{B} + 2ip)\mathbf{F}(\mathbf{p})]\Phi'_n(\mathbf{p}) + F(\mathbf{p})(\mathcal{B}\Lambda_n(\mathbf{p})). \quad (7.4.60)$$

Выбирая $F(\mathbf{p})$ такой, чтобы она удовлетворяла дифференциальному уравнению первого порядка

$$(\mathcal{B} + 2ip_0^{-1}\mathbf{p})F(\mathbf{p}) = 0, \quad (7.4.61)$$

можно эффективно избавиться от отсутствия свойства производной у оператора $\mathcal{A}$, используя соотношение

$$\mathcal{A}(F(\mathbf{p})\Lambda_n(\mathbf{p})) = F(\mathbf{p})(\mathcal{A}\Lambda_n(\mathbf{p})). \quad (7.4.62)$$

Это соотношение является ключевым результатом. Оно показывает, что если мы выбрали функции $\Lambda_n(\mathbf{p})$ такими, что $\mathcal{L} = -i\mathbf{p} \times \nabla_{\mathbf{p}}$ и $\mathcal{B}$ имеют стандартное действие на эти две функции (соотношение вида (7.4.24) и (7.4.25) или (7.4.37) и (7.4.38), то операторы $\mathcal{L} = -i\mathbf{p} \times \nabla_{\mathbf{p}}$ и $\mathcal{A}$ будут обладать тем же стандартным действием на функции $F(\mathbf{p})\Lambda_n(\mathbf{p})$, для которых $[\mathcal{L}, F(\mathbf{p})] = 0$.

С точностью до произвольного мультипликативного числового множителя, решением уравнения (7.4.61) является инвариантная относительно вращений функция

$$F(\mathbf{p}) = (p_0^2 + \mathbf{p}^2)^{-2}. \quad (7.4.63)$$

Полученные выше результаты можно теперь подытожить следующим образом. Поскольку $\mathcal{L}$ и $\mathcal{B}$ имеют стандартное действие на функции (7.4.49) с $(x_0, \mathbf{x})$, заданными при помощи преобразования (7.4.50), оператор углового момента $\mathcal{L}$ и оператор Рунге — Ленца — Паули $\mathcal{A}$ имеют в представлении импульсного пространства стандартное действие (формулы (7.4.24) — (7.4.26)) на функции импульсного пространства, определенные согласно (см. (7.4.49))

$$\Phi'_{nqm}(\mathbf{p}) = \frac{4n^{3/2}}{[1 + (np)^2]^2} \Psi_{(m+q)/2, (m-q)/2}^{(n-1)/2}(x_0, \mathbf{x}), \quad (7.4.64)$$

где $x_0, \mathbf{x}$ следует выразить через координаты импульсного пространства при помощи равенств (7.4.50) ($p_0 = 1/n, \mathbf{p} = [\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}]^{1/2}$).

Функции матрицы вращения в соотношении (7.4.64) задаются согласно (7.4.49) и включают в себя нормировочный множитель $[(2j+1)/2\pi^2]^{1/2}$ и фазу. Квантовые числа $m' = m_1$ (собственное значение оператора $J_3(1) = \mathcal{J}_3$) и $m = m_2$ (собственное значение оператора $J_3(2) = \mathcal{J}_3$) отождествляются с $(m+q)/2$ и $(m-q)/2$ соответственно. Нормировка такова, что

$$\int d\mathbf{p} \Phi'^*_{nq'm'}(\mathbf{p}) \Phi'_{nqm}(\mathbf{p}) = \delta_{n'n} \delta_{q'q} \delta_{m'm}. \quad (7.4.65)$$

Фаза функции $\Phi'_{nqm}(\mathbf{p})$ выбрана такой, что определяемая ниже равенством (7.4.67) функция $\Psi'_{nlm}(\mathbf{p})$ является Фурье-образом $\Psi_{nlm}(\mathbf{x})$:

$$\Psi'_{nlm}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}} \Psi_{nlm}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (7.4.66)$$

Тогда функция $\Phi'_{nqm}(\mathbf{p})$ также является фурье-образом $\Phi_{nqm}(\mathbf{x})$. В алгебраической процедуре, которая здесь используется, не требуется непосредственного применения фурье-преобразования, однако полная фаза (зависящая только от n) фиксирована равенством (7.4.66) для согласования с результатами, полученными другим методом.

Состояния точного углового момента в импульсном пространстве получают из Φ'_{nqm} при помощи вигнеровского связывания, заданного соотношением (7.4.34):

$$\Psi'_{nlm}(\mathbf{p}) = \sum_q C_{(m+q)/2, (m-q)/2, m}^{(n-1)/2, (n-1)/2, l} \Phi'_{nqm}(\mathbf{p}). \quad (7.4.67)$$

Эти векторы состояния в импульсном пространстве Ψ'_{nlm} удовлетворяют тогда равенствам (7.4.35) — (7.4.38) с заменой L и A на соответствующие им операторы в импульсном пространстве $\mathcal{L}$ и $\mathcal{A}$. Кроме того, функции $\{\Psi'_{nlm}\}$ можно выразить в виде соотношения (7.4.41), содержащего шаровые функции (вычисленные теперь в импульсном пространстве):

$$\Psi'_{nlm}(\mathbf{p}) = R'_n(p) \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{p}), \quad (7.4.68)$$

где $R'_n(p)$ обозначает радиальную функцию в импульсном пространстве, зависящую только от инварианта $p = (\mathbf{p} \cdot \mathbf{p})^{1/2}$ и p_0 . Ниже будет показано, что радиальная функция в импульсном пространстве имеет следующий явный вид¹⁾ ([15], равенство (28)):

$$\mathcal{R}'_n(p) = (-1)^{n-1} (2i)^l l! \left[\frac{2n(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^l \left[\frac{2n}{1+(np)^2} \right]^{l+2} C_{n-l-1}^{(l+1)}(\cos \chi), \quad (7.4.69)$$

где

$$\cos \chi \equiv \frac{p_0^2 - \mathbf{p}^2}{p_0^2 + \mathbf{p}^2} = \frac{1 - (np)^2}{1 + (np)^2}, \quad (7.4.70)$$

а $C_n^{(\alpha)}(x)$ обозначает полином Гегенбауэра (см. формулу (7.4.75) ниже).

Чтобы получить этот результат, необходимо в соотношение (7.4.72) подставить следующие определения:

$$\begin{aligned} x_0 &= \cos \chi = (p_0^2 - \mathbf{p}^2)/(p_0^2 + \mathbf{p}^2), \\ x &= 2p_0 \mathbf{p}/(p_0^2 + \mathbf{p}^2) = (\mathbf{p}/p) \sin \chi, \\ r &= \sin \chi = 2p_0 p/(p_0^2 + \mathbf{p}^2). \end{aligned} \quad (7.4.71)$$

¹⁾ Соотношение (28) работы [15] в аннотации повторяется с пропущенным важным фазовым множителем $(-1)(-i)^l$.

Затем используем равенства (7.4.64), (7.4.67) и представленную в (7.4.74) связь полиномов $H_{(n-1)/2,L}$ (см. формулу (7.4.73)) с полиномами Гегенбауэра для получения окончательного результата (7.4.69).

д. Связь между матрицами вращения и гиперсферическими функциями¹⁾. Выше мы уже видели, что между матрицами вращения и гиперсферическими функциями должна существовать связь. Как вытекает из предыдущего рассмотрения (и как очевидно уже из примечания 4 гл. 3), вид этой связи должен быть следующий:

$$\sum_{m'm} C_{m'm}^{jjL} \Psi_{m'm}^j(x_0, x) = H_{jL}(x_0, r) \mathcal{Y}_{LM}(x), \quad (7.4.72)$$

где $H_{jL}(x_0, r)$ обозначает однородный полином степени $2j - L$ по x_0 и x ($r = x \cdot x$)^{1/2}. (Связь между D -функциями Вигнера и гиперсферическими функциями была отмечена Шарпом [16] и Тальмэном [17].)

Установим сначала вид полиномиального инварианта (относительно вращений) H_{jL} , а затем свяжем его с полиномами Якоби и Гегенбауэра. Мы находим

$$H_{jL}(x_0, r) = (-1)^{2j}(2i)^L [2(2j+1)(2j-L)!(2j+L+1)!/\pi]^{\frac{1}{2}} \times \sum_s \frac{(-1)^s (L+s)! x_0^{2j-2s-L} r^{2s}}{(2L+2s+1)!(2j-2s-L)!s!}, \quad (7.4.73)$$

где суммирование ведется по всем целым s , таким, что факториалы неотрицательны. Связь полиномов H_{jL} со специальными функциями такова:

$$H_{jL}(\cos \chi, \sin \chi) = (-1)^{2j}(2i)^L L! \left[\frac{2(2j+1)(2j-L)!}{\pi(2j+L+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} C_{2j-L}^{(L+1)}(\cos \chi), \quad (7.4.74)$$

где через $C_n^{(\alpha)}(x)$ обозначены полиномы Гегенбауэра.

Полиномы Гегенбауэра при $n = 0, 1, 2, \dots$ могут быть определены при помощи полиномов Якоби (см. соотношение (3.67) гл. 3) или гипергеометрических функций следующим образом:

$$C_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(2\alpha)_n}{(\alpha + \frac{1}{2})_n} P_n^{(\alpha-1, \alpha-1)}(x) = \frac{(2\alpha)_n}{n!} {}_2F_1\left(-n, n+2\alpha; \alpha + \frac{1}{2}; \frac{1-x}{2}\right). \quad (7.4.75)$$

где $(a)_n = a(a+1) \dots (a+n-1)$ — символ Почхаммера²⁾. Производящая функция для полиномов Гегенбауэра имеет вид

¹⁾ Используемое здесь выражение «гиперсферическая функция» обозначает решение уравнения Лапласа в четырехмерном пространстве, характеризуемое при помощи неприводимых представлений цепочки $O(4) \supset O(3)$ (см. правую часть соотношения (7.4.72).)

²⁾ Ввиду малой употребительности этого символа в отечественной литературе приводим эквивалентное определение через отношение гамма-функций: $(a)_n = \Gamma(a+n)/\Gamma(a)$. — Прим. перев.

$$(1 - 2ix + t^2)^{-\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(\alpha)}(x) t^n. \quad (7.4.76)$$

Выражение (7.4.73) для инвариантных полиномов H_{JL} может быть получено, если положить $M = L$ в соотношении (7.4.72) и вычислить его в специальной точке $x = (0, x_2, 0)$ (см. равенство (3.89) гл. 3). Эта процедура дает выражение для H_{JL} , в котором содержится суммирование по m' и m и которое включает в себя граничный ($M = L$) коэффициент Вигнера. После того как подставлено точное значение коэффициента Вигнера, суммирование может быть осуществлено с помощью соотношения (3.163) гл. 3, что приводит в итоге к выражению (7.4.73).

е. Паулиевская частица (атом водорода со спином). Весьма интересен тот факт, что рассмотрение движения паулиевской частицы в кулоновом поле оказывается более простым, чем для движения бесспиновой частицы (см. [8], с. 62). Эта простота обусловлена использованием спинового оператора σ наряду с двумя векторными операторами L и A для построения инвариантных линейных операторов, делающих возможным факторизовать как оператор углового момента (7.4.80), так и радиальное уравнение (7.4.100). Опишем кратко, как это происходит.

Собственные состояния энергии имеют теперь вид

$$|n/m\rangle \otimes |\frac{1}{2}\mu\rangle, \quad (7.4.77)$$

или, что эквивалентно, могут быть выбраны в виде

$$R_{nl} Y^{(1\frac{1}{2})jm}, \quad (7.4.78)$$

где $Y^{(1/2)jm}$ — паулиевские спиноры центрального поля, построенные в гл. 6 (разд. 10).

Рассмотрим теперь введение квантового числа Дирака κ . Это число является собственным значением скалярного оператора $\mathcal{K}$ определенного согласно

$$\mathcal{K} \equiv -(\sigma \cdot L + 1) = L^2 - J^2 - \frac{1}{4}. \quad (7.4.79)$$

Используя это определение и правило Дирака (см. текст непосредственно перед формулой (7.3.12), находим, что как орбитальный угловой момент L , так и полный угловой момент $J = L + \frac{1}{2}\sigma$ выражаются в виде квадратичной формы от $\mathcal{K}$:

$$L^2 = \mathcal{K}(\mathcal{K} + 1), \quad J^2 = \mathcal{K}^2 - \frac{1}{4}. \quad (7.4.80)$$

Далее мы находим, что собственное значение κ оператора $\mathcal{K}$ может быть любым числом за исключением нуля:

$$\kappa = \dots, -2, -1, 1, 2, \dots \quad (7.4.81)$$

Для заданного значения κ квантовые числа l и j получаются в виде

$$l = l(\kappa) = |\kappa| + \frac{1}{2}(-1 + \text{sgn } \kappa), \quad j = j(\kappa) = |\kappa| - \frac{1}{2}, \quad (7.4.82)$$

где $\text{sgn } \kappa$ обозначает знак числа κ .

Паулиевские спиноры центрального поля могут быть теперь полностью перечислены при помощи обозначения, включающего только κ и m :

$$\chi_m^\kappa \equiv Y^{[l(\kappa)\frac{1}{2}]} j(\kappa) m}, \quad (7.4.83)$$

где для каждого заданного целого k , принадлежащего множеству (7.4.81), квантовое число m принимает значения

$$m = |k| - \frac{1}{2}, |k| - \frac{3}{2}, \dots, -|k| + \frac{1}{2}. \quad (7.4.84)$$

Оператор $\mathcal{H}$ обладает важным свойством *антикоммутирования* с оператором $\sigma \cdot v$, где v — произвольный векторный оператор по отношению к L , который к тому же перпендикулярен L . Таким образом,

$$\mathcal{H}(\sigma \cdot v) = -(\sigma \cdot v)\mathcal{H} = \frac{i}{2} \sigma \cdot (L \times v - v \times L) \quad (7.4.85)$$

для

$$\begin{aligned} v \cdot L &= L \cdot v = 0, \\ L \times v + v \times L &= 2iv. \end{aligned} \quad (7.4.86)$$

(Формула (7.4.85) доказывается путем непосредственного применения правила Дирака.) Важные частные случаи (7.4.85) включают $v = \hat{r} \equiv \mathbf{x}/r$ (единичный радиальный вектор), $v = p$ (линейный импульс) и $v = A$ (вектор Рунге — Ленца).

Значение свойства антикоммутативности состоит в том, что спинор

$$(\sigma \cdot v)\chi_m^k \quad (7.4.87)$$

является собственной функцией оператора $\mathcal{H}$ с собственным значением $-k$. В частности, формула

$$(\sigma \cdot \hat{r})\chi_m^k = -\chi_m^{-k}, \quad (7.4.88)$$

получается как следствие равенства $(\sigma \cdot \hat{r})^2 = 1$ и фазовых условий, предполагаемых определением (7.4.83). Аналогично, используя определение

$$\Phi_{Ekm} \equiv R_{E, l(k)} \chi_m^k, \quad (7.4.89)$$

и тот факт, что σ и A коммутируют с H , получаем соотношение

$$(\sigma \cdot A)\Phi_{Ekm} = \alpha(E, k)\Phi_{E, -k, m}, \quad (7.4.90)$$

где $\alpha(E, k)$ — константа. Если воспользоваться результатами (см. (7.4.14))

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}^2 + \varepsilon(\sigma \cdot A)^2]H &= -1, & \varepsilon &= \pm 1 \\ (\sigma \cdot A)^2 &= (\mathcal{H}^2 + \mathcal{H} + 1)H + 1, & \varepsilon &= 0 \end{aligned} \quad (7.4.91)$$

то нетрудно найти, что константа в формуле (7.4.90) удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} \alpha(E, k)\alpha(E, -k) &= \varepsilon(-E^{-1} - k^2), & \varepsilon &= \pm 1 \\ \alpha(0, k)\alpha(0, -k) &= 1, & \varepsilon &= 0. \end{aligned} \quad (7.4.92)$$

В частности, для связанных состояний, т.е. когда $-E^{-1} = n^2$ (выбирая фазу в согласии с (7.4.38)), получаем

$$\alpha(E, k) = -[n^2 - k^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (7.4.93)$$

Замечателен тот факт, что сложные результаты¹⁾, выражаемые равенствами (7.4.37) и (7.4.38), формулируются теперь в весьма сжатом виде

¹⁾ Использование оператора Дирака $\mathcal{H}$ может значительно упростить вычисления теории углового момента для систем с полуцелым спином. В приложениях (разд. 3) приведены некоторые тождества для $3j$ - и $6j$ -символов, которые были получены таким способом. Эти тождества впоследствии используются в приложениях (см. разд. 5 и 9).

$$\mathcal{K}\Phi_{n\kappa m} = \kappa\Phi_{n\kappa m},$$

$$(\sigma \cdot A)\Phi_{n\kappa m} = -(n^2 - \kappa^2)^{\frac{1}{2}}\Phi_{n, -\kappa, m},$$

$$\Phi_{n\kappa m} \equiv R_{n, l(\kappa)}\chi_{m}^{\kappa}. \quad (7.4.94)$$

Для произвольной энергии E удобно определить вещественный параметр η следующим образом:

$$\eta = \begin{cases} n = 1, 2, \dots \text{ при } E < 0, & \varepsilon = +1 \\ 1 \text{ при } E = 0, & \varepsilon = 0 \\ \text{произвольному положительному числу при } E > 0, & \varepsilon = -1. \end{cases} \quad (7.4.95)$$

В результате получаем обобщение равенств (7.4.37) и (7.4.38) на все состояния атома водорода ($\varepsilon = +1, 0, -1$):

$$(\sigma \cdot A)\Phi_{\eta\kappa m} = -(\eta^2 - \varepsilon\kappa^2)^{\frac{1}{2}}\Phi_{\eta, -\kappa, m},$$

$$\mathcal{K}\Phi_{\eta\kappa m} = \kappa\Phi_{\eta\kappa m}, \quad (7.4.96)$$

где

$$\Phi_{\eta\kappa m} \equiv R_{\eta, l(\kappa)}\chi_{m}^{\kappa}.$$

(Фаза выбрана в согласии с фазой в соотношениях (7.4.94) для связанных состояний.) Воспользовавшись равенством $A = \eta A_0$, можно также записать

$$(\sigma \cdot A_0)\Phi_{\eta\kappa m} = -\left(1 - \varepsilon\frac{\kappa^2}{\eta^2}\right)^{\frac{1}{2}}\Phi_{\eta, -\kappa, m}. \quad (7.4.97)$$

Применяя радиальное разложение Дирака

$$\sigma \cdot p = (\sigma \cdot \hat{r})[(\hat{r} \cdot p) - ir^{-1}(\mathcal{K} + 1)], \quad (7.4.98)$$

мы можем оператор $\sigma \cdot A_0$ представить в виде (см. (7.4.4) и (7.4.85), $v = p$)

$$\begin{aligned} \sigma \cdot A_0 &= \sigma \cdot \hat{r} - i\mathcal{K}(\sigma \cdot p) \\ &= (\sigma \cdot \hat{r})\{1 - \mathcal{K}[i\hat{r} \cdot p + r^{-1}(\mathcal{K} + 1)]\}. \end{aligned} \quad (7.4.99)$$

Это выражение вместе с формулами (7.4.88) и (7.4.97) приводит непосредственно к радиальному дифференциальному уравнению вида

$$\left[1 - \kappa\left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa + 1}{r}\right)\right]R_{\eta, l(\kappa)}(r) = \left(1 - \varepsilon\frac{\kappa^2}{\eta^2}\right)^{\frac{1}{2}}R_{\eta, l(-\kappa)}(r). \quad (7.4.100)$$

Последнее уравнение определяет повышающий (κ отрицательное) и понижающий (κ положительное) оператор на значениях l . Оно является компактным и полным выражением рекуррентных соотношений для нерелятивистских кулоновских радиальных функций¹⁾:

¹⁾ Для $\kappa > 0$ имеем $l = l(\kappa) = \kappa \text{ и } l = (-\kappa) = \kappa - 1 = l - 1$, тогда как для $\kappa < 0$ имеем $l = l(-\kappa) = -\kappa - 1 \text{ и } l(-\kappa) = -\kappa = l + 1$.

$$\begin{aligned} \left[1 + (l+1) \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) \right] R_{nl}(r) &= \left[1 - \varepsilon \frac{(l+1)^2}{\eta^2} \right]^{\frac{1}{2}} R_{\eta, l+1}(r), \\ \left[1 - l \left(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right) \right] R_{nl}(r) &= \left[1 - \varepsilon \frac{l^2}{\eta^2} \right]^{\frac{1}{2}} R_{\eta, l-1}(r). \end{aligned} \quad (7.4.101)$$

Комбинируя повышающие и понижающие операторы, можно построить дифференциальное уравнение второго порядка для радиальных функций (равенство (6.39) в гл. 6 с $V(r) = -2/r$ и $E = -\varepsilon/\eta^2$).

Выраженный в соотношениях (7.4.101) результат совпадает с полученным на основе введенного Шредингера [18] и развитого впоследствии Ифелдтом и Халлом [19] *метода факторизации*. Здесь эта факторизация появилась как естественное следствие радиального разложения Дирака и свойств операторов $\mathcal{H}$ и $\mathbf{A}$.

Обратимся теперь к случаю дискретных состояний, когда η заменено главным квантовым числом n и $\varepsilon = +1$. Определяя повышающий и понижающий операторы согласно

$$\begin{aligned} \Omega_+(l) &\equiv 1 + (l+1) \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right), \\ \Omega_-(l) &\equiv 1 - l \left(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right). \end{aligned} \quad (7.4.102)$$

находим, что $R_{n, n-1}$ должно удовлетворять дифференциальному уравнению первого порядка

$$\Omega_+(n-1)R_{n, n-1}(r) = 0. \quad (7.4.103)$$

Нормированное решение этого уравнения дается радиальной частью равенства (7.4.32) (см. примечание на стр. 325). Остальные радиальные функции затем порождаются с подходящей нормировкой и согласующейся фазой путем повторного применения понижающего оператора:

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &= \prod_{s=1}^{n-l-1} \left[\frac{n^2}{n^2 - (n-s)^2} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \Omega_-(l+1)\Omega_-(l+2) \cdots \Omega_-(n-1)R_{n, n-1}(r) \end{aligned} \quad (7.4.104)$$

для $l = n-2, n-3, \dots, 0$.

Из последней формулы мы находим тогда, что $R_{nl}(r)$ имеет вид

$$R_{nl}(r) = (-1)^{n-l-1} \frac{2}{n^2} \left[\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2r}{n} \right)^l P_{nl} \left(\frac{2r}{n} \right) e^{-r/n}, \quad (7.4.105)$$

где $P_{nl}(\xi)$ — полином, удовлетворяющий соотношениям

$$\begin{aligned} (n-l)(n+l)P_{n, l-1}(\xi) \\ = 2l\xi [dP_{nl}(\xi)/d\xi] - (n+l)\xi P_{nl}(\xi) + 2l(2l+1)P_{nl}(\xi), \end{aligned} \quad (7.4.106)$$

$$P_{n,n-1}(\xi) = 1. \quad (7.4.107)$$

Эти соотношения служат для отождествления (единственным образом) иско-
мых полиномов с присоединенными полиномами Лагерра:

$$P_n(\xi) = L_{n-1}^{2l+1}(\xi). \quad (7.4.108)$$

Следует обратить внимание, что помимо общего фазового множителя (зави-
сающего только от n) в выражении (7.4.105) нельзя выбрать фазовый множитель;
эта фаза уже определена в результате выборов фазы, сделанных при определе-
нии спиноров центрального поля (равенство (7.4.88)) и в соотношении (7.4.93).

Радиальные волновые функции для непрерывного случая ($E > 0$) могут быть
получены методом замены n на $-i\eta$ в общем выражении для дискретного случая
(заметим, что это дает корректным образом повышающие и понижающие опе-
раторы для состояний непрерывного случая (7.4.101)). Этим способом после
подходящей нормировки одной из только что полученных радиальных функций
получают все волновые функции для заряженной частицы, движущейся в притя-
гивающем кулоновом поле фиксированного заряда¹⁾. В результате имеем

$$\langle x|\eta lm\rangle = (kr)^{-1} F_{\eta l}(kr) Y_{lm}(\theta\phi), \quad (7.4.109)$$

где $k = \eta^{-1} = \sqrt{E}$ и

$$F_{\eta l}(kr) = C_l(-\eta)(kr)^{l+1} e^{-ikr} {}_1F_1(l+1+i\eta; 2l+2; 2ikr),$$

$$C_l(-\eta) = \frac{2^l e^{\pi\eta/2} |\Gamma(l+1-i\eta)|}{\Gamma(2l+2)}. \quad (7.4.110)$$

Эти функции выбраны таким образом, что в пределе больших kr получаем выра-
жение

$$F_{\eta l}(kr) \sim \sin \left[kr - \frac{l\pi}{2} + \eta \ln(2kr) + \sigma_l(-\eta) \right] \quad (7.4.111)$$

с кулоновским сдвигом фаз, определенным согласно

$$\sigma_l(-\eta) = \arg \Gamma(l+1-i\eta). \quad (7.4.112)$$

Радиальные волновые функции для случая нулевой энергии ($\epsilon = 0$ в уравнени-
ях (7.4.101)) могут быть получены из рассмотренных выше радиальных функций
($E > 0$) при помощи предельного соотношения

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} {}_1F_1(l+1+i\eta; 2l+2; i\eta^{-1}r) = (2l+1)!(2r)^{-l-\frac{1}{2}} J_{2l+1}(\sqrt{8r}). \quad (7.4.113)$$

Радиальная функция, соответствующая нулевой энергии, имеет вид

$$R_{0l}(r) = \sqrt{\frac{2}{r}} J_{2l+1}(\sqrt{8r}), \quad (7.4.114)$$

¹⁾ Свойства кулоновских волновых функций для отталкивательного поля подробно ис-
следуются в работе Халла и Брейта [20]. Обозначения $C_l(\eta)$ и $\sigma_l(\eta)$ для нормировочной по-
стоянной и сдвига фаз соответственно были выбраны нами в согласии с обозначениями
этой наиболее часто цитируемой работы для $\eta > 0$.

где

$$R_{0l}(r) \equiv \lim_{\eta \rightarrow \infty} \eta^{\frac{1}{2}} R_{\eta l}(r), \quad (7.4.115)$$

а при больших r

$$R_{0l}(r) \sim \left(\frac{2}{\pi^2 r^3} \right)^{\frac{1}{4}} \sin(\sqrt{8r} - l\pi - \frac{1}{4}\pi). \quad (7.4.116)$$

ж. Замечания. а) Изложенные в этом разделе алгебраические методы, описывающие различные свойства атома водорода, особо подчеркивают роль аппарата углового момента. Наше изложение основано на работах Биденхарна и Брусара [8], Меадорса [9], Джадда [13], Вульфмана [14] и Бакри [21]. Появилось также немало статей, в которых этот вопрос рассматривается с разных точек зрения¹⁾. Обширную библиографию можно найти в обзорных работах Мак-Интоша [3], Бэндера и Ициксона [22], Дьерди [22а] и в монографии Инглфилда [23]. Обобщение кулоновской симметрии $O(4)$ на группу симметрии $O(4, 2)$ рассматривается в монографии Барута [23а]; там же приводятся ссылки на литературу.

б) Преобразование над координатой и функцией, действующее согласно

$$r = \rho^2/2 \sqrt{-E}, \quad E < 0, \\ F(\rho) \equiv \frac{\rho}{(2\sqrt{-E})^{\frac{1}{2}}} R\left(\frac{\rho^2}{2\sqrt{-E}}\right) \quad (7.4.117)$$

может быть использовано для того, чтобы представить радиальное дифференциальное уравнение для атома водорода в виде радиального дифференциального уравнения для двумерного изотропного гармонического осциллятора. При помощи этого соотношения можно получить собственные значения энергии и собственные функции атома водорода из соответствующих величин для осциллятора и наоборот. На такую взаимосвязь указывал еще Шредингер [18]; в работе [24] эта связь применялась при выводе радиальных интегралов и впоследствии открывалась заново другими авторами в различных контекстах [25, 26].

в) В *эффекте Штарка* (атом водорода в постоянном внешнем электрическом поле) гамильтониан H атома водорода (7.4.4) подвергается возмущению посредством добавки H_1 за счет потенциальной энергии электрона в поле $E = E\hat{e}_3$:

$$H_1 = \lambda x_3. \quad (7.4.118)$$

В формальной теории возмущений²⁾ первого порядка (слабое электрическое поле) невозмущенное решение для атома водорода, задаваемое равенствами (7.4.26), приспособлено к возмущению H_1 . Чтобы увидеть это, выразим x_3 (согласно [9, 28]) в виде

¹⁾ Ибрагимов и Андерсон [21а] рассмотрели эту задачу с не исследованной ранее точки зрения касательных преобразований Лн — Бэклунда.

²⁾ В формальной теории возмущений существование пертурбационных рядов не подвергается проверке; действительно, в рассматриваемой задаче ряд теории возмущений не существует. См. обзор современного состояния работ по теории возмущений [27] (и цитированные там работы).

$$\chi_3 = \frac{3}{2}(L^2 + A^2 + 1)^{\frac{1}{2}} A_3 - i[S, H], \quad (7.4.119)$$

где

$$S \equiv \frac{1}{8}[T(L^2 + A^2 + 1) + \text{эрмит. сопр.}], \\ T \equiv -2i\chi_3 - 2r^2 p_3 + \chi_3(\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}).$$

Поскольку коммутаторный член в первом порядке не дает вклада, мы находим при помощи формул (7.4.26), что вырожденный энергетический уровень $E_n = -1/n^2$ расщепляется в первом порядке на $2n - 1$ подуровней

$$E_n + \frac{3}{2}\lambda n q, \quad (7.4.120)$$

где $q = n - 1, n - 2, \dots, -(n - 1)$.

г) Произведения волновых функций атома водорода в координатном пространстве не удовлетворяют простому закону произведения (теорема сложения), которого можно было ожидать как следствия структуры алгебры Ли $SU(2) \times SU(2)$. Это может быть объяснено отсутствием свойства производной у вектора Рунге — Ленца A и тем фактом, что структура алгебры Ли $SU(2) \times SU(2)$ реализуется только на собственных пространствах связанной энергии.

д) Распространение соотношения (7.4.34) между двумя базисами собственного пространства связанной энергии (неспаренный и спаренный базисы на языке теории углового момента) на состояния континуума осуществляется путем аналитического продолжения коэффициентов Вигнера. В работе [34] обсуждается определение коэффициентов Вигнера $C_{m, M, m+M}^{j, j+\frac{1}{2}}$ для всех комплексных j . Таким образом, с точностью до фаз и нормировок находим соотношение вида

$$\langle \mathbf{x} | \eta q m \rangle = \sum_{l=|m|}^{\infty} (\text{фаза}) \sqrt{2l+1} C_{(q-m)/2, m, (q+m)/2}^{(-i\eta-1)/2, l, (-i\eta-1)/2} \langle \mathbf{x} | \eta l m \rangle. \quad (7.4.121)$$

Представляет интерес также тот факт, что на этом пути могут быть получены кулоновские сдвиги фаз (7.4.112) (см. [8], с. 107, а также работу Цванцигера [29]).

з. Приложение. Специальные тождества для $3nj$ -символов. Ряд полезных тождеств между $3nj$ -символами можно вывести, конкретизируя общие соотношения между этими коэффициентами применительно к системам спина $1/2$ и записывая коэффициенты Вигнера для спина $1/2$ через квантовое число Дирака κ :

$$(2l+1)^{\frac{1}{2}} C_{0mm}^{l\frac{1}{2}j} = |\kappa|^{\frac{1}{2}} [-S(\kappa)]^{m+\frac{1}{2}}, \quad (\text{П.1})$$

где $S(\kappa)$ обозначает знак числа κ . (Равенство (П.1) можно проверить непосредственной подстановкой коэффициентов Вигнера для спина $1/2$, представленных в табл. 1 приложения таблиц.) Эту методику использовал Юнг [30] для получения следующих двух соотношений:

$$\begin{pmatrix} b & b' & c \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} = -[(2a+1)(2a'+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} a & a' & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} a & a' & c \\ b' & b & \frac{1}{2} \end{Bmatrix}, \quad (\text{П.2})$$

$$\begin{pmatrix} b & b' & c \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} = [6(2a+1)(2b'+1)(2c+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} a & a' & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} a & a' & c \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ b & b' & c \end{Bmatrix}. \quad (\text{П.3})$$

в которых $a + a' + c$ четно, $b = a \pm 1/2$, $b' = a' \pm 1/2$.

Соотношение (П.3) можно привести к виду, аналогичному равенству (П.2), если воспользоваться следующим соотношением¹⁾ между $9j$ -символами и $6j$ -символами (см. [32], с. 306):

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{matrix} a & a' & c \\ d & d & 1 \\ b & b' & c \end{matrix} \right\} &= 2 \frac{(a - a')(a + a' + 1) - (b - b')(b + b' + 1)}{[(2c)(2c + 1)(2c + 2)(2d)(2d + 1)(2d + 2)]^{\frac{1}{2}}} \\ &\times (-1)^{a+c+b'+d+1} \left\{ \begin{matrix} a & a' & c \\ b' & b & d \end{matrix} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

Полагая $d = 1/2$ в равенстве (П.4), мы можем переписать равенство (П.3) в следующем виде:

$$\begin{aligned} \left(\begin{matrix} b & b' & c \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \end{matrix} \right) &= (-1)^{a+c+b'+\frac{1}{2}} [(a - a')(a + a' + 1) - (b - b')(b + b' + 1)] \\ &\times \left[\frac{(2a + 1)(2a' + 1)}{c(c + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\begin{matrix} a & a' & c \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left\{ \begin{matrix} a & a' & c \\ b' & b & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{П.5})$$

где по-прежнему $a + a' + c$ четно, $b = a \pm 1/2$, $b' = a' \pm 1/2$.

Юнг [30] привел также следующие частные соотношения для $3j$ -символов (тождества для спина $1/2$ являются частным случаем равенства (П.5):

c четное

$$\begin{aligned} \left(\begin{matrix} a & a & c \\ 1 & -1 & 0 \end{matrix} \right) &= \frac{c(c + 1) - 2a(a + 1)}{2a(a + 1)} \left(\begin{matrix} a & a & c \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right), \\ \left(\begin{matrix} a + \frac{1}{2} & a - \frac{1}{2} & c \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \end{matrix} \right) &= \frac{2a + 1}{2[a(a + 1)]^{\frac{1}{2}}} \left(\begin{matrix} a & a & c \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right); \end{aligned}$$

c нечетное

$$\begin{aligned} \left(\begin{matrix} a & a & c \\ 1 & -1 & 0 \end{matrix} \right) &= - \frac{[c(c + 1)(2a + 2 - c)(2a + 1 - c)]^{\frac{1}{2}}}{2a(a + 1)} \left(\begin{matrix} a + 1 & a & c \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right), \\ \left(\begin{matrix} a - \frac{1}{2} & a - \frac{1}{2} & c \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \end{matrix} \right) &= \left(\begin{matrix} a & a - 1 & c \\ 0 & c & 0 \end{matrix} \right), \\ \left(\begin{matrix} a + \frac{1}{2} & a - \frac{1}{2} & c \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \end{matrix} \right) &= - \left[\frac{(2a + 2 + c)(2a + 1 - c)}{4a(a + 1)c(c + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\begin{matrix} a & a + 1 & c \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right). \end{aligned}$$

¹⁾ В работах [31, 33] это соотношение записано неверно.

Литература

1. *Pauli W.*, *Z. Physik*, **36**, 336 (1926).
О спектре атома водорода с точки зрения новой квантовой механики.
2. *Schrödinger E.*, *Ann. Physik*, **79**, 361; 489 (1926).
Квантование как задача на собственные значения.
3. *McIntosh H. V.* — in: *Group Theory and Its Applications*, ed. *Loebl E. M.*, Vol. II, p. 75, AP, New York, 1971.
Симметрия и вырождение.
4. *Goldstein H.*, *Amer. J. Phys.*, **43**, 737 (1975); **44**, 1123 (1976).
Предыстория вектора Рунге — Ленца. Еще о предыстории вектора Лапласа или Рунге — Ленца.
- 4а. *Kobayashi K.*, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **13**, 425 (1980).
Вывод вектора Паули — Ленца и его вариантов.
5. *Фок В. А.*, *Z. Physik*, **98**, 145 (1935).
К теории атома водорода.
6. *Bargmann V.*, *Z. Physik*, **99**, 169 (1936).
К теории атома водорода.
7. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Наука, 1974.
8. *Biedenharn L. C., Brussaard P. J.*, *Coulomb Excitation*, Clarendon, Oxford, 1965.
Кулоновское возбуждение.
9. *Meadors J. G.*, *The Stark Effect in Hydrogen*, Thesis, Auburn University, Auburn, Ala., 1961.
Эффект Штарка в водороде.
10. *Parks D.*, *Z. Physik*, **159**, 155 (1960).
Связь между параболическими и сферическими собственными функциями водорода.
11. *Kalnins E. G., Miller W., Winternitz P.*, *SIAM J. Appl. Math.*, **30**, 630 (1976).
Группа $O(4)$, разделение переменных в атом водорода.
- 11а. *Miller W., Jr.*, *Symmetry and Separation of Variables*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1977. [Имеется перевод: *Миллер У. (мл.)*.
Симметрия и разделение переменных. — М.: Мир, 1981.]
12. *Aebersold D., Biedenharn L. C.*, *Phys. Rev.*, **A15**, 441 (1977).
Предостережение к применению симметричных методов в кулоновской задаче.
13. *Judd B. R.*, *Operator Techniques in Atomic Spectroscopy*, McGraw-Hill, New York, 1963.
Операторные методы в атомной спектроскопии.
14. *Wulfman C. E.* — in: *Group Theory and Its Applications*, ed. *Loebl E. M.*, Vol. II, p. 145, Academic Press, New York, 1971.
Динамические группы в физике атомов и молекул.
15. *Podolsky B., Pauling L.*, *Phys. Rev.*, **34**, 109 (1929).
Распределение импульса в водородоподобных атомах.
16. *Sharp R. T.*, *J. Math. Phys.*, **47**, 359 (1968).
Замечания о представлениях группы $O(4)$.
17. *Talman J. D.*, *Special Functions, A Group Theoretic Approach*, Benjamin, New York, 1968.
Специальные функции — теоретико-групповой подход.
18. *Schrödinger E.*, *Proc. Roy. Irish. Acad.*, **46A**, 9 (1940); **46A**, 183 (1941); **47A**, 53 (1941).
Метод определения квантовомеханических собственных значений и собственных функций. Дальнейшие исследования решений задач на собственные значения методом факторизации. Факторизация гипергеометрического уравнения.

19. *Infeld L., Hull T. E.*, *Rev. Mod. Phys.*, **23**, 21 (1951).
Метод факторизации.
20. *Hull M. H., Jr., Breit G.* — in: *Encyclopedia of Physics*, ed. *Flugge S.*, Vol. 41/1, p. 408, Springer, Berlin, 1959.
Кулоновские волновые функции.
21. *Bacry H.*, *Nuovo Cimento*, **41A**, 222 (1966).
Группа ДеСиттера $L_{4,1}$ и связанные состояния атома водорода.
- 21a. *Ibragimov N. H., Anderson R. L.*, *J. Math. Anal. Appl.*, **59**, 145 (1977).
Касательные преобразования L_n — Бэклунда.
22. *Bander M., Itzykson C.*, *Rev. Mod. Phys.*, **38**, 330; 346 (1966).
Теория групп и атом водорода. I, II.
- 22a. *Györfi G.*, *Nuovo Cimento*, **53A**, 717 (1968).
Уравнение Кеплера, переменные Фока, генераторы Бакри и скобки Дирака.
23. *Englefield M. J.*, *Group Theory and the Coulomb Problem*, Wiley (Interscience), New York, 1972.
Теория групп и задача Кулона.
- 23a. *Barut A. O.*, *Dynamical Groups and Generalized Symmetries in Quantum Theory*, Univ. of Canterbury, Christchurch, N. Z., 1972.
Динамические группы и обобщенные симметрии в квантовой теории.
24. *Louck J. D.*, *J. Mol. Spectrosc.*, **4**, 334 (1960).
Обобщенный орбитальный угловой момент и n -кратно вырожденный квантовомеханический осциллятор. III. Радиальные интегралы.
25. *Bergman D., Frishman Y.*, *J. Math. Phys.*, **6**, 1855 (1965).
Связь между атомом водорода и многомерными гармоническими осцилляторами.
26. *Ravndal F., Toyoda T.*, *Nucl. Phys.*, **B3**, 312 (1967).
Новый подход к симметрии $SU(2) \times SU(2)$ кеплеровского движения.
27. *Killingbeck J.*, *Rept. Prog. Phys.*, **40**, 963 (1977).
Квантовомеханическая теория возмущений.
28. *Becker H. G., Bleuler K.*, *Z. Naturforsch.*, **31A**, 517 (1976).
Симметрия $O(4)$ и эффект Штарка в атоме водорода.
29. *Zwanziger D.*, *J. Math. Phys.*, **8**, 1858 (1967); *Phys. Rev.*, **176**, 1480 (1968).
Алгебраическое вычисление нерелятивистских кулоновских сдвигов фаз. Точно решаемая нерелятивистская модель частиц с электрическим и магнитным зарядами.
30. *Young R. C.*, *Phys. Rev.*, **115**, 577 (1959).
Угловые корреляции конверсионных электронов: общая K -оболочечная формулировка и пороговый предел.
31. *De-Shalit A., Talmi I.*, *Nuclear Shell Theory*, AP, New York, 1963.
Теория ядерных оболочек.
32. *Варшавович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. — Ленинград: Наука, 1975.
33. *Roitenberg, M.*, et al., *The 3-j and 6-j Symbols*, M.I.T. Press, Cambridge, 1959.
 $3j$ -символы и $6j$ -символы.
34. *Biedenharn L. C., Louck J. D., Racah* — *Wigner Algebra in Quantum Theory*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

5. Атомная спектроскопия

а. Введение. Современная квантовая теория была построена с целью преодоления принципиальных трудностей в теории Бора — Зоммерфельда квантованных орбит электронов в атомах и излучения света при внезапном скачке электрона с одной орбиты на другую. В этой области уже было накоплено значительное количество экспериментальных данных [1, 2] по линиям атомных спектров, существовали также эмпирические правила для интерпретации данных [3, 4]. Среди учебников, в которых описываются эти ранние достижения, можно упомянуть книги [5 — 8]. Слэтер [9] описывает развитие атомной спектроскопии в историческом плане. Замечательные успехи квантовой теории в объяснении этих результатов достигли своей кульминации в 1935 г., когда была опубликована классическая работа ¹⁾ Кондона и Шортли «Теория атомных спектров» [10].

В течение короткого промежутка времени (менее десятилетия), прошедшего после появления пионерской работы Гейзенберга [11], было достигнуто понимание атомных спектров. Это оптимистически объясняется в первых абзацах предисловия к «Теории атомных спектров» и отражает общее в то время чувство, что интерпретация атомных спектров «представляется нам принявшей достаточно завершенное и в высшей степени удовлетворительное состояние».

В то время теория групп еще не являлась частью обычного математического багажа физиков, и квантовая теория векторного сложения и ее применения к атомным спектрам излагаются у Кондона и Шортли с алгебраической точки зрения, что сводит к минимуму какую-либо связь с симметричными (теоретико-групповыми) представлениями.

Книга Вигнера [12], использовавшая теоретико-групповой подход к интерпретации атомных спектров, появилась раньше (как и книга Вейля [13], и обширная обзорная статья Эккарта [14]). Первоначально Вигнер придерживался того мнения (см. предисловие к английскому переводу его книги), что наиболее значительные результаты его книги заключаются в объяснении правила Лапорте (концепция четности) и квантовой теории векторного сложения угловых моментов, но впоследствии он согласился с мнением, высказанным Лауэ, согласно которому «наиболее замечательный результат состоит в осознании того, что почти все правила спектроскопии вытекают из симметрии задачи».

Именно Рака [15, 16] более чем кто-либо другой на протяжении периода 1942 — 1949 гг. развил комбинированные алгебраические и теоретико-групповые методы решения конкретных задач атомной и ядерной спектроскопии многочастичных систем, осуществив тем самым значительные перемены в математическом аппарате, применяемом при интерпретации спектров.

Математические методы, введенные Рака в атомную спектроскопию, включают: а) изложенный в гл. 3 аппарат углового момента, б) понятие генеалогических коэффициентов, учитывающих принцип Паули для эквивалентных электро-

¹⁾ Недавно Кондон и Одабаши [10а] серьезно переработали эту книгу и привели ее в соответствие с современными требованиями. При переработке был привлечен теоретико-групповой метод Рака, но представления унитарных групп Гельфанда не приняты во внимание (они рассматриваются ниже в разд. 53).

нов, и в) использование более широких групп, содержащих группу вращений в качестве подгруппы, для замены неопределенного набора параметров (α) , появляющихся в векторе состояния $|\alpha\rangle/m$ (см. стр. 41), на более близкий к полному набор математически значимых параметров, несмотря на то что они могут не всегда быть *хорошими квантовыми числами* (параметрами, ассоциированными с неприводимыми представлениями группы инвариантности (или неинвариантности) гамильтониана).

В одном разделе мы не можем дать полный обзор свойств атомных систем. Нашей целью является проиллюстрировать на избранных примерах, как используется аппарат теории тензорных операторов для сведения структуры к задаче, которая логически уже была решена при помощи введенных Слэтером [17] более традиционных методов (основы метода изложены Кондоном и Шортли). Мы укажем на роль, которую играют в спектроскопии более общие теоретико-групповые методы. В нашем поле зрения будет лишь та часть теории, которая имеет дело с энергетическими уровнями и соответствующими векторами состояния; что касается теории излучательного процесса, обуславливающего возникновение самих спектральных линий, то по этому вопросу мы отсылаем читателя к соответствующей литературе¹⁾.

б. Приближенный гамильтониан для многоэлектронных атомов. Приближенный гамильтониан для совокупности N тождественных точечных масс (электронов), каждая из которых характеризуется массой $m_0 > 0$, спином S ($s = 1/2$) и зарядом $e < 0$ и движется в кулоновском поле фиксированного заряда $-Ze$ (поле ядра), имеет вид

$$H = \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_\alpha \cdot \mathbf{p}_\alpha}{2m_0} - \frac{Ze^2}{r_\alpha} \right) + H_1 + H_2, \quad (7.5.1)$$

где

$$H_1 = \sum_{\beta > \alpha = 1}^N \frac{\hat{e}^2}{r_{\alpha\beta}}, \quad (7.5.2)$$

$$H_2 = \sum_{\alpha=1}^N \xi(r_\alpha) \mathbf{L}_\alpha \cdot \mathbf{S}_\alpha. \quad (7.5.3)$$

Здесь электрон с номером α обладает вектором положения $\mathbf{x}_\alpha$ относительно ядра (которое считается фиксированным в инерциальной системе отсчета), линейным импульсом $\mathbf{p}_\alpha$, орбитальным угловым моментом $\mathbf{L}_\alpha$ и спином $\mathbf{S}_\alpha$. Величины $r_\alpha \equiv (\mathbf{x}_\alpha \cdot \mathbf{x}_\alpha)^{1/2}$ и $r_{\alpha\beta} \equiv [(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta) \cdot (\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta)]^{1/2}$ обозначают соответственно расстояние от ядра до электрона с номером α и расстояние между α -м и β -м электронами.

Первым слагаемым в гамильтониане (7.5.1) является кинетическая энергия плюс кулоновская потенциальная энергия для N электронов, взаимодействующих только с центральным ядром; H_1 — взаимная кулоновская потенциальная энергия действия между электронами; H_2 — слагаемое, соответствующее спин-орбитальному взаимодействию, вид которого определяется теорией Паули

¹⁾ Наше изложение частично основывается на книге Кондои и Шортли [10], книге Вигнера [12], работах Рака [15, 16] и более поздних пособиях Слэтера [9], Джалда [18], Сольбелмана [19], а также Де-Шалита и Тальми [20].

спин-орбитального взаимодействия в атоме водорода (см. соотношения (7.5.46) и (7.5.53)).

Гамильтониан (7.5.1) является приближенным в том смысле, что он не включает члены, учитывающие а) движение ядра за счет его конечной массы, б) релятивистское движение электронов, в) магнитное сверхтонкое взаимодействие (взаимодействие магнитного момента ядра с магнитным полем, порождаемым электронами) и г) магнитное взаимодействие между спинами электронов (этот перечень не является исчерпывающим). Эффекты, обусловленные этими явлениями, могут успешно учитываться для многих атомов как возмущения; поэтому сначала мы концентрируем внимание на нахождении собственных состояний энергии и собственных функций гамильтониана (7.5.1).

Точное решение уравнения $H\Psi = E\Psi$ для более чем одного электрона до сих пор не найдено, хотя для двух электронов (гелий) Хиллераас [21] и другие авторы [22, 23] получили приближенные решения, приводящие к хорошему согласию с экспериментом. Для многоэлектронной задачи исходной точкой большинства вычислений является приближение центрального поля, введенное Слэтером [17].

в. Модель центрального поля. Последовательную теорию спектров атомов, которая давала бы хорошее количественное согласие с экспериментом, можно построить, если исходить из предположения, что каждый электрон движется в сферически-симметричном потенциале $V(r)$, образуемом ядром и всеми остальными электронами¹⁾. Вопрос о наилучшем выборе явного вида $V(r)$ выходит за пределы настоящего обзора, и мы отсылаем читателя к многочисленной литературе по этому предмету [9].

Для наших целей достаточно предположить, что потенциал в одночастичном гамильтониане

$$H(\alpha) \equiv \frac{p_\alpha^2}{2m_0} + V(r_\alpha) \quad (7.5.4)$$

известен и что одночастичное уравнение Шредингера

$$H(\alpha)\Psi_E(\alpha) = E\Psi_E(\alpha), \quad (7.5.5)$$

уже решено как относительно собственных значений энергии $\{E\}$, так и относительно совокупности собственных состояний энергии $\{\Psi_E(\alpha)\}$.

В разд. 1 — 8 гл. 6 подробно рассмотрено, какой вид имеет решение уравнения (7.5.5). Векторы состояния полностью характеризуются как одновременные волновые функции гамильтониана $H(\alpha)$, квадрата L_α^2 орбитального углового момента $L_\alpha = \mathbf{x}_\alpha \times \mathbf{p}_\alpha$ электрона с номером α и z -й компоненты $L_{\alpha z}$:

¹⁾ Методы определения явных выражений для $V(r)$ включают а) статистическую модель Томаса — Ферми [24, 25], б) метод Хартри самосогласованного поля [26] и в) метод Хартри — Фока [27] (см. также [9]). Нельзя недооценивать также трудную проблему получения хороших «эффективных центральных потенциалов», но эта проблема не является центральной в методе углового момента, который мы намереваемся проиллюстрировать в этом разделе. Следует заметить, однако, что распределение углового момента в атоме Томаса — Ферми нередко ошибочно ассоциируют с оболочечной структурой. Правильный результат приведен Йенсеном и Луттингером [27а].

$$H(\alpha)\Psi_{n_\alpha l_\alpha m_\alpha} = E_{n_\alpha l_\alpha} \Psi_{n_\alpha l_\alpha m_\alpha},$$

$$(\mathbf{L}_\alpha \cdot \mathbf{L}_\alpha)\Psi_{n_\alpha l_\alpha m_\alpha} = l_\alpha(l_\alpha + 1)\hbar^2 \Psi_{n_\alpha l_\alpha m_\alpha},$$

$$L_{\alpha 3} \Psi_{n_\alpha l_\alpha m_\alpha} = m_\alpha \hbar \Psi_{n_\alpha l_\alpha m_\alpha}, \quad (7.5.6)$$

где волновая функция имеет вид

$$\Psi_{n_\alpha l_\alpha m_\alpha}(\mathbf{r}_\alpha) = R_{n_\alpha l_\alpha}(r_\alpha) Y_{l_\alpha m_\alpha}(\theta_\alpha, \phi_\alpha). \quad (7.5.7)$$

Что касается радиальной функции $R_{n_\alpha l_\alpha}$, то она удовлетворяет радиальному дифференциальному уравнению (6.39) в гл. 6. В общем случае $E_{n_\alpha l_\alpha}$ зависит от квантового числа углового момента l_α , а также от главного квантового числа n_α .

Для конкретного заданного собственного значения энергии $E_{n_\alpha l_\alpha}$ при самом общем потенциале мы не можем сказать, каковы будут допустимые значения квантовых чисел n_α и l_α . В целях терминологии обычно предполагается, что радиальные волновые функции являются *водородоподобными* и что области изменения n_α и l_α хорошо определены. В силу сферической симметрии $l_\alpha \in \{0, 1, 2, \dots\}$ и для каждого допустимого значения l_α мы имеем $m_\alpha = l_\alpha, l_\alpha - 1, \dots, -l_\alpha$. Поэтому каждый энергетический уровень $E_{n_\alpha l_\alpha}$ является $(2l_\alpha + 1)$ -кратно вырожденным, что обусловлено орбитальной вращательной симметрией гамильтониана.

Одночастичный гамильтониан $H(\alpha)$ не зависит явно от спина электрона. Каждый из векторов состояния

$$|n_\alpha l_\alpha m_\alpha \mu_\alpha\rangle \equiv |n_\alpha l_\alpha m_\alpha\rangle \otimes |\frac{1}{2} \mu_\alpha\rangle \quad (7.5.8)$$

соответствующих двум спиновым ориентациям $\mu_\alpha = \pm 1/2$, является также собственным состоянием гамильтониана $H(\alpha)$ с собственным значением энергии $E_{n_\alpha l_\alpha}$. (В равенстве (7.5.8) мы приняли обозначение $\langle \mathbf{x}_\alpha | n_\alpha l_\alpha m_\alpha \rangle = \Psi_{n_\alpha l_\alpha m_\alpha}(\mathbf{x}_\alpha)$.) Соответственно каждый уровень энергии $E_{n_\alpha l_\alpha}$ является $2(2l_\alpha + 1)$ -кратно вырожденным.

Перейдем теперь к установлению связи одночастичных гамильтонианов с приближенным гамильтонианом из последнего раздела. Определяя N -частичный гамильтониан H_0 и член потенциальной энергии V_1 выражениями

$$H_0 \equiv \sum_{\alpha=1}^N H(\alpha), \quad (7.5.9)$$

$$V_1 \equiv - \sum_{\alpha=1}^N \left[\frac{Ze^2}{r_\alpha} + V(r_\alpha) \right], \quad (7.5.10)$$

находим, что определенный согласно (7.5.1) гамильтониан H задается формулами

$$H = H_0 + H', \quad (7.5.11)$$

$$H' = V_1 + H_1 + H_2. \quad (7.5.12)$$

Наконец, заметим, что функцию $\xi(r)$, появляющуюся в определении H_2 (7.5.3), обычно выражают через потенциал $V(r)$ по аналогии с тем, как это делается в задаче об атоме водорода:

$$\xi(r) = \frac{\hbar^2}{2m_0^2 c^2 r} \left(\frac{dV}{dr} \right). \quad (7.5.13)$$

Физическим обоснованием модели центрального поля является предположение, что основной вклад в уровень энергии E вносит гамильтониан H_0 , который сам описывает составную систему, состоящую из N экземпляров одночастичной системы, состоящей из одиночного электрона, движущегося в центральном поле $V(r)$. Идея теперь состоит в том, чтобы все остальные взаимодействия, появляющиеся в реальной физической системе, рассматривать как возмущения. Такая программа действительно имела значительные успехи в разработке систематики атомных спектров, включая объяснение закономерностей в химических свойствах элементов периодической системы Менделеева (см. [9]).

Относительное значение различных типов взаимодействий изменяется в большой степени от элемента к элементу, и, хотя именно это явление помогает понять различие спектроскопических и химических свойств элементов, оно означает также, что никакая схема с единственным возмущением не может быть справедливой для всех элементов периодической системы. Большая часть атомной спектроскопии имеет дело с отождествлением взаимодействий, существенных для конкретных элементов, и разработкой подходящих приближенных методов для вычисления поправок к энергии за счет этих взаимодействий.

Рассмотрим теперь собственные пространства энергии для гамильтониана H_0 , заданного выражением (7.5.9). Поскольку мы имеем дело с N кинематически независимыми системами, подходящим векторным пространством является пространство тензорного произведения, образованное из векторов состояния N индивидуальных электронов. Таким образом, каждый из векторов

$$|n_1 l_1 m_1 \mu_1\rangle \otimes |n_2 l_2 m_2 \mu_2\rangle \otimes \cdots \otimes |n_N l_N m_N \mu_N\rangle \quad (7.5.14)$$

соответствующих значениям $m_\alpha = l_\alpha, l_\alpha - 1, \dots, -l_\alpha$ и $\mu_\alpha = 1/2, -1/2$, имеет собственное значение энергии

$$E_0 = \sum_{\alpha} E_{n_\alpha l_\alpha}. \quad (7.5.15)$$

Заметим, однако, что каждый из векторов

$$|n_{\alpha_1} l_{\alpha_1} m_{\alpha_1} \mu_{\alpha_1}\rangle \otimes |n_{\alpha_2} l_{\alpha_2} m_{\alpha_2} \mu_{\alpha_2}\rangle \otimes \cdots \otimes |n_{\alpha_N} l_{\alpha_N} m_{\alpha_N} \mu_{\alpha_N}\rangle, \quad (7.5.16)$$

где $(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N)$ — перестановка чисел $(1, 2, \dots, N)$, также является собственным состоянием энергии, отвечающим собственному значению E_0 , где по-прежнему мы можем иметь $m_\alpha = l_\alpha, l_\alpha - 1, \dots, -l_\alpha$ и $\mu_\alpha = 1/2, -1/2$.

Но векторы состояния (7.5.14) и (7.5.16) не соответствуют *физическим состояниям* атома с N не взаимодействующими электронами. Необходимо принять во внимание *принцип запрета Паули* (два или более электронов не могут иметь одинаковые значения четырех квантовых чисел $(nlm\mu)$). Принцип запрета Паули вводится в теорию посредством требования, сформулированного Дираком, что векторы состояния системы должны быть *антисимметричными* относительно взаимной замены всех пар электронных состояний. Таким образом, мы приходим к слэтеровским состояниям, определенным согласно¹⁾

¹⁾ Фигурные скобки, заключающие в себе совокупность квантовых чисел, мы будем использовать для обозначения того факта, что состояние антисимметрично относительно взаимной замены любой пары четверок квантовых чисел.

$$| \{ (n_1 l_1 m_1 \mu_1); \dots; (n_N l_N m_N \mu_N) \} \rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^\sigma P | (n_1 l_1 m_1 \mu_1) \rangle \otimes \dots \otimes | (n_N l_N m_N \mu_N) \rangle, \quad (7.5.17)$$

где суммирование распространяется на все $N!$ перестановок индексов $(1, 2, \dots, N)$, а $(-1)^\sigma$ — сигнатура для P ($\sigma = 0$, если P — четная перестановка, $\sigma = 1$, если P — нечетная перестановка).

Среди определенных в (7.5.17) векторов состояния ненулевые векторы являются по-прежнему ортонормированными; на них натягивается векторное пространство $\mathcal{V}_{E_0}^A$, состоящее из антисимметризованных произведений одноэлектронных векторов состояния энергии E_0 . Если состояния углового момента индивидуальных электронов все различны, $l_1 \neq l_2 \neq \dots \neq l_N$, то размерностью пространства $\mathcal{V}_{E_0}^A$ является

$$\dim \mathcal{V}_{E_0}^A = \prod_{x=1}^N 2(2l_x + 1). \quad (7.5.18)$$

Но если две или более пары (n_l) в последовательности

$$(n_1 l_1)(n_2 l_2) \dots (n_N l_N) \quad (7.5.19)$$

совпадают, то некоторые из определенных в (7.5.17) базисных векторов будут равны нулю либо будут зависимы и соответственно

$$\dim \mathcal{V}_{E_0}^A < \prod_{x=1}^N 2(2l_x + 1). \quad (7.5.20)$$

В приближении центрального поля состояние N -электронного атома характеризуется набором квантовых чисел $\{ (n_\alpha l_\alpha m_\alpha \mu_\alpha) : \alpha = 1, 2, \dots, N \}$, соответствующей энергией $E_0 = \sum_{\alpha} E_{n_\alpha l_\alpha}$ и антисимметричными слэтеровскими векторами состояния $| \{ (n_1 l_1 m_1 \mu_1) \dots (n_N l_N m_N \mu_N) \} \rangle$.

При перестановке P внутри совокупности электронных квантовых чисел, заданной согласно

$$P: (n_1 l_1 m_1 \mu_1) \dots (n_N l_N m_N \mu_N) \rightarrow (n_{x_1} l_{x_1} m_{x_1} \mu_{x_1}) \dots (n_{x_N} l_{x_N} m_{x_N} \mu_{x_N}) \quad (7.5.21)$$

вектор состояния (7.5.17) отображается в себя (четная перестановка) или в себя со знаком минус (нечетная перестановка). Поэтому невозможно говорить, что определенный электрон обладает некоторым частным набором квантовых чисел. Как следствие этого результата векторы состояния (7.5.17) уже не являются одновременными собственными векторами полного набора коммутирующих операторов

$$\{ H(\alpha), L_x, L_z, S_x, S_z : \alpha = 1, 2, \dots, N \}. \quad (7.5.22)$$

(Соответственно обозначением (7.5.17) для вектора состояния необходимо пользоваться осторожно, поскольку характеризующие параметры не отвечают собственным значениям соответствующих операторов.)

Гамильтониан $H_0 = \sum_{\alpha} H(\alpha)$, конечно, является диагональным на пространстве $\mathcal{V}_{E_0}^A$, как и всякий другой полностью симметричный оператор, построенный из операторов набора (7.5.22). В частности, z -компоненты

$$L_3 = \sum_{\alpha} L_{\alpha 3}, \quad S_3 = \sum_{\alpha} S_{\alpha 3} \quad (7.5.23)$$

полного орбитального углового момента и полного спина диагональны с соответствующими собственными значениями, задаваемыми согласно

$$L_3 \rightarrow M_L \equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha}, \quad S_3 \rightarrow M_S \equiv \sum_{\alpha} \mu_{\alpha}. \quad (7.5.24)$$

Оператор полного орбитального углового момента L и оператор полного спина S , определенные выражениями

$$L = \sum_{\alpha} L_{\alpha}, \quad S = \sum_{\alpha} S_{\alpha}, \quad (7.5.25)$$

как нетрудно видеть, также отображают пространство $\mathcal{V}_{E_0}^A$ в себя. Этот результат вытекает из коммутационных свойств

$$[H, L] = 0, \quad [H, S] = 0, \quad (7.5.26)$$

$$[P, L] = 0, \quad [P, S] = 0, \quad [P, H] = 0, \quad (7.5.27)$$

для каждой $P \in S_N$. Тогда пространство $\mathcal{V}_{E_0}^A$ должно разлагаться в прямую сумму пространств, каждое из которых характеризуется квантовыми числами точного полного орбитального углового момента (LM_L) и квантовыми числами точного полного спина (SM_S). Соответственно пространство $\mathcal{V}_{E_0}^A$ должно натягиваться на совокупности базисных векторов типа

$$\left\{ |(\gamma)LM_L; SM_S\rangle : \begin{matrix} M_L = L, L-1, \dots, -L \\ M_S = S, S-1, \dots, -S \end{matrix} \right\}, \quad (7.5.28)$$

где L и S стандартным образом действуют на эти базисные векторы. Здесь (γ) обозначает неконкретизированный набор характеризующих параметров, которые могут зависеть от метода, используемого для разложения пространства $\mathcal{V}_{E_0}^A$ на основные орбитальные и спиновые мультиплеты.

Области допустимых значений и кратности квантовых чисел L и S , требуемые для описания базиса (7.5.28) в $\mathcal{V}_{E_0}^A$, должны быть совместными с редукцией прямых произведений (рядами Клебша — Гордана)

$$\begin{aligned} [l_1] \otimes [l_2] \otimes \dots \otimes [l_N], \\ [\frac{1}{2}] \otimes [\frac{1}{2}] \otimes \dots \otimes [\frac{1}{2}], \end{aligned} \quad (7.5.29)$$

но общий результат неизвестен (здесь $[l]$ обозначает неприводимое представление группы $SU(2)$).

Важность разложения пространства $\mathcal{V}_{E_0}^A$ на пространства, в которых реализуются неприводимые представления орбитальной группы вращений (генераторы L) и спиновой группы (генераторы S), или нахождения других методов порождения базиса (7.5.28) в $\mathcal{V}_{E_0}^A$ еще более подчеркивается тем обстоятельством, что $V_1 + H_1$ коммутирует с L и S , а также с перестановками $\{P\}$. Этот результат означает, что матричные элементы оператора $V_1 + H_1$ на базисе (7.5.28) диагональны по квантовым числам $(LM_L)(SM_S)$, т.е. единственные не исчезающие матричные элементы имеют вид

$$\langle (\gamma')LM_L; SM_S | V_1 + H_1 | (\gamma)LM_L; SM_S \rangle. \quad (7.5.30)$$

Таким образом, для атомов, для которых спин-орбитальным взаимодействием можно пренебречь по сравнению с электростатическим взаимодействием, построение базиса в пространстве $\mathcal{V}_{E_0}^A$ точного орбитального углового момента (LM_L) и точного спина (SM_S) является важным шагом в направлении решения задачи об уровнях энергии. Действительно, для некоторых случаев, когда пара (LS) встречается не более чем однократно (так что $(\gamma') = (\gamma)$) и уровни гамильтониана H_0 достаточно разделены, построение базиса (7.5.28) решает пертурбационную задачу первого порядка, поскольку поправки к E_0 тогда в точности равны

$$E_1(LS) \equiv \langle (\gamma)LM_L; SM_S | V_1 + H_1 | (\gamma)LM_L; SM_L \rangle. \quad (7.5.31)$$

Этот результат далее упрощается, если заметить, что матричные элементы (7.5.31) независимы от M_L и M_S вследствие инвариантности суммы $V_1 + H_1$ относительно орбитальных вращений и $SU(2)$ -спиновых вращений в отдельности. Поэтому будет оставаться вырождение вида $(2L+1)(2S+1)$ в уровнях $E_0 + E_1(LS)$, получаемых вследствие электростатического возмущения $V_1 + H_1$.

Рассмотрим теперь, каким образом можно построить базис в $\mathcal{V}_{E_0}^A$, имеющий точные квантовые числа $(LM_L)(SM_S)$. Для простоты предположим, что пара (LS) встречается не более чем однократно. Поскольку слэтеровские состояния (7.5.17) имеют точные значения M_L и M_S , мы можем построить базис в $\mathcal{V}_{E_0}^A$ (единственным образом с точностью до фаз) при помощи метода старших весов, описанного в разд. 12 гл. 3, но теперь обобщенного таким образом, чтобы включить в рассмотрение два угловых момента, L и S . Лучше всего проиллюстрировать этот метод примерами.

Пример 1. $N = 2$, $n_1 = n_2 = n \geq 2$, $l_1 = l_2 = 1$.

Пространство $\mathcal{V}_{E_0}^A$ натягивается на пятнадцать слэтеровских векторов, задаваемых формулой (7.5.17) и имеющих (M_L, M_S) -пары квантовых чисел проекций

$$\begin{array}{cccccc} (2, 0) & (1, 1) & 2(1, 0) & (1, -1) & (0, 1) & 3(0, 0) \\ (-2, 0) & (-1, -1) & 2(-1, 0) & (-1, 1) & (0, -1), \end{array} \quad (7.5.32)$$

где обозначение $k(M_L, M_S)$ указывает, что пара (M_L, M_S) встречается k раз. Упорядочиваем эти пары по правилу: $(M_L, M_S) < (M'_L, M'_S)$, если $M_L < M'_L$, и $(M_L, M_S) < (M_L, M'_S)$, если $M_S < M'_S$.

Приступим теперь к нахождению мультиплетов $|LM_L; SM_S\rangle$ методом старших весов. Вектором $|\{(n \ 1 \ 1 \ \frac{1}{2}); (n \ 1 \ 1 - \frac{1}{2})\}\rangle$, соответствующим старшей (M_L, M_S) -паре, т.е. $(2, 0)$, является вектор старшего веса

$$|22; 00\rangle \equiv |\{(n \ 1 \ 1 - \frac{1}{2}); (n \ 1 \ 1 - \frac{1}{2})\}\rangle$$

LS -мультиплета $|2M_L; 00\rangle$ ($M_L = 2, 1, 0, -1, -2$). (Мы применяем понижающий оператор L_- повторно (см. равенство (3.162) в гл. 3) к вектору $|22; 00\rangle$, чтобы генерировать явно полный мультиплет.) Затем вычеркиваем (M_L, M_S) -пары $(2, 0)$, $(1, 0)$, $(0, 0)$, $(-1, 0)$, $(-2, 0)$ из совокупности (7.5.32). После этого остаются пары

$$\begin{array}{cccccc} (1, 1) & (1, 0) & (1, -1) & (0, 1) & 2(0, 0) \\ (-1, -1) & (-1, 0) & (-1, 1) & (0, -1). \end{array} \quad (7.5.33)$$

Вектор $|\{(n \ 1 \ 1 \ \frac{1}{2}); (n \ 1 \ 0 \ \frac{1}{2})\}\rangle$, соответствующий старшей (M_L, M_S) -паре, т.е. $(1, 1)$, является вектором старшего веса $|1 \ 1; 1 \ 1\rangle \equiv |\{(n \ 1 \ 1 \ \frac{1}{2}); (n \ 1 \ 0 \ \frac{1}{2})\}\rangle$ LS -мультиплета $|1M_L; 1M_S\rangle$ ($M_L, M_S = 1, 0, -1$), который порождается применением независимо операторов L_- и S_- к $|1 \ 1; 1 \ 1\rangle$ в соответствии с формулой (3.162) гл. 3. Теперь вычеркиваем из совокупности (7.5.33) все (M_L, M_S) -пары с $M_L, M_S = 1, 0, -1$, после чего остается только $(0, 0)$. Имеются три слэтеровских состояния, соответствующих паре $(0, 0)$, а именно

$$|m\rangle \equiv |\{(n \ 1 \ m \ \frac{1}{2}); (n \ 1 \ -m \ -\frac{1}{2})\}\rangle, \quad m = 1, 0, -1.$$

Существует единственный нормированный вектор вида

$$|00; 00\rangle = \sum_m \alpha_m |m\rangle$$

перпендикулярный векторам $|20; 00\rangle$ и $|10; 10\rangle$; этот вектор $|00; 00\rangle$ является последним вектором, необходимым чтобы натянуть пятнадцатимерное пространство $\mathcal{V}_{E_0}^A$ с LS -мультиплетами в наборе $\{|2M_L; 00\rangle (M_L = 2, 1, 0, -1, -2); |1M_L; 1M_S\rangle (M_L, M_S = 1, 0, -1); |00; 00\rangle\}$.

Пример 2. $N = 2, n_1 = n_2 = n \geq 3, l_1 = 0, l_2 = 2$.

Пространство $\mathcal{V}_{E_0}^A$ натягивается на двадцать слэтеровских векторов состояния, которые выписаны в (7.5.17) и имеют следующие (M_L, M_S) -пары квантовых чисел проекций:

$$\begin{aligned} &(2, 1) \quad 2(2, 0) \quad (2, -1) \quad (1, 1) \quad 2(1, 0) \quad (1, -1) \quad (0, 1) \quad 2(0, 0) \\ &(-2, -1) \quad 2(-2, 0) \quad (-2, 1) \quad (-1, -1) \quad 2(-1, 0) \quad (-1, 1) \quad (0, -1). \end{aligned} \quad (7.5.34)$$

Вектором $|\{(n \ 0 \ 0 \ \frac{1}{2}); (n \ 2 \ 2 \ \frac{1}{2})\}\rangle$, соответствующим старшей (M_L, M_S) -паре $(2, 1)$, является вектор старшего веса $|22; 11\rangle \equiv |\{(n \ 0 \ 0 \ \frac{1}{2}); (n \ 2 \ 2 \ \frac{1}{2})\}\rangle$ LS -мультиплета $|2M_L; 1M_S\rangle$, порождаемого независимым повторным применением к $|22; 11\rangle$ операторов L_- и S_- . Удаление из совокупности (7.5.34) пятнадцати (M_L, M_S) -пар, соответствующих значениям $M_L = 2, 1, 0, -1, -2; M_S = 1, 0, -1$, оставляет

$$(2, 0) \quad (1, 0) \quad (0, 0) \quad (-1, 0) \quad (-2, 0). \quad (7.5.35)$$

Имеются два слэтеровских вектора состояния, соответствующих паре $(2, 0)$:

$$\begin{aligned} |+\rangle &= |\{(n \ 0 \ 0 \ \frac{1}{2}); (n \ 2 \ 2 \ -\frac{1}{2})\}\rangle, \\ |-\rangle &= |\{(n \ 0 \ 0 \ -\frac{1}{2}); (n \ 2 \ 2 \ \frac{1}{2})\}\rangle. \end{aligned} \quad (7.5.36)$$

Существует единственный нормированный вектор вида

$$|22; 00\rangle = a_+ |+\rangle + a_- |-\rangle \quad (7.5.37)$$

перпендикулярный вектору $|22; 10\rangle$, принадлежащему LS -мультиплету $\{|2M_L; 1M_S\rangle\}$. Этот вектор $|22; 00\rangle$ является вектором старшего веса LS -мультиплета $|2M_L; 00\rangle$, который порождается путем повторного применения оператора L_- к $|22; 00\rangle$.

Описанная выше процедура порождает, за исключением выбора фаз, единственный базис в $\mathcal{V}_{E_0}^A$ вида

$$\left\{ |LM_L; SM_S\rangle: \begin{array}{l} M_L = L, \dots, -L; L = L', L'', \dots \\ M_S = S, \dots, -S; S = S', S'', \dots \end{array} \right\} \quad (7.5.38)$$

в случае отсутствия кратностей пары (LS) .

В принципе метод старших весов применим даже в том случае, когда появляются кратные значения заданной пары (LS) . Теперь необходимо ввести дополнительные индексы (γ) с целью различения разных (ортогональных) векторов старшего веса, имеющих одни и те же значения L и S :

$$\{(\gamma)LL; SS\}: (\gamma) = (\gamma'), (\gamma''), \dots \quad (7.5.39)$$

В общем случае существование кратности k пары (LS) в редукции пространства $\mathcal{V}_{E_0}^A$ на LS -мультиплеты требует диагонализации $k \times k$ -матрицы H_1' с элементами

$$(H_1')_{(\gamma')(\gamma)} \equiv \langle (\gamma')LS; LS | V_1 + H_1 | (\gamma)LS; LS \rangle \quad (7.5.40)$$

чтобы получить расщепление энергии в первом порядке (для элементов, в которых преобладает электростатическое взаимодействие).

(В простых случаях можно избежать этого последнего шага при вычислении собственных значений энергии путем использования *диагонального правила* сумм Слэтера. Это правило есть не что иное, как утверждение инвариантности следа матрицы A относительно преобразования подобия $A \rightarrow SAS^{-1}$. В частности, поскольку LS -мультиплетный базис связан со слэтеровским базисом (7.5.17) при помощи вещественного ортогонального преобразования, сумма всех поправок первого порядка к энергии равна сумме диагональных матричных элементов оператора $V_1 + H_1$, вычисленных в слэтеровском базисе.)

Если центральный потенциал задан, основная проблема при вычислении уровней энергии атомов (ионов) состоит в определении базиса для пространства $\mathcal{V}_{E_0}^A$ (векторного пространства антисимметризованных состояний с энергией E_0), который был бы оптимальным (в некотором смысле) для вычисления расщепления за счет электростатического взаимодействия, спин-орбитального взаимодействия и т.п. (Выше мы указали два базиса в этом пространстве: слэтеровский детерминантный базис (7.5.17) и LS -мультиплетный базис. Схема jj -связи (см. ниже) обеспечивает еще один метод построения $\mathcal{V}_{E_0}^A$. С математической точки зрения, конечно, существует бесконечное множество таких базисов.) Хотя и кажущиеся математически тривиальными (поскольку задача свелась к изучению свойств конечномерного векторного пространства), исследования задачи на энергетические уровни оказались источником введения (в основном Рака и Вигнера) новых математических структур (понятие тензорного оператора), находящих применение во всех областях спектроскопии (молекулярной, атомной, ядерной и адронной).

Слэтеровские методы являются непосредственными и концептуально простыми (они были введены в 1929 г., раньше чем коэффициенты Вигнера и тензорные операторы), но трудными для использования в общем случае. Рак осознал, что в слэтеровских методах должна существовать рекуррентная структура, поскольку, например, метод старших весов должен быть в действительности эквивалентным решению проблемы связывания N угловых моментов. Но решение последней проблемы является геометрическим и одинаковым для всех физических систем. Таким образом, в проблему могла бы быть внесена определенная систематика, которую можно протабулировать однажды и навсегда. Именно благодаря этой идее Рака был разработан и введен новый математический аппарат спектроскопии.

Программа Рака имеет три аспекта: а) введение общих методов построения самого пространства $\mathcal{V}_{E_0}^A$, б) классификация взаимодействий как инвариантных тензоров (привлекающая, таким образом, теорему Вигнера — Эккарта) и в) использование более общих групп как средства для выяснения возникновения параметров (γ) в векторах состояния.

Некоторые примеры применения этих методов мы приведем после краткого словаря спектроскопических терминов.

г. Краткий словарь терминов по спектроскопии.

Электронная конфигурация. Об определенной последовательности квантовых чисел

$$(n_1 l_1)(n_2 l_2) \cdots (n_N l_N) \quad (7.5.41)$$

которая определяет энергию E_0 , мы говорим, что она задает электронную конфигурацию (последовательность дает N уровней энергии, между которыми распределены N электронов). Часто о самой последовательности говорят как об электронной конфигурации. Обычно используют соответствующие водороду значения для (nl) ($n = 1, 2, \dots$; $l = 0, 1, \dots, n-1$) и обозначают конкретные значения l латинскими буквами, как показано ниже:

$$\begin{array}{cccccccc} l: & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \dots \\ & s & p & d & f & g & h & i \dots \end{array} \quad (7.5.42)$$

(первые четыре буквы характеризуют первые спектры, которые называют точным (sharp), основным (principal), диффузным (diffuse) и фундаментальным (fundamental)). Последовательность (nl) , повторяющихся r раз, обозначается как $(nl)^r = n l^r$. Например, 57 электронов иона Nd^{3+} ($Z = 60$) в основном энергетическом состоянии имеют электронную конфигурацию

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^3. \quad (7.5.43)$$

Последовательность упорядочена при помощи возрастающих значений энергии E_{nl} , для которых, как правило, выполняется соотношение $E_{nl} > E_{n'l'}$, для $n + l > n' + l'$ («правило Маделунга»).

Замкнутая оболочка. Принцип Паули разрешает находиться в состоянии $(nl m)$ только одному электрону. Для заданных (nl) не более чем $2(2l + 1)$ электронов могут обладать энергией E_{nl} . Мы говорим, что квантовые числа (nl) характеризуют оболочку и что эта оболочка замкнута, когда электроны занимают все возможные $2(2l + 1)$ состояний. Таким образом, $(nl)^{2(2l + 1)}$ обозначает замкнутую оболочку. В конфигурации (7.5.43) имеется одиннадцать замкнутых оболочек, а $4f$ -оболочка с четырнадцатью возможными электронными состояниями заполнена менее чем наполовину, так как содержит три электрона.

Эквивалентные электроны. В смысле принципа запрета Паули все электроны являются эквивалентными. Но термин эквивалентные электроны часто применяют к электронам в одной и той же nl -оболочке.

Уровень. Вообще говоря, термин «уровень» относится к любому собственному значению энергии. В атомной спектроскопии «уровень» означает только одно — совокупность $2J + 1$ состояний, принадлежащих уровню энергии с фиксированным полным угловым моментом J электронов в атоме.

LS-связь. Этот термин относится к схеме связывания, в которой орбитальные угловые моменты отдельных электронов связываются в полный орбитальный угловой момент, а спины отдельных электронов связываются в полный спин.

LS-мультиплет, или терм. В LS-связи слово *терм* относится к совокупности состояний

$$\{ |(\gamma)LM_L; SM_S\rangle : M_L = L, \dots, -L; M_S = S, \dots, -S \}. \quad (7.5.44)$$

Частные значения величины L в схеме (7.5.44) принято обозначать прописными буквами, т.е.

$$L: 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6$$

$$S \ P \ D \ F \ G \ H \ I.$$

Совокупность состояний (7.5.44), или терм, обозначается тогда как $2S + 1L$. Например, терм ^5D обозначает $(5)(5) = 25$ состояний, для которых $L = 2$ и $S = 2$.

jj-связь. Этот термин относится к схеме связывания, в которой сначала орбитальный угловой момент отдельного электрона связывается с его спином, что дает $J_\alpha = L_\alpha + S_\alpha$, а затем следует схема связывания, приводящая к полному угловому моменту: $J = \sum J_\alpha$. Эта схема является более подходящей для описания состояний элементов, у которых спин-орбитальное взаимодействие преобладает над электростатическим отталкивательным взаимодействием.

Правило Хунда. Правило Хунда является эмпирическим правилом, устанавливающим тот факт, что электростатическое взаимодействие расщепляет энергию E_0 на серию уровней, таких, что уровень со старшим S и старшим L (для этого S) имеет наименьшую энергию. Это правило выполняется для самых нижних термов всех атомов и ионов, которые были до сих пор исследованы экспериментально, но для возбужденных конфигураций имеются исключения.

д. Замкнутые оболочки. Количество физических (антисимметричных) состояний для n эквивалентных электронов¹⁾ дается биномиальным коэффициентом

$$\binom{4l+2}{n}, \quad n = 1, 2, \dots, 4l+2. \quad (7.5.45)$$

Эту конфигурацию обозначают посредством l^n ($l = s, p, d, f, \dots$), где опущено главное квантовое число. В одном состоянии конфигурации замкнутой оболочки $4l+2$ для каждого положительного значения величин m_α и μ_α имеется и соответствующее отрицательное значение, так что $M_L = M_S = 0$, и, следовательно, также $L = S = 0$. Состояние конфигурации замкнутой оболочки (в нулевом приближении) является, таким образом, инвариантным как относительно орбитальных вращений, так и относительно спиновых вращений.

Вращательная инвариантность состояний замкнутых оболочек придает таким атомам (He, Ne, Ar, Kr, Xe) свойства стабильности и инертности, что часто позволяет рассматривать соседние атомы в периодической системе элементов

¹⁾ Рискую внести некоторую путаницу, мы используем символ n для обозначения как количества эквивалентных электронов в оболочке, так и главного квантового числа одноэлектронного состояния. Во избежание недоразумений мы часто опускаем главное квантовое число.

как обладающие спектрами, возникающими исключительно за счет переходов электронов вне замкнутых оболочек. Поскольку эффективное поле от электронов в замкнутых оболочках является центрально-симметричным ($L = S = 0$), это дает весьма полезное упрощение, позволяющее в итоге заменить N -электронную задачу на n -электронную. Например, спектры щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Fr) могут быть интерпретированы как возникающие за счет одного (валентного) электрона в центрально-симметричном поле (на больших расстояниях это поле эффективно является кулоновским полем, порождаемым ядром заряда $-e$, так как электроны в замкнутых оболочках экранируют ядро). Необходимо, конечно, принимать во внимание тот факт, что квантовые числа (n, l, m) одного электрона не могут принимать значения, уже использованные электронами в замкнутых оболочках.

Упомянутые выше упрощения могут быть неприменимыми, когда уровни, соответствующие различным оболочкам, сравнимы по энергии (например, оболочки $3d$ и $4s$ у Cu). Тем не менее *важность теории одноэлектронных состояний, двухэлектронных состояний, трехэлектронных состояний, ... значительно увеличивается, поскольку эти результаты имеют следствия, применимые также и к многоэлектронным атомам*. Ввиду того что задачи модельного типа служат хорошими иллюстрациями применения методов углового момента, мы подчеркнем здесь этот аспект атомной спектроскопии, оставляя более подробное обсуждение применений к конкретным атомам для учебников по этому предмету.

е. Одноэлектронная задача со спин-орбитальной связью. Для одного электрона гамильтониан (7.5.1) приводится к виду

$$H = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{Ze^2}{r} + \xi(r)L \cdot S. \quad (7.5.46)$$

Обычно спин-орбитальное взаимодействие рассматривается как возмущение энергетических уровней

$$E_n = -Z^2 e^2 / 2an^2, \quad (7.5.47)$$

атома водорода без спинового взаимодействия (см. разд. 4). В нулевом порядке состояния даются при помощи паулиевских спиноров центрального поля (см. равенство (6.57) в гл. 6):

$$\Psi_{nljm} \equiv R_{nl} Y^{(l \frac{1}{2})jm}. \quad (7.5.48)$$

При получении последнего выражения мы воспользовались тем фактом, что полный угловой момент $J = L + S$ коммутирует с гамильтонианом нулевого приближения и спин-орбитальным взаимодействием по отдельности. Следовательно, спинорные состояния (7.5.48) диагонализуют часть $L \cdot S$ спин-орбитального члена (см. соотношения (6.50) и (6.51) гл. 6). Через R_{nl} обозначены стандартные радиальные функции водорода, как это рассмотрено в разд. 4.

В первом порядке теории возмущений уровни энергии даются выражением

$$E_{nlj} = E_n + \frac{1}{2} \zeta_{nl} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}], \quad (7.5.49)$$

относительно которого напомним, что при заданном состоянии l орбитального углового момента полный угловой момент j может принимать два возможных

значения $l + \frac{1}{2}$ и $l - \frac{1}{2}$ ($l > 0$) ($j = \frac{1}{2}$ только при $l = 0$), что приводит к формулам¹⁾

$$E_{nlj} = \begin{cases} E_n + \frac{1}{2}\zeta_{nl}l, & \text{при } j = l + \frac{1}{2} \\ E_n - \frac{1}{2}\zeta_{nl}(l+1), & \text{при } j = l - \frac{1}{2}; \end{cases} \quad (7.5.50)$$

$$E_{n0\frac{1}{2}} = E_n + \frac{(\alpha Z)^4 m_0 c^2}{2n^3}, \quad \text{при } l = 0. \quad (7.5.51)$$

В этих формулах ζ_{nl} выражается через радиальный интеграл

$$\zeta_{nl} \equiv \int_0^\infty r^2 dr \zeta(r) [R_{nl}(r)]^2, \quad (7.5.52)$$

который после вычисления его с $\xi(r)$ вида (см. равенство (7.5.13))

$$\zeta(r) = Ze^2 \hbar^2 / 2m_0^2 c^2 r^3, \quad (7.5.53)$$

даст

$$\zeta_{nl} = \frac{(\alpha Z)^4 m_0 c^2}{n^3 l(l+1)(2l+1)}, \quad l > 0. \quad (7.5.54)$$

В выражениях (7.5.51) и (7.5.54) через $\alpha = e^2/\hbar c$ обозначена *постоянная тонкой структуры*. (Вычисления и свойства кулоновских радиальных интегралов систематически изложены в работе [34] на основе методов углового момента.)

Два уровня (7.5.50), на которые расщепляется каждая конфигурация (nl) ($l > 0$), называют *дублетным термом*.

Предыдущие вычисления, конечно, могут быть проведены для любого центрального поля и, в частности, для кулоноподобных потенциалов, представляющих взаимодействие одного валентного электрона с ядром и с электронами замкнутой оболочки.

Релятивистские эффекты за счет изменения массы со скоростью также могут быть включены в рассмотрение в первом порядке теории возмущений. Приближенное взаимодействие можно получить из уравнения Дирака; в результате находим

$$H'_1 = -p^4/8m_0^3c^2. \quad (7.5.55)$$

В собственном состоянии энергии E_n импульс можно записать в виде

$$p^2 = 2m_0 \left(E_n + \frac{Ze^2}{r} \right) \quad (7.5.56)$$

¹⁾ Смещение уровня $l = 0$ за счет спина не определено, поскольку радиальный интеграл для ζ_{n0} обращается в бесконечность. Приближенное релятивистское вычисление ([10], стр. 130) показывает, что вклад самого спин-орбитального взаимодействия равен нулю, но компенсирующий член, который отличен от нуля только для состояний с $l = 0$, в точности восстанавливает член, получаемый в том случае, если сначала скомбинировать $\frac{1}{2} \zeta_{nl}l$, сократить l , а затем положить $l = 0$. Но в соотношениях (7.5.50) и (7.5.51) не учитываются релятивистские эффекты для массы.

так что поправка первого порядка за счет H'_1 получается, если взять диагональные матричные элементы выражения

$$-\frac{1}{2m_0c^2} \left[(E_n)^2 + 2E_n \left(\frac{Ze^2}{r} \right) + \left(\frac{Ze^2}{r} \right)^2 \right]. \quad (7.5.57)$$

Это вычисление дает следующий результат:

$$E'_{nl} = -(\alpha Z)^4 m_0 c^2 \left(\frac{1}{2l+1} - \frac{3}{8n} \right) \frac{1}{n^3}. \quad (7.5.58)$$

Объединяя эту поправку к энергии с энергией, определяемой выражением (7.5.50), получаем следующую систему энергетических уровней атома водорода, включая релятивистские эффекты в первом порядке теории возмущений:

$$E_{nj} = E_n \left[1 + \frac{(\alpha Z)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (7.5.59)$$

Существенно, что конечное выражение (7.5.59) для уровней энергии, включающее как изменение массы, так и спин-орбитальное взаимодействие, не зависит от двух состояний орбитального углового момента $l = j \pm \frac{1}{2}$, поскольку точное решение задачи с релятивистским гамильтонианом Дирака дает уровни энергии, не зависящие от l . В рассмотренном приближении выписанные в (7.5.59) уровни согласуются с релятивистской теорией Дирака.

ж. Двухэлектронные конфигурации. Обратимся теперь к иллюстрированию методов Рака в спектроскопии. Применение метода тензорных операторов требует, чтобы взаимодействия были выражены через инварианты группы вращений, ассоциированные с неприводимыми тензорами k -го ранга.

Выражение электростатического взаимодействия H_1 через вращательные инварианты, построенные из тензоров k -го ранга, можно получить, если сначала разложить $1/r_{\alpha\beta}$ по полиномам Лежандра (равенство (6.175) гл. 6), а затем подставить содержащуюся в (6.137) инвариантную форму для полиномов Лежандра. Результат имеет вид

$$H_1 = e^2 \sum_{\beta > \alpha = 1}^N \frac{1}{r_{\alpha\beta}} = \sum_{\beta > \alpha = 1}^N \sum_{k=0}^{\infty} v_k(r_{\alpha}, r_{\beta}) P_k(\cos \theta_{\alpha\beta}), \quad (7.5.60)$$

где

$$P_k(\cos \theta_{\alpha\beta}) = \frac{4\pi(-1)^k}{(2k+1)^{\frac{1}{2}}} [\mathcal{Y}^k(\hat{x}_{\alpha}) \times \mathcal{Y}^k(\hat{x}_{\beta})]_0^0, \quad (7.5.61)$$

$$v_k(r, s) = \begin{cases} e^2 r^k / s^{k+1}, & r \leq s \\ e^2 s^k / r^{k+1}, & r \geq s. \end{cases} \quad (7.5.62)$$

Состояния квантовых чисел точного полного углового момента (LM) для двух частиц строятся путем вигнеровского спаривания одночастичных состояний:

$$|(n_1 n_2)(l_1 l_2) LM_L\rangle \equiv \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2 M_L}^{l_1 l_2 L} |n_1 l_1 m_1\rangle \otimes |n_2 l_2 m_2\rangle. \quad (7.5.63)$$

Эти состояния обладают следующей симметрией относительно обмена P_{12} квантовых чисел одноэлектронных состояний:

$$P_{12}|(n_1 n_1)(l_1 l_2)LM_L\rangle \equiv \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2 m_L}^{l_1 l_2 L} |n_2 l_2 m_2\rangle \otimes |n_1 l_1 m_1\rangle \\ = (-1)^{l_1 + l_2 - L} |(n_2 n_1)(l_2 l_1)LM_L\rangle, \quad (7.5.64)$$

где использована симметрия коэффициентов Вигнера относительно взаимной замены $(l_1 m_1)$ и $(l_2 m_2)$ (см. равенство (3.180)).

Следующий шаг в получении антисимметризованных состояний точных орбитального и спинowego угловых моментов состоит в связывании состояний орбитального углового момента (7.5.63) со спинowymi состояниями двух электронов (явное построение состояний точного спина для N частиц со спином $\frac{1}{2}$ приведено в приложении к этому разделу). На языке обозначений двойных таблиц (см. гл. 5, приложение А) спиновые синглет и триплет изображаются в виде

$$S = 0: \left| \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \right\rangle = |00\rangle, \\ S = 1: \left| \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \right\rangle = |1M_S\rangle, \\ \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \\ (M_S = 1), (M_S = 0), (M_S = -1) \end{array} \quad (7.5.65)$$

Эти спиновые состояния обладают следующей симметрией относительно обмена P_{12} квантовых чисел одноэлектронных спиновых состояний:

$$P_{12} \left| \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \right\rangle = - \left| \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \right\rangle,$$

$$P_{12} \left| \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \right\rangle = \left| \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \right\rangle. \quad (7.5.66)$$

В случае двух частиц эти спиновые состояния являются также в точности вигнеровским спариванием одноэлектронных спиновых состояний:

$$|SM_S\rangle = \left| \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) SM_S \right\rangle = \sum_{\mu\nu} C_{\mu\nu M_S}^{1/2 1/2 S} \left| \frac{1}{2} \mu \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \nu \right\rangle. \quad (7.5.67)$$

Обменная симметрия (7.5.66) следует тогда из симметрии коэффициентов Вигнера.

Комбинируя пространственные состояния (7.5.63) со спинowymi состояниями, мы получаем состояния (тензорного) произведения, которые антисимметричны относительно действия обменного оператора P_{12} :

Синглетные состояния

$$\left| \{(n_1 n_2)(l_1 l_2)LM_L; 00\} \right\rangle \\ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|(n_1 n_2)(l_1 l_2)LM_L\rangle + (-1)^{l_1 + l_2 - L} |(n_2 n_1)(l_2 l_1)LM_L\rangle \right) \\ \otimes \left| \left(\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \right\rangle; \quad (7.5.68)$$

триплетные состояния

$$\begin{aligned} & | \{ (n_1 n_2) (l_1 l_2) L M_L; 1 M_S \} \rangle \\ & \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (| (n_1 n_2) (l_1 l_2) L M_L \rangle - (-1)^{l_1 + l_2 - L} | (n_2 n_1) (l_2 l_1) L M_L \rangle) \\ & \otimes | (\overline{[a]b} | [1]2) \rangle. \end{aligned} \quad (7.5.69)$$

При $l_1 \neq l_2$ число векторов, нумеруемых значениями $L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2$; $M_L = L, \dots, -L$ и $\overline{[a]b} = [\overline{1}1], [\overline{1}2], [\overline{2}2]$, равно $4(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$. Эти векторы ортонормированы и антисимметричны. Следовательно, эти векторы образуют базис в пространстве $\mathcal{Y}_{E_0}^A$.

Мы уже отметили, что базисные состояния (7.5.68) и (7.5.69) построены антисимметричными относительно действия обменного оператора P_{12} , выраженного формулами (7.5.64) и (7.5.66). Кроме того, эти состояния обладают важным свойством симметрии

$$\begin{aligned} & | \{ (n_2 n_1) (l_2 l_1) L M_L; S M_S \} \rangle \\ & = (-1)^{l_1 + l_2 + L + S} | \{ (n_1 n_2) (l_1 l_2) L M_L; S M_S \} \rangle. \end{aligned} \quad (7.5.70)$$

Для конфигурации nl^2 не обязательно требуется образовать линейную комбинацию пространственных функций, заданных формулами (7.5.68) и (7.5.69), поскольку состояния $| (nl^2) L M_L \rangle$ ($n_1 l_1 = (n_2 l_2) = (nl)$ в соотношении (7.5.63) уже являются симметричными (L четное) или антисимметричными (L нечетное) относительно действия P_{12} :

$$P_{12} | (nl^2) L M_L \rangle = (-1)^L | (nl^2) L M_L \rangle. \quad (7.5.71)$$

Теперь базис в пространстве $\mathcal{Y}_{E_0}^A$ задается при помощи $(2l + 1)(4l + 1)$ ортонормированных векторов:

синглетные состояния

$$| \{ (nl^2) L M_L; 00 \} \rangle \equiv | (nl^2) L M_L \rangle \otimes \left| \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \middle| \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \right) \right\rangle, \quad (7.5.72)$$

где $L = 0, 2, \dots, 2l$; $M = L, \dots, -L$;

триплетные состояния

$$| \{ (nl^2) L M_L; 1 M_S \} \rangle \equiv | (nl^2) L M_L \rangle \otimes | (\overline{[a]b} | [1]2) \rangle, \quad (7.5.73)$$

где $L = 1, 3, \dots, 2l - 1$; $M = L, \dots, -L$; $M_S = 1, 0, -1$.

Следует отметить, что заданная в (7.5.70) симметрия справедлива также и для этих состояний $| \{ (nl^2) L M_L; S M_S \} \rangle$.

Описанное выше построение [15] решает, таким образом, в достаточно общем виде задачу построения базиса в пространстве антисимметризованных произведений одночастичных состояний точного полного орбитального углового момента (LM_L) и точного полного спина (SM_S) для двух электронов. (Процедура Слэтера, если применить ее в таком общем виде, привела бы к тому же базису, поскольку нет кратного появления пары (LS).)

Следующим шагом рассмотрения в первом порядке теории возмущений является вычисление матричных элементов

$$\langle \{(n_1 n_2)(l_1 l_2)L' M'_L; S' M'_S\} | H_1 | \{(n_1 n_2)(l_1 l_2)LM_L; SM_S\} \rangle$$

электростатического взаимодействия, которое дается формулой (7.5.60). Так как L и S коммутируют с H_1 , эти матричные элементы отличны от нуля только в том случае, если $(L' M'_L) = (LM_L)$ и $(S' M'_S) = (SM_S)$. Кроме того, инвариантность оператора H_1 относительно перестановок и антисимметрия базисных состояний приводят к следующему упрощению:

$$\begin{aligned} \Delta E_{l_1 l_2 LS} &\equiv \langle \{(n_1 n_2)(l_1 l_2)LM_L; SM_S\} | H_1 | \{(n_1 n_2)(l_1 l_2)LM_L; SM_S\} \rangle \\ &= \langle (n_1 n_2)(l_1 l_2)LM_L | H_1 | (n_1 n_2)(l_1 l_2)LM_L \rangle \\ &\quad + (-1)^{l_1 + l_2 + L + S} \langle (n_1 n_2)(l_1 l_2)LM_L | H_1 | (n_2 n_1)(l_2 l_1)LM_L \rangle \\ &= \sum_k F^k(n_1 l_1; n_2 l_2) f_k(l_1 l_2 L) \\ &\quad + (-1)^{l_1 + l_2 + L + S} \sum_k G^k(n_1 l_1; n_2 l_2) g_k(l_1 l_2 L), \end{aligned} \quad (7.5.74)$$

где F^k , G^k , f_k и g_k имеют следующий смысл: F^k и G^k — интегралы Слэтера, определенные согласно

$$F^k(n_1 l_1; n_2 l_2) = \int \int dr_1 dr_2 (r_1)^2 (r_2)^2 v_k(r_1, r_2) [R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_2}(r_2)]^2. \quad (7.5.75)$$

$$\begin{aligned} G^k(n_1 l_1; n_2 l_2) &= \int \int dr_1 dr_2 (r_1)^2 (r_2)^2 v_k(r_1, r_2) R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_2}(r_2) R_{n_1 l_2}(r_2) R_{n_2 l_1}(r_1); \end{aligned} \quad (7.5.76)$$

а f_k и g_k — чисто геометрические (связанные с угловым моментом) факторы (одинаковые для всех центральных полей), заданные в виде

$$f_k(l_1 l_2 L) = \langle (l_1 l_2)LM_L | P_k(\cos \theta_{12}) | (l_1 l_2)LM_L \rangle, \quad (7.5.77)$$

$$g_k(l_1 l_2 L) = \langle (l_1 l_2)LM_L | P_k(\cos \theta_{12}) | (l_2 l_1)LM_L \rangle. \quad (7.5.78)$$

где $|(l_1 l_2)LM_L\rangle$ означает состояние связанных угловых моментов:

$$|(l_1 l_2)LM_L\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2 M_L}^{l_1 l_2 L} \mathscr{Y}_{l_1 m_1} \otimes \mathscr{Y}_{l_2 m_2}. \quad (7.5.79)$$

Суммирование по k в первом слагаемом в (7.5.74) ведется по $k = 0, 2, \dots, 2 \min(l_1, l_2)$; во втором слагаемом — по $k = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2$ (см. соотношения (7.5.81) и (7.5.82)).

Вычисление геометрических факторов f_k и g_k проводится с использованием общего матричного элемента (3.260) гл. 3, соотношения (7.5.61) и редуцированных матричных элементов сферических функций, т.е. формулы (3.437) гл. 3. В результате находим

$$\begin{aligned}
& \langle (l'_1 l'_2) L' M'_L | P_k (\cos \theta_{12}) | (l_1 l_2) L M_L \rangle \\
& = \delta_{L' L} \delta_{M'_L M_L} (-1)^{l_1 + l_2 + L} [(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l'_1 + 1)(2l'_2 + 1)]^{\frac{1}{2}} \\
& \quad \times \begin{pmatrix} l_1 & k & l'_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & k & l'_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l'_2 & l'_1 & k \end{Bmatrix}. \quad (7.5.80)
\end{aligned}$$

Из этого соотношения получаем следующие выражения для f_k и g_k :

$$f_k(l_1 l_2 L) = (-1)^L (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \begin{pmatrix} l_1 & k & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & k & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_2 & l_1 & k \end{Bmatrix}, \quad (7.5.81)$$

$$g_k(l_1 l_2 L) = (-1)^{k+L} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \begin{pmatrix} l_1 & k & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_1 & l_2 & k \end{Bmatrix}. \quad (7.5.82)$$

Модификация поправки (7.5.74) к энергии в случае $(n_1 l_1) = (n_2 l_2) = (nl)$ осуществляется непосредственно с помощью базисных векторов (7.5.72) и (7.5.73). Результат имеет вид

$$\begin{aligned}
\Delta E_{(n^2)L} & = \langle \{(nl)^2 L M_L; S M_S\} | H_1 | \{(nl)^2 L M_L; S M_S\} \rangle \\
& = \sum_{k \text{ even}} F^k(nl; nl) f_k(lL). \quad (7.5.83)
\end{aligned}$$

Наконец, необходимо отметить, что поправки (7.5.74) и (7.5.83) к энергии инвариантны по отношению к замене базиса, состоящего из состояний точного орбитального углового момента (LM_L) и точного спинового углового момента (SM_S), на базисные состояния точного полного углового момента (JM_J)¹⁾:

$$\begin{aligned}
& | \{(n_1 n_2) [(l_1 l_2)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S] J M_J \} \rangle \\
& \equiv \sum_{M_L M_S} C_{M_L M_S}^{L S J} | \{(n_1 n_2) (l_1 l_2) L M_L; S M_S\} \rangle. \quad (7.5.84)
\end{aligned}$$

Антисимметрия этих базисных векторов также сохраняется при преобразовании:

$$P_{12} | \{(n_1 n_2) [(l_1 l_2)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S] J M_J \} \rangle = - | \{(n_1 n_2) [(l_1 l_2)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S] J M_J \} \rangle. \quad (7.5.85)$$

Эти состояния удовлетворяют также соотношению симметрии

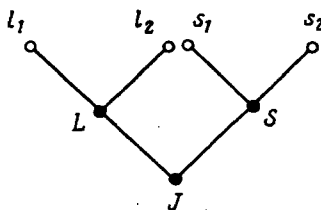
$$\begin{aligned}
& | \{(n_2 n_1) [(l_2 l_1)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S] J M_J \} \rangle \\
& = (-1)^{l_1 + l_2 + L + S} | \{(n_1 n_2) [(l_1 l_2)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S] J M_J \} \rangle. \quad (7.5.86)
\end{aligned}$$

Схема связывания, представленная в (7.5.84), известна как схема LS -связи. Она отвечает связыванию четырех угловых моментов согласно

¹⁾ Обозначение $(j_1 j_2)_j$ указывает на связывание двух угловых моментов j_1 и j_2 в полный угловой момент j , согласно соотношению $J = J(1) + J(2)$. Это (нетрадиционное) обозначение подсказывается связью между теорией связывания угловых моментов и теорией «деревьев Кэли» и «проблемой скобок». Этот вопрос рассмотрен в работе [34].

$$\mathbf{J} = (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2) + (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2). \quad (7.5.87)$$

Эта схема соответствует дереву с индексами (см. [34]), изображенному на рис. 7.2.



$$[(l_1 l_2)_L (s_1 s_2)_S]_J$$

РИС. 7.2. Диаграммы типа дерева для схемы LS -связи: $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$, $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

Схема LS -связи применима для возмущений, скалярных как по отношению к полному орбитальному угловому моменту $\mathbf{L}$, так и по отношению к полному спиновому угловому моменту $\mathbf{S}$, поскольку матрицы таких возмущений диагональны тогда по L и S . Поправка к энергии в этом случае всегда сохраняет кратность $(2L + 1)(2S + 1)$, ассоциированную с произвольными ориентациями атома в пространстве и в спиновом пространстве.

Рассмотрим далее эффект включения спин-орбитального взаимодействия

$$H_2 \equiv \xi(r_1)\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_1 + \xi(r_2)\mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (7.5.88)$$

Оператор полного орбитального углового момента $\mathbf{L}$ и оператор полного спина $\mathbf{S}$ в отдельности теперь не коммутируют с H_2 , хотя полный угловой момент $\mathbf{J}$ коммутирует. Таким образом, чтобы определить эффект (в первом порядке теории возмущений) от H_2 с использованием схемы LS -связи (7.5.84), нам потребовалось бы диагонализировать матрицу с элементами

$$\langle \{(n_1 n_2)[(l_1 l_2)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S]_{JM_J}\} | H_2 | \{(n_1 n_2)[(l_1 l_2)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S]_{JM_J}\} \rangle. \quad (7.5.89)$$

Мы не будем рассматривать задачу в таком общем виде, но приведем упрощенный случай.

Если пренебречь вкладами недиагональных элементов в (7.5.89), то для конфигураций эквивалентных частиц $((n_1 l_1) = (n_2 l_2) = (nl))$ найдем, что смещение энергии за счет спин-орбитального взаимодействия (диагональный матричный элемент в (7.5.89)) принимает особенно простой вид:

$$\Delta E_{(l^2)LSJ} = \frac{1}{2} \zeta_{nl} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \quad (7.5.90)$$

(Эту формулу можно получить, если принять во внимание, что радиальное интегрирование для рассматриваемого случая заменяет H_2 на

$$\zeta_{nl}(\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_1 + \mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{S}_2) = \zeta_{nl}(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} - \mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - \mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{S}_1),$$

а $\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{S}_1$ имеет в базисе (7.5.84) равные нулю диагональные элементы.)

Подытожим результаты для двухчастичных конфигураций в LS -связи. В нулевом порядке энергия E_0 двух электронов в конфигурации $(n_1 l_1)(n_2 l_2)$ равна

$$E_{n_1 l_1} + E_{n_2 l_2}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{вырождение} \\ 4(2l_1 + 1)(2l_2 + 1), \quad l_1 \neq l_2 \\ (2l + 1)(4l + 1), \quad l_1 = l_2 = l \end{array} \right\}; \quad (7.5.91)$$

электростатическое отталкивательное взаимодействие расщепляет этот уровень на ряд LS -мультиплетов:

$$E_{n_1 l_1} + E_{n_2 l_2} + \Delta E_{l_1 l_2 L S}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{вырождение} \\ (2L + 1)(2S + 1) \end{array} \right\}. \quad (7.5.92)$$

Энергия в (7.5.92) не зависит от полного углового момента $J = |L - S|, \dots, L + S$. Введение спин-орбитального взаимодействия расщепляет различные J -состояния LS -мультиплета. Для случая эквивалентных электронов это расщепление имеет вид

$$2E_{nl} + \Delta E_{(l^2)LS} + \Delta E_{(l^2)LSJ}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{вырождение} \\ 2J + 1 \end{array} \right\}, \quad (7.5.93)$$

при условии, что можно пренебречь недиагональными членами, происходящими от спин-орбитального взаимодействия. $(2J + 1)$ -кратное вырождение, остающееся в состоянии (7.5.93), обусловлено произвольной ориентацией полного углового момента J .

Данное выше описание двухчастичных конфигураций применимо для многих атомных спектров, где спин-орбитальная поправка весьма мала по сравнению с расщеплением между двумя LS -мультиплетами.

Интервал между двумя соседними уровнями в LS -мультиплете, которые расщепились под действием спин-орбитального взаимодействия между двумя эквивалентными электронами, получаем из соотношения (7.5.90):

$$\Delta E_{(l^2)LS, J+1} - \Delta E_{(l^2)LSJ} = \zeta_{nl}(J + 1). \quad (7.5.94)$$

Это соотношение было получено эмпирически Ланде [28] и известно как *правило интервалов Ланде*.

Рассмотрим теперь кратко ситуацию для двухчастичных конфигураций, в которых спин-орбитальное взаимодействие (7.5.88) доминирует над электронным отталкивательным взаимодействием. Представляется более подходящим строить тогда пространство $\gamma_{E_0}^A$ при помощи базиса, который соответствует следующей схеме связывания:

$$J = (L_1 + S_1) + (L_2 + S_2). \quad (7.5.95)$$

Этой схеме отвечает дерево с индексами, изображенное на рис. 7.3. Такая схема известна как jj -связь. Она является естественной схемой связи для вычисления матричных элементов спин-орбитального взаимодействия, поскольку $L_1 \cdot L_1$, $L_2 \cdot L_2$, $S_1 \cdot S_1$, $S_2 \cdot S_2$, $J \cdot J$, и J_3 все коммутируют с оператором H_2 .

Иногда оказывается полезным иметь преобразование между схемами LS -связи и jj -связи. Коэффициент преобразования между схемой LS -связи и схемой jj -связи есть $9j$ -коэффициент (см. [34], гл. 5):

$$\langle [(l_1 l_2)_L (s_1 s_2)_S]_J [(l_1 s_1)_j_1 (l_2 s_2)_j_2]_J \rangle$$

$$= [(2L+1)(2S+1)(2j_1+1)(2j_2+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ s_1 & s_2 & S \\ j_1 & j_2 & J \end{Bmatrix}. \quad (7.5.96)$$

где для нашего случая имеем $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ и $S = 0, 1$.

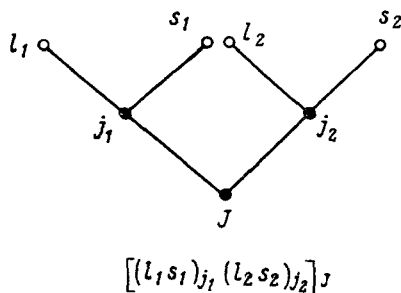


РИС. 7.3. Диаграмма типа дерева для схемы jj -связи: $J_1 = L_1 + S_1$, $J_2 = L_2 + S_2$, $J = J_1 + J_2$.

Таким образом, схема jj -связи соответствует ортогональной замене базиса в пространстве $\mathcal{V}_{E_0}^A$, выраженной в виде

$$\begin{aligned} & | \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J} \} \rangle \\ &= \sum_{LS} [(2L+1)(2S+1)(2j_1+1)(2j_2+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ j_1 & j_2 & J \end{Bmatrix} \\ &\quad \times | \{ (n_1 n_2) [(l_1 l_2)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S]_{JM_J} \} \rangle. \end{aligned} \quad (7.5.97)$$

Эти состояния могут быть также выражены в виде

$$\begin{aligned} & | \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J} \} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (| (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J} \rangle \\ &\quad - (-1)^{l_1 + j_2 - J} | (n_2 n_1) [(l_2 \frac{1}{2})_{j_2} (l_1 \frac{1}{2})_{j_1}]_{JM_J} \rangle), \end{aligned} \quad (7.5.98)$$

где

$$\begin{aligned} & | (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J} \rangle \\ &\equiv \sum_{\substack{\mu_1 \nu_1 m_1 \\ \mu_2 \nu_2 m_2}} C_{\mu_1 \nu_1 m_1}^{l_1 \frac{1}{2} j_1} C_{\mu_2 \nu_2 m_2}^{l_2 \frac{1}{2} j_2} C_{m_1 m_2 M_J}^{j_1 j_2 J} | n_1 l_1 \mu_1 \nu_1 \rangle \otimes | n_2 l_2 \mu_2 \nu_2 \rangle. \end{aligned} \quad (7.5.99)$$

Состояния (7.5.97) антисимметричны относительно действия оператора P_{12} :

$$P_{12} | \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J} \} \rangle = - | \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J} \} \rangle. \quad (7.5.100)$$

Они удовлетворяют также соотношению симметрии

$$\begin{aligned}
& | \{ (n_2 n_1) [(l_2 \frac{1}{2})_{j_2} (l_1 \frac{1}{2})_{j_1}]_{JM} \} \rangle \\
& = (-1)^{j_1 + j_2 - J + 1} | \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM} \} \rangle. \quad (7.5.101)
\end{aligned}$$

Для состояний $(n_1 l_1 j_1) = (n_2 l_2 j_2) = (nlj)$ антисимметрическими состояниями являются сами связанные состояния:

$$| \{ (nn) [(l_2 \frac{1}{2})_{j_2} (l_1 \frac{1}{2})_{j_1}]_{JM} \} \rangle \equiv | (nn) [(l_2 \frac{1}{2})_{j_2} (l_1 \frac{1}{2})_{j_1}]_{JM} \rangle, \quad (7.5.102)$$

при условии, что J — четное целое число. (Состояния нечетного J симметричны относительно действия P_{12} .) Заметим, что равенство (7.5.97) остается справедливым в частном случае (7.5.102).

Матричные элементы спин-орбитального взаимодействия диагональны по всем квантовым числам углового момента, появляющимся в векторе состояния схемы jj -связи, определенной (7.5.97). Соответственно поправка к энергии за счет спин-орбитального взаимодействия дается выражением

$$\begin{aligned}
\Delta E_{l_1 l_2 j_1 j_2} & \equiv \langle \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM} \} | H_2 | \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM} \} \rangle \\
& = \frac{1}{2} \zeta_{n_1 l_1} [j_1 (j_1 + 1) - l_1 (l_1 + 1) - \frac{3}{4}] \\
& \quad + \frac{1}{2} \zeta_{n_2 l_2} [j_2 (j_2 + 1) - l_2 (l_2 + 1) - \frac{3}{4}], \quad (7.5.103)
\end{aligned}$$

где $j_1 = l_1 \pm \frac{1}{2}$, $j_2 = l_2 \pm \frac{1}{2}$ и $J = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$.

Таким образом, каждая $(n_1 l_1)(n_2 l_2)$ -конфигурация расщепляется на четыре $(l_1 j_1 l_2 j_2)$ -конфигурации jj -связи, соответствующие четырем комбинациям $j_1 = l_1 \pm \frac{1}{2}$, $j_2 = l_2 \pm \frac{1}{2}$ (для равного нулю l_1 или l_2 имеются две конфигурации jj -связи, для $l_1 = l_2 = 0$ имеется только одна конфигурация). Каждая $(l_1 j_1 l_2 j_2)$ -конфигурация jj -связи имеет $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ -кратное вырождение, соответствующее допустимым значениям квантовых чисел (JM) полного углового момента: $J = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$; $M = J, \dots, -J$. Электростатическое взаимодействие H_1 снимает вырождение по J , и, если можно пренебречь недиагональными матричными элементами оператора H_1 , поправка первого порядка к энергии за счет H_1 имеет вид

$$\begin{aligned}
\Delta E_{l_1 l_2 j_1 j_2} & \equiv \langle \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM} \} | H_1 | \{ (n_1 n_2) [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM} \} \rangle = \\
& = \sum_{LS} (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2L + 1)(2S + 1) \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ j_1 & j_2 & J \end{Bmatrix}^2 \Delta E_{l_1 l_2 LS} \\
& = \sum_k F^k(n_1 l_1; n_2 l_2) f_k(l_1 j_1 l_2 j_2 J) \\
& \quad - (-1)^{j_1 + j_2 - J} \sum_k G^k(n_1 l_1; n_2 l_2) g_k(l_1 j_1 l_2 j_2 J), \quad (7.5.104)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
& f_k(l_1 j_1 l_2 j_2 J) \\
& = \langle [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM} | P_k(\cos \theta_{12}) | [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM} \rangle
\end{aligned}$$

$$= \sum_{LS} (2L+1)(2S+1)(2j_1+1)(2j_2+1) \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ j_1 & j_2 & J \end{matrix} \right\}^2 f_k(l_1 l_2 L), \quad (7.5.105)$$

$$\begin{aligned} g_k(l_1 j_1 l_2 j_2 J) &= \langle [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J} | P_k(\cos \theta_{12}) | [(l_2 \frac{1}{2})_{j_2} (l_1 \frac{1}{2})_{j_1}]_{JM_J} \rangle \\ &= \sum_{LS} (2L+1)(2S+1)(2j_1+1)(2j_2+1) \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ j_1 & j_2 & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_2 & l_1 & L \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ j_2 & j_1 & J \end{matrix} \right\} \\ &\quad \times g_k(l_1 l_2 L). \end{aligned} \quad (7.5.106)$$

(Два выражения для этих величин получены при помощи а) использования заданного равенством (7.5.98) вектора состояния непосредственно в левой части (7.5.104) и б) подстановки $\Delta E_{l_1 l_2 LS}$ из равенства (7.5.74) в формулу (7.5.104)).

Вычисление матричных элементов полиномов Лежандра в базисе спаренного углового момента $|[(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J}\rangle$ следует выводу соотношения (7.5.80). Таким образом, равенства (3.259) и (3.260) гл. 3 дают

$$\begin{aligned} &\langle [(l_1' \frac{1}{2})_{j_1'} (l_2' \frac{1}{2})_{j_2'}]_{J'M_J'} | P_k(\cos \theta_{12}) | [(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM_J} \rangle \\ &= \delta_{J'J} \delta_{M_J'M_J} (-1)^{j_2'+h+J} [(2j_1'+1)(2j_2'+1)]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J \\ j_2' & j_1' & k \end{matrix} \right\} \times \\ &\quad \times \frac{4\pi}{2k+1} \langle (l_1' \frac{1}{2})_{j_1'} || \mathcal{Y}^k(1) || (l_1 \frac{1}{2})_{j_1} \rangle \\ &\quad \times \langle (l_2' \frac{1}{2})_{j_2'} || \mathcal{Y}^k(2) || (l_2 \frac{1}{2})_{j_2} \rangle, \end{aligned} \quad (7.5.107)$$

где редуцированные матричные элементы находятся из соотношений (3.246) и (3.437) гл. 3 в виде

$$\begin{aligned} &\langle (l_1' \frac{1}{2})_{j_1'} || \mathcal{Y}^k || (l_1 \frac{1}{2})_{j_1} \rangle \\ &= (-1)^{j_1'+k+j_1+\frac{1}{2}} \left[\frac{(2l'+1)(2l'+1)(2k+1)(2j+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j' & \frac{1}{2} & l' \\ l & k & j \end{Bmatrix} \\ &= \begin{cases} (-1)^{j'+\frac{1}{2}} \left[\frac{(2k+1)(2j+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, & l+l'+k \text{ четное} \\ 0, & l+l'+k \text{ нечетное} \end{cases} \end{aligned} \quad (7.5.108)$$

(при получении правой части этой формулы мы воспользовались равенством (П.2) из приложения к разд. 4). Таким образом, находим

$$\begin{aligned} f_k(l_1 j_1 l_2 j_2 J) &= 0, \text{ для нечетных } k, \\ f_k(l_1 j_1 l_2 j_2 J) &= (-1)^{J-1} (2j_1+1)(2j_2+1) \begin{pmatrix} j_1 & k & j_1 \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & k & j_2 \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j_2 & j_1 & k \end{Bmatrix}, \quad \text{для четных } k; \\
 g_k(l_1 j_1 l_2 j_2 J) &= 0 \quad \text{для нечетных } l_1 + l_2 + k, \\
 g_k(l_1 j_1 l_2 j_2 J) &= (-1)^{l_1 + j_2 - J} (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \begin{pmatrix} j_1 & k & j_2 \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \\
 & \times \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j_1 & j_2 & k \end{Bmatrix}, \quad \text{для четных } l_1 + l_2 + k. \quad (7.5.109)
 \end{aligned}$$

Модификация соотношения (7.5.104) для эквивалентных электронов в jj -конфигурации, т.е. $(n_1 l_1 j_1) = (n_2 l_2 j_2) = (n l j)$, имеет вид

$$\Delta E_{(l j)^2 J} = \sum_k F^k(n l; n l) f_k[(l j)^2 J], \quad (7.5.110)$$

причем J здесь должно быть четным целым числом вследствие принципа Паули.

Подытожим наши результаты для схемы jj -связи. Двухэлектронные уровни в $(n_1 l_1)(n_2 l_2)$ -конфигурации в схеме jj -связи даются выражением

$$E_{n_1 l_1} + E_{n_2 l_2} + \Delta E_{l_1 l_2 l_1 l_2} + \Delta E_{l_1 l_1 l_2 j_2 J}, \quad (7.5.111)$$

где принято, что а) спин-орбитальное взаимодействие преобладает над электростатическим взаимодействием и б) вкладом в энергию со стороны недиагональных матричных элементов электростатического взаимодействия можно пренебречь.

Обсуждение применимости полученных выше двухэлектронных уровней как в приближении LS -связи, так и в приближении jj -связи (соотношения (7.5.92), (7.5.93) и (7.5.111)), к системам уровней атомов, обладающих двумя электронами вне замкнутых оболочек, читатель может найти в литературе по атомной спектроскопии (см. примечание на стр. 345).

В случае двухэлектронных конфигураций техника связывания угловых моментов, дополненная рассмотрением взаимодействий с точки зрения тензорных операторных инвариантов, обеспечивает концептуально полный метод для построения собственного пространства энергии $\mathcal{V}_{E_0}^A$ антисимметризованных состояний на базисных векторах, обладающих точным полным угловым моментом J . Отсутствие одного общего решения или схемы уровней может быть приписано скорее изменению значения различных возмущений в разных атомах, чем недостаткам общего метода. Для приближенного описания уровней двухэлектронных конфигураций отдельных атомов могут потребоваться различные схемы связи или комбинации различных схем, но концептуально проблему построения состояний точного углового момента, подчиняющихся принципу Паули, можно считать решенной.

В случае трехэлектронных конфигураций при построении антисимметризованных состояний точного полного углового момента возникают новые проблемы. Для иллюстрации этих трудностей мы ограничимся в нашем рассмотрении конфигурациями l^n эквивалентных электронов (см. примечание на стр. 355).

3. Конфигурации эквивалентных электронов. Обозначим одноэлектронные состояния посредством¹⁾

$$|l - m + 1, \frac{3}{2} - \mu\rangle \equiv |nlm\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \mu\rangle \quad (7.5.112)$$

для $m = l, l-1, \dots, -l$ и $\mu = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$. Упорядочим также пары целых чисел в совокупности

$$\{(l - m + 1, \frac{3}{2} - \mu) : m = l, l-1, \dots, -l; \mu = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\} \quad (7.5.113)$$

по правилу

$$(1, 1) < (2, 1) < \dots < (2l + 1, 1)$$

$$< (1, 2) < (2, 2) < \dots < (2l + 1, 2). \quad (7.5.114)$$

В этих обозначениях слэтеровское состояние для конфигурации l^n может быть записано при помощи стандартных диаграмм Юнга:

$$\left| \begin{array}{|c|} \hline (k_1, \sigma_1) \\ \hline (k_2, \sigma_2) \\ \hline \vdots \\ \hline (k_n, \sigma_n) \\ \hline \end{array} \right\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_P (-1)^P P(|k_1, \sigma_1\rangle \otimes \dots \otimes |k_n, \sigma_n\rangle), \quad (7.5.115)$$

где $(k_1, \sigma_1)(k_2, \sigma_2) \dots (k_n, \sigma_n)$ — любая последовательность пар, выбранных из совокупности (7.5.114), которая удовлетворяет неравенствам

$$(k_1, \sigma_1) < (k_2, \sigma_2) < \dots < (k_n, \sigma_n). \quad (7.5.116)$$

Сумма в (7.5.115) берется по всем $n!$ перестановкам в наборе из n пар $(k_1, \sigma_1)(k_2, \sigma_2) \dots (k_n, \sigma_n)$.

$$\text{Вводя обозначение} \quad \xi_x = (x_z, \xi_z) \quad (7.5.117)$$

для переменных положения и спина электрона с номером α , мы находим, что выражение для слэтеровского состояния в точке $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ дается через слэтеровский детерминант

$$\left\langle \begin{array}{|c|} \hline \xi_1 \\ \hline \xi_2 \\ \hline \vdots \\ \hline \xi_n \\ \hline \end{array} \middle| \begin{array}{|c|} \hline (k_1, \sigma_1) \\ \hline (k_2, \sigma_2) \\ \hline \vdots \\ \hline (k_n, \sigma_n) \\ \hline \end{array} \right\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_P (-1)^P P(\langle \xi_1 | k_1, \sigma_1 \rangle \dots \langle \xi_n | k_n, \sigma_n \rangle), \quad (7.5.118)$$

где

$$\langle \xi_x | l - m + 1, \frac{3}{2} - \mu \rangle \equiv \langle x_z | nlm \rangle \langle \xi_x | \frac{1}{2}, \mu \rangle.$$

Собственное пространство энергии $\mathcal{V}^A(l^n) \equiv \mathcal{V}_{E_0}^A$ конфигурации l^n является векторным пространством размерности

$$\dim \mathcal{V}^A(l^n) = \binom{4l+2}{n} \quad (7.5.119)$$

¹⁾ В этой записи мы опустили n, l и $s = \frac{1}{2}$, а также заменили пару квантовых чисел проекции (m, μ) на пару $(l - m + 1, \frac{3}{2} - \mu)$. Мы выбрали такие (нетрадиционные) обозначения в предвидении отображения одночастичных состояний в бозонные состояния (см. соотношение (7.5.121)). Эта последняя индексация (бозонов) представляется удобной для использования результатов общей теории унитарных групп, что будет основной темой остающейся части этого раздела.

которое натянуто на совокупность заданных соотношением (7.5.115) ортонормированных векторов, соответствующих набору стандартных диаграмм Юнга вида $(1, 1, \dots, 1)$, которые заполнены $(4l + 2)$ упорядоченными парами (7.5.114).

Мы будем рассматривать здесь только те аспекты конфигураций l^n , которые соответствуют схеме LS -связи. Основная задача состоит во введении такого нового базиса в пространство $\mathcal{Y}^A(l^n)$, чтобы полный орбитальный угловой момент $L = \sum_{\alpha=1}^n L_{\alpha}$ и полный спин $S = \sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}$ имели стандартное действие на новые базисные векторы. (Тогда матричные элементы электростатического взаимодействия H_1 будут диагональными по (LM_L) и (SM_S) .)

На этом этапе в задаче возникает новый усложняющий элемент. Для $n = 2$ связывание угловых моментов, обозначенное через $L = L_1 + L_2$ и $S = S_1 + S_2$, и последующая антисимметризация приводили единственным образом к искомому базису в $\mathcal{Y}^A(l^n)$. Принимая во внимание, что характеристика электронов в любом упорядочении чисел $1, 2, \dots, n$ не будет играть роли благодаря перестановочной симметрии оператора H_1 , мы по-прежнему сталкиваемся с тем фактом, что имеется много различных схем¹⁾ связывания для орбитального, а также спинного угловых моментов. Этот факт означает, что существует несколько антисимметризованных базисов с LS -связью в пространстве $\mathcal{Y}^A(l^n)$ для $n > 2$. Таким образом, не существует единственной схемы связывания, приводящей к решению задачи.

Перечислим кратко классические методы, которые были применены к проблеме конфигурации l^n .

а. Первые методы Слэтера [17] и Грея и Уиллса [29] представляют собой попытку построить состояния точных полных орбитального и спинного угловых моментов путем применения метода старших весов непосредственно к базисным векторам (7.5.115), как описано выше. (Мы не будем далее обсуждать эти методы — их достоинство состоит в том, что антисимметрия сохраняется с самого начала, но построение состояний углового момента оказывается трудным.)

б. Рака ([16], работы II и III) ввел метод, соединяющий рекурсивно связывание угловых моментов и антисимметризацию. Точнее, предполагается, что антисимметризованные состояния точных угловых моментов $(L' M'_L)$ и $(S' M'_S)$ уже построены для конфигурации l^{n-1} ($L' = \sum_{\alpha=1}^{n-1} L_{\alpha}$, $S' = \sum_{\alpha=1}^{n-1} S_{\alpha}$). Затем присоединяется еще один электрон согласно схеме $L = L' + L_n$, $S = S' + S_n$, а после этого ищутся линейные комбинации этих связанных состояний, которые антисимметричны по отношению к попарным заменам n электронов. Коэффициенты такой линейной комбинации называют генеалогическими коэффициентами.

в. Второй метод Рака ([15], работа IV, и [16]) использует более общую теоретико-групповую технику для интерпретации значения и свойств генеалогических коэффициентов.

¹⁾ Число различных схем связывания для n угловых моментов равно $(2l - 3)!! = (1)(3)(5)\dots(2l - 3)$, где схемы, отличающиеся только фазой в векторе связанного состояния, считаются как эквивалентные. Эта счетная задача (и ее отношение к деревьям Кэли) рассматривается в [34].

Опишем теперь более подробно второй метод Рака, поскольку он обеспечивает естественную схему рассмотрения структур из более раннего первого метода Рака.

Мы не будем, однако, следовать традиционному пути изложения идей Рака. Большой степени общности и проникновения в применяемые теоретико-групповые структуры можно достигнуть путем использования *векторного пространства бозонных состояний*, которое изоморфно пространству $\mathcal{V}^A(n)$ (изоморфизм векторных пространств).

Введем два набора независимых бозонных операторов, обозначаемых согласно

$$\begin{aligned} \{a_k^\alpha; \alpha = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots, 2l + 1\}, \\ \{b_\sigma^\alpha; \alpha = 1, 2, \dots, n; \sigma = 1, 2\}, \end{aligned} \quad (7.5.120)$$

причем эти бозонные операторы удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям (см. разд. 5 гл. 5).

Отобразим затем физические векторы состояния, появляющиеся в равенстве (7.5.115), в бозонные векторы состояния согласно правилу

$$|k_1, \sigma_1\rangle \otimes |k_2, \sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |k_n, \sigma_n\rangle \rightarrow a_{k_1}^1 b_{\sigma_1}^1 a_{k_2}^2 b_{\sigma_2}^2 \dots a_{k_n}^n b_{\sigma_n}^n |0\rangle \quad (7.5.121)$$

Применяя это отображение к слэтеровским векторам состояния (7.5.115), получаем следующие бозонные векторы состояния:

$$\left| \begin{array}{c} (k_1, \sigma_1) \\ (k_2, \sigma_2) \\ \vdots \\ (k_n, \sigma_n) \end{array} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \mathcal{P}_{(k_1, \sigma_1)(k_2, \sigma_2) \dots (k_n, \sigma_n)}(A, B) |0\rangle, \quad (7.5.122)$$

где

$$\mathcal{P}_{(k_1, \sigma_1)(k_2, \sigma_2) \dots (k_n, \sigma_n)}(A, B)$$

$$\equiv \det \begin{bmatrix} a_{k_1}^1 b_{\sigma_1}^1 & a_{k_1}^2 b_{\sigma_1}^2 & \dots & a_{k_1}^n b_{\sigma_1}^n \\ a_{k_2}^1 b_{\sigma_2}^1 & a_{k_2}^2 b_{\sigma_2}^2 & \dots & a_{k_2}^n b_{\sigma_2}^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k_n}^1 b_{\sigma_n}^1 & a_{k_n}^2 b_{\sigma_n}^2 & \dots & a_{k_n}^n b_{\sigma_n}^n \end{bmatrix}, \quad (7.5.123)$$

A обозначает $(2l + 1) \times n$ -матрицу с элементами (a_k^α) , B обозначает $2 \times n$ -матрицу с элементами (b_σ^α) , а символ $\mathcal{P}(A, B)$ означает, что $\mathcal{P}$ является полиномом, определенным на элементах (a_k^α) матрицы A и на элементах (b_σ^α) матрицы B .

Совокупность бозонных векторов состояния (7.5.122), соответствующих всем стандартным диаграммам Юнга, состоящим из одного столбца (упорядочение задано правилом (7.5.114)), является ортонормированным базисом векторного пространства размерности $\binom{4l + 2}{n}$, которое мы будем обозначать $\mathcal{B}^A(n)$.

Используя теперь жорданово отображение (разд. 3 гл. 5), мы можем ввести (бозонные) операторы $\mathcal{L}_\alpha = (\mathcal{L}_{\alpha 1}, \mathcal{L}_{\alpha 2}, \mathcal{L}_{\alpha 3})$ и $\mathcal{S}_\alpha = (\mathcal{S}_{\alpha 1}, \mathcal{S}_{\alpha 2}, \mathcal{S}_{\alpha 3})$, определенные в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{xi} &= \tilde{a}^\dagger J_i^{(1)} \tilde{a}^x, \\ \mathcal{S}_{xi} &= \frac{1}{2} \tilde{b}^\dagger \sigma_i \tilde{b}^x, \end{aligned} \quad (7.5.124)$$

где $a^\alpha = \text{col}(a_1^\alpha, a_2^\alpha, \dots, a_{2l+1}^\alpha)$ и $b^\alpha = \text{col}(b_1^\alpha, b_2^\alpha)$. Операторы $\mathcal{L}_\alpha$ и $\mathcal{S}_\alpha$ обладают тогда таким же действием в пространстве $\mathcal{B}^A(l^n)$, каким обладают орбитальный угловой момент L_α и спин S_α соответственно в пространстве $\mathcal{Y}^A(l^n)$. Таким образом, задача нахождения состояний точных значений $(LM_L)(SM_S)$ в пространстве $\mathcal{Y}^A(l^n)$ трансформировалась в аналогичную задачу в пространстве $\mathcal{B}^A(l^n)$, но теперь с использованием реализаций полного углового момента $\mathcal{L}$ и полного спина $\mathcal{S}$ по формулам $\mathcal{L} = \sum_\alpha \mathcal{L}_\alpha$ и $\mathcal{S} = \sum_\alpha \mathcal{S}_\alpha$. Как только последняя задача решена, результаты можно преобразовать обратно в пространство $\mathcal{Y}^A(l^n)$ при помощи отображения, обратного к выписанному в (7.5.121).

Отображение векторного пространства $\mathcal{Y}^A(l^n)$ в его бозонную реализацию $\mathcal{B}^A(l^n)$ мы осуществляем с целью сделать многообразие известных свойств бозонных векторов состояния, рассматриваемых в приложениях А и Б гл. 5 (и в цитированной там литературе), доступным для определения свойств этих пространств. Благодаря этому шагу достигается большая общность и простота, и теперь представляется разумным рассмотреть следующие четыре типа унитарных преобразований бозонов (левые и правые трансляции):

$$\begin{aligned} A &\rightarrow \tilde{W}A, & B &\rightarrow \tilde{U}B, \\ A &\rightarrow AV, & B &\rightarrow BV', \end{aligned} \quad (7.5.125)$$

где W, U, V и V' — унитарные матрицы размерностей $2l + 1$, 2 , n и n соответственно.

Преобразования $A \rightarrow \tilde{W}A$ и $B \rightarrow \tilde{U}B$ отвечают унитарным преобразованиям множества пространственных одночастичных состояний $\{|nlm\rangle : m = l, l-1, \dots, -l\}$ и множества одночастичных спиновых состояний $\{|\frac{1}{2}\mu\rangle : \mu = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$ соответственно. Пространство $\mathcal{B}^A(l^n)$ инвариантно относительно этих преобразований. В общем случае каждое из этих преобразований $A \rightarrow AV$ и $B \rightarrow BV'$ выводит вектор из $\mathcal{B}^A(l^n)$ за пределы этого пространства. (Для пространства $\mathcal{Y}^A(l^n)$ такие преобразования соответствовали бы унитарным преобразованиям, действующим на *порядок* одночастичных состояний в пространстве тензорного произведения, и не имели бы физического значения, за исключением симметрической подгруппы преобразований $S_n \subset U(n)$.) Заметим, однако, что *все преобразования (7.5.125) являются отображениями более широкого пространства $\mathcal{B}(l^n) \supset \mathcal{B}^A(l^n)$ однородных полиномов степени n по a_k^α и по b_α^α в себя.*

Теперь мы можем воспользоваться известными свойствами пространства $\mathcal{B}(l^n)$, чтобы определить явно новый базис подпространства $\mathcal{B}^A(l^n)$ со следующими свойствами: а) базис полностью разлагается на подбазисы, такие, что на каждый подбазис натягивается подпространство, которое преобразуется неприводимым образом относительно унитарных преобразований $U(2l+1) \supset SO(3)$, где $SO(3)$ — группа вращений, генерируемая полным орбитальным угловым моментом $\mathcal{L}$, и б) каждый базисный вектор имеет точный полный спин (SM_S) .

Таким образом, становится возможным полностью осуществить первый шаг в программе Рака, а именно классифицировать l^n -конфигурации по их неприводимым трансформационным свойствам относительно группы $U(2l+1)$ и относительно спиновой группы $U(2)$. Гораздо более трудная задача о разложении неприводимых представлений группы $U(2l+1)$ на неприводимые представления

группы $SO(3)$ полного орбитального углового момента будет рассмотрена ниже.

Опишем теперь более подробно этот новый базис в $\mathcal{B}^A(I^n)$, используя введенные в приложениях А и Б гл. 5 обозначения двойной диаграммы и схемы Гельфанда¹⁾. Это описание само по себе представляется довольно длинным и осуществляется в десять шагов (а — к), которые приведены ниже. Следуя этому описанию, мы дадим краткое доказательство основного результата — формулы (7.5.126). (Более подробное доказательство не служило бы нашей цели иллюстрации техники углового момента, поскольку оно существенно опирается на результаты, которые во всех подробностях можно найти лишь в литературе, цитированной в гл. 5.)

Базис в пространстве $\mathcal{B}^A(I^n)$ задается набором ортонормированных векторов, характеризующимых при помощи следующего обозначения двойной стандартной диаграммы:

$$|(T_{U_{2l+1}}|T_{U_2})\rangle \equiv \sum_{T_{S_n}} C_{T_{S_n}} |(T_{U_{2l+1}}|\tilde{T}_{S_n})\rangle \otimes |(T_{U_2}|T_{S_n})\rangle. \quad (7.5.126)$$

В последнем выражении используются следующие обозначения:

а. T обозначает схему Юнга вида

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & \cdots & & \cdots & \\ \hline & & \cdots & & \cdots & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{l} \frac{n}{2} + S \\ \frac{n}{2} - S \end{array} \quad (7.5.127)$$

б. $\tilde{T}$ обозначает дуальную или сопряженную схему вида

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \vdots & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} 2 \\ \vdots \\ 2 \end{array} \right\} \frac{n}{2} - S$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \vdots \\ \hline \\ \hline \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{array} \right\} 2S \quad (7.5.128)$$

в. T_{S_n} обозначает стандартную диаграмму Юнга для симметрической группы S_n (схему (7.5.127), заполненную в лексикографическом порядке числами $1, 2, \dots, n$).

г. T_{U_2} обозначает стандартную диаграмму Вейля для унитарной группы $U(2)$ (схему (7.5.127), заполненную в лексикографическом порядке числами $1, 2$).

д. $\tilde{T}_{S_n}$ обозначает стандартную диаграмму Юнга, сопряженную к T_{S_n} (схему (7.5.128)), заполненную в лексикографическом порядке числами $1, 2, \dots, n$.

е. $\tilde{T}_{U_{2l+1}}$ обозначает стандартную диаграмму Вейля для унитарной группы $U(2l+1)$ (схему (7.5.128), заполненную лексикографически числами $1, 2, \dots, 2l+1$).

ж. Базисные векторы $|(T_{U_2}|T_{S_n})\rangle$ являются бозонной реализацией явных спинных состояний (построенных в приложении А этого раздела), задаваемой согласно

¹⁾ В отечественной литературе принято название «схема Гельфанда — Цетлина». — Прим. перев.

$$\begin{aligned}
|(T_{U_2}|T_{S_n})\rangle &= |(y_1 y_2 \dots y_n); SM_S\rangle \\
&= \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n=1}^2 \left\langle \left(\begin{array}{cc} \frac{n}{2} + S & \frac{n}{2} - S \\ & \frac{n}{2} + M_S \end{array} \right) \right| \left\langle \begin{array}{cc} y_1 & \\ 1 & \sigma_1 \end{array} \right\rangle \dots \left\langle \begin{array}{cc} y_n & \\ 1 & \sigma_n \end{array} \right\rangle \left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle \\
&\quad \times b_{\sigma_1}^1 b_{\sigma_2}^2 \dots b_{\sigma_n}^n |0\rangle,
\end{aligned} \tag{7.5.129}$$

где $(y_1 y_2 \dots y_n)$ — символ Яманучи стандартной диаграммы Юнга T_{S_n} .

3. Базисные векторы $|(T_{U_{2l}}|T_{S_n})\rangle$ являются векторами бозонных состояний в терминах бозонов (a_k^α) . (Они представляют собой бозонную реализацию тензорного произведения пространств, построенную из одних только пространственных состояний $|nlm\rangle$.) Эти векторы бозонных состояний получают как частные случаи общих векторов бозонных состояний, заданных формулой (А.58) (в приложении А гл. 5): для $n \leq 2l + 1$ двойные схемы Гельфанда являются схемами для группы $U(2l + 1)$ типа

$$\begin{array}{l}
n\text{-я строка} \\
(2l + 1)\text{-я строка}
\end{array}
\left(\begin{array}{ccccccc} & & & & (\mu) & & \\ & & & & [2 \dots 2 \ 1 \dots 1 \ 0 \dots 0] & & \\ & & / & // & // & // & / \\ & & [2 \dots 2 \ 1 \dots 1 \ 0 \dots 0 \dots 0] & & (m) \end{array} \right) \tag{7.5.130}$$

в которых каждая из строк с номерами $n, n + 1, \dots, 2l + 1$ в верхней схеме содержит двойку $(n/2) - S$ раз и единицу $2S$ раз, причем остальная часть каждой строки заполнена нулями. Нижняя схема (m) является лексикографической схемой Гельфанда для группы $U(2l + 1)$, соответствующей разбиению $[2^{(n/2)} - S]^{2S}$ числа n . Она соответствует стандартной диаграмме $\tilde{T}_{U_{2l}+S_n}$. Верхняя схема (μ) является лексикографической схемой Гельфанда для группы $\tilde{S}_n$, соответствующей разбиению $[2^{(n/2)} - S]^{2S}$ числа n . Она соответствует стандартной диаграмме $\tilde{T}_{S_n}$.

Для $n \geq 2l + 1$ двойные схемы Гельфанда являются схемами для группы $U(n)$ типа

$$\begin{array}{l}
n\text{-я строка} \\
(2l + 1)\text{-я строка}
\end{array}
\left(\begin{array}{ccccccc} & & & & (\mu) & & \\ & & & & [2 \dots 2 \ 1 \dots 1 \ 0 \dots 0 \dots 0] & & \\ & \backslash & \backslash & \backslash & \backslash & \backslash & \backslash \\ & [2 \dots 2 \ 1 \dots 1 \ 0 \dots 0] & & (m) \end{array} \right) \tag{7.5.131}$$

в которых каждая из строк с номерами $2l + 1, 2l + 2, \dots, n$ в нижней схеме содержит двойку $(n/2) - S$ раз и единицу $2S$ раз. Схемы (m) и (μ) имеют такое же значение, как описано выше.

Явными базисными векторами являются векторы

$$\begin{aligned}
|(\tilde{T}_{U_{2l+1}}|\tilde{T}_{S_n})\rangle \\
= \sum_{k_1}^{2l+1} \sum_{k_n=1} \left\langle \begin{pmatrix} [m] \\ (m) \end{pmatrix} \right| \left\langle \begin{array}{cc} \gamma_1 & \\ [1] & 0 \\ & k_1 \end{array} \right\rangle \left\langle \begin{array}{cc} \gamma_2 & \\ [1] & 0 \\ & k_2 \end{array} \right\rangle \dots \left\langle \begin{array}{cc} \gamma_n & \\ [1] & 0 \\ & k_n \end{array} \right\rangle \left| (0) \right\rangle
\end{aligned}$$

$$\times a_{k_1}^1 a_{k_2}^2 \cdots a_{k_n}^n |0\rangle, \quad (7.5.132)$$

где $(\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n)$ — символ Яманучи стандартной диаграммы Юнга $\tilde{T}_{S_n}$. Для $n \leq 2l + 1$ схема Гельфанда $(\{m\})$, где

$$[m] = [2^{(n/2)-S} \ 1^{2S} \ 0^{2l+1-(n/2)-S}],$$

является нижней схемой двойной схемы (7.5.130), соответствующей группе $U(2l + 1)$; для $n \geq 2l + 1$ индексы $[m]$ неприводимых представлений $(\{m\})$ имеют вид

$$[m] = [2^{(n/2)-S} \ 1^{2S} \ 0^{(n/2)-S}],$$

и эта схема является *полной* нижней схемой для $U(n)$ в (7.5.131), включающей строки с номерами от $2l + 1$ до n .

Обозначение

$$\left\langle \begin{array}{c} \gamma \\ [1 \quad 0] \\ k \end{array} \right\rangle \quad (7.5.133)$$

соответствует фундаментальному оператору Вигнера унитарной группы $U(r)$, $r = \max(n, 2l + 1)$, где k и γ ($k, \gamma = 1, 2, \dots, r$) означают, что нижняя и верхняя схемы являются схемами с весами $W(k) = [0 \dots 010 \dots 0]$ (единица на k -м месте) и $W(\gamma) = [0 \dots 010 \dots 0]$ (единица на γ -м месте) соответственно. Матричные элементы фундаментальных операторов Вигнера полностью известны для всех $U(n)$ (см. [30]) и фактически могут быть получены из некоторых простых правил, известных как «правила схемного исчисления» и описанных в работе [31], а также [75]. Таким образом, (7.5.132) есть вполне явное выражение для базисных векторов $|\tilde{T}_{U_{2l+1}} | \tilde{T}_{S_n}\rangle$.

и. Суммирование в (7.5.126) ведется по всем стандартным диаграммам Юнга формы T (следовательно, в сумме имеется $\dim[(n/2) + S, (n/2) - S]$ выражений (см. (A. 18) в приложении к этому разделу). В этом выражении $C_{T_{S_n}}$ — коэффициенты Клебша — Гордана, выделяющие антисимметричную неприводимую компоненту в прямом произведении представлений $\tilde{T} \times T$ группы S_n . Эти коэффициенты задаются в явном виде (см. например, [32], стр. 266):

$$\begin{aligned} C_{T_{S_n}} &= \left\langle \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \vdots \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \middle| (\tilde{T}_{S_n} | T_{S_n}) \right\rangle \\ &= \sigma(T_{S_n}) / \left(\dim \left[\frac{n}{2} + S, \frac{n}{2} - S \right] \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \sigma(T_{S_n}) / \left[\frac{2S + 1}{\frac{n}{2} + S + 1} \binom{n}{\frac{n}{2} - S} \right]^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (7.5.134)$$

где $\sigma(T_{S_n})$ — сигнатура (знак) диаграммы T_{S_n} . (Если числа в стандартной диаграмме T_{S_n} есть $i_1 i_2 \dots i_n$, если читать их слева направо вдоль первой строки, за которой следует вторая строка, то сигнатура $\sigma(T_{S_n})$ диаграммы определяется знаком перестановки $\begin{pmatrix} 1 & \dots & n \\ i_1 & \dots & i_n \end{pmatrix}$).

к. Базис (7.5.126) пространства $\mathcal{B}^A(l^n)$ нумеруется следующим образом. Для каждой схемы Юнга T (фиксированный спин S) диаграммы $\tilde{T}_{U_{2l+1}}$ и T_{U_2} пробегают все стандартные диаграммы. (Это эквивалентно тому, что (m) пробегают все лексикографические схемы Гельфанда, а M_S — все числа $S, S-1, \dots, -S$.) Тогда спин S может пробегать все значения

$$S = \frac{n}{2}, \frac{n}{2} - 1, \dots, \frac{1}{2} \quad \text{или } 0 \quad (7.5.135)$$

в соответствии с различными схемами Юнга T . Для согласованности размерностей векторных пространств, которые имеются в произведении пространств в формуле (7.5.126), с размерностью $\mathcal{B}^A(l^n)$ существует соотношение

$$\sum_S (2S+1) \dim[2^{(n/2)-S} 1^{2S}] = \binom{4l+2}{n}, \quad (7.5.136)$$

где размерность неприводимого представления $[2^{(n/2)-S} 1^{2S}]$ группы $U(2l+1)$ дается формулой

$$\dim[2^{(n/2)-S} 1^{2S}] = \frac{2S+1}{\frac{n}{2} + S + 1} - \binom{2l+1}{\frac{n}{2} + S} \binom{2l+2}{\frac{n}{2} - S}. \quad (7.5.137)$$

Замечания. а) Результат, выраженный формулой (7.5.126), полностью решает задачу образования пространства $\mathcal{B}^A(l^n)$ (а следовательно, пространства $\mathcal{U}^A(l^n)$) с помощью базисных векторов, которые 1) антисимметричны при попарной перестановке электронов, 2) имеют точные спинные квантовые числа (SM_S) и 3) являются базисом пространства неприводимого представления $[2^{(n/2)-S} 1^{2S}]$ группы $U(2l+1)$. б) Рака знал о диаграммной структуре базисных векторов $|\tilde{T}_{U_{2l+1}} \mid T_{U_2}\rangle$, соответствующих неприводимым представлениям группы $U(2l+1) \times U(2)$, но не получил явного разложения этих векторов в сумму по пространственной и спинной частям, хотя он и знал этот общий закон разложения из работы Вейля [13]. в) Используя проективные операторы, Годдар [33] также построил базисные векторы $|\tilde{T}_{U_{2l+1}} \mid T_{U_2}\rangle$ в виде, который эквивалентен соотношению для векторов бозонных состояний

$$|(\tilde{T}_{U_{2l+1}} \mid T_{U_2})\rangle = \sum_{(k, \sigma)} \langle(k, \sigma) | (\tilde{T}_{U_{2l+1}} \mid T_{U_2})\rangle |k, \sigma\rangle, \quad (7.5.138)$$

где $(k, \sigma) = \text{col} [(k_1, \sigma_1) \dots (k_n, \sigma_n)]$ обозначает диаграмму из формулы (7.5.122) с одним столбцом, $|k, \sigma\rangle$ — вектор состояния и суммирование ведется по всем стандартным диаграммам. Вклад Годдара состоял в том, что он дал процедуру для вычисления коэффициентов

$$\langle(k, \sigma) | (\tilde{T}_{U_{2l+1}} \mid T_{U_2})\rangle. \quad (7.5.139)$$

Эти коэффициенты являются коэффициентами разложения антисимметричного неприводимого представления $[(k_1, \sigma_1)(k_2, \sigma_2) \dots (k_n, \sigma_n)]$ группы $U(4l+2)$ на неприводимые представления подгруппы $U(2l+1) \times U(2) \subset U(4l+2)$. Коэффициенты (7.5.139) здесь получены путем вычисления бозонного скалярного произведения

$$\begin{aligned}
& \langle (k, \sigma) | (\bar{T}_{U_{2l+1}} | T_{U_2}) \rangle \\
&= \left(\dim \left[\frac{n}{2} + S \quad \frac{n}{2} - S \right] \right)^{-1} \\
&\times \sum_{T_{S_n}} \sigma(T_{S_n}) \\
&\times \sum_P (-1)^{\sigma} \left\langle \left(\frac{n}{2} + S \quad \frac{n}{2} - S \right) \middle| P \left(\left\langle \begin{smallmatrix} x_1 \\ 1 \end{smallmatrix} \quad 0 \right\rangle \cdots \left\langle \begin{smallmatrix} y_n \\ 1 \end{smallmatrix} \quad 0 \right\rangle \right) \middle| \left(\begin{smallmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix} \right) \right\rangle \\
&\times \left\langle \left(\begin{smallmatrix} [m] \\ (m) \end{smallmatrix} \right) \middle| P \left(\left\langle \begin{smallmatrix} \gamma_1 \\ [1] \end{smallmatrix} \quad 0 \right\rangle \cdots \left\langle \begin{smallmatrix} \gamma_n \\ [1] \end{smallmatrix} \quad 0 \right\rangle \right) \middle| \left(\begin{smallmatrix} 0 \\ k_1 \end{smallmatrix} \right) \right\rangle, \quad (7.5.140)
\end{aligned}$$

где суммирование по P ведется по всем $n!$ перестановкам n пар в последовательности $(k_1, \sigma_1) \dots (k_n, \sigma_n)$. Напомним также, что $(y_1 y_2 \dots y_n)$ — символ Яманучи диаграммы T_{S_n} , $(\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n)$ — символ Яманучи сопряженной диаграммы T_{S_n} , а $\left\{ \begin{smallmatrix} [m] \\ (m) \end{smallmatrix} \right\}$ — схема Гельфанда из (7.5.132). г) Методы унитарной группы и связанных с ней диаграмм недавно нашли широкие приложения в физике многих тел, и результаты, эквивалентные результатам этого раздела, были получены другими авторами с помощью различных методов (см., например, [36 — 45]). Эти методы приводят к другим формам матричных элементов ряда операторов Вигнера, встречающихся в нашем рассмотрении (обзор использования общих бозонных полиномов для получения частных базисных векторов, интересных для физических приложений, дан в работе [46]).

Результат (7.5.127) имеет фундаментальное значение для изучения l^n -конфигураций с точки зрения унитарной симметрии. Однако этот результат не решает задачи построения состояний точного орбитального углового момента (LM_L). Это требует разложения неприводимого представления $[2^{(n/2)} - S_1^{2S}]$ группы $U(2l+1)$ на неприводимые представления ортогональной подгруппы $SO(3)$, соответствующей орбитальным вращениям n электронов. Но построение пространств этих неприводимых представлений сохраняет структуру симметричной группы S_n в правой стороне соотношения (7.5.126) и в коэффициентах (7.5.140), так как это построение включает только суммирования по стандартным диаграммам $\bar{T}_{U_{2l+1}}$ (схем Гельфанда $\left\{ \begin{smallmatrix} [m] \\ (m) \end{smallmatrix} \right\}$ из (7.5.140)). (Подобный результат справедлив для редукции неприводимого представления $[2^{(n/2)} - S_1^{2S}]$ группы $U(2l+1)$ на неприводимые представления любой подгруппы.)

Дадим набросок доказательства соотношения (7.5.126).

Доказательство. Сначала сформулируем четыре общих результата. 1. *Пространство $\mathcal{A}(l^n)$ является пространством унитарного представления прямого произведения групп*

$$U(2l+1) \times U(n) \times U(2) \times U(n). \quad (7.5.141)$$

В самом деле, положив $W \in U(2l+1)$, $V \in U(n)$, $U \in U(2)$ и $V' \in U(n)$, находим, что множество унитарных операторов (см. (5.57) и (5.42) в гл. 5), определенных формулой

$$\mathcal{T}(W, V, U, V') P(A, B) | 0 \rangle \equiv P(\bar{W} A V, U B V') | 0 \rangle \quad (7.5.142)$$

является унитарным представлением группы $U(2l+1) \times U(n) \times U(2) \times U(n)$.

2. Пространство $\mathcal{B}^A(I^n)$ является пространством представления прямого произведения групп

$$U(2l+1) \times U(2) \times S_n, \quad (7.5.143)$$

которое является подгруппой прямого произведения групп (7.5.141), где S_n — диагональная подгруппа в $S_n \times S_n \subset U(n) \times U(n)$. Этот результат получается выбором в (7.4.142) $V = V' = \Gamma(P)$, где $\Gamma(P)$ — унитарная $n \times n$ -матрица перестановки, определенная формулой

$$\Gamma(P) = [e_{\alpha_1} e_{\alpha_2} \cdots e_{\alpha_n}] \quad (7.5.144)$$

для

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_n \end{pmatrix}. \quad (7.5.145)$$

Символ e_α обозначает матрицу-столбец с элементами $\delta_{\alpha i}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

3. Антисимметричное неприводимое представление $[1^n]$ группы S_n встречается в прямом произведении $[v] \otimes [\mu]$ двух неприводимых представлений S_n тогда и только тогда, когда $[v]$ сопряжено с $[\mu]$. В этом случае $[1^n]$ входит в разложение в точности один раз. (Это хорошо известный результат Вейля [13]).

4. Подгруппа в $U(2l+1) \times U(n)$ преобразований $\{(W, V, \mathbb{1}_2, \mathbb{1}_n)\}$ ($\mathbb{1}_k$ — единичная $k \times k$ -матрица) реализуется бозонной $(2l+1) \times n$ -матрицей A . Известно (см. приложение А гл. 5), что бозонные полиномиальные векторы, соответствующие в обозначении двойных схем Гельфанда схема (мы рассматриваем только случай $n \leq 2l+1$)

$$\left| \left(\begin{array}{c} (\mu) \\ [m_{1,2l+1} \cdots m_{n,2l+1}] \\ \diagup \quad \quad \quad \diagup \\ [m_{1,2l+1} \cdots m_{n,2l+1} \ 0 \cdots 0] \\ (m) \end{array} \right) \right\rangle \quad (7.5.146)$$

являются базисом для всех векторов однородных полиномиальных бозонных состояний от (a_k^α) степени n . (Базис нумеруется благодаря тому, что $[m_{1,2l+1} \cdots m_{n,2l+1} \ 0 \cdots 0]$ пробегает все разбиения числа n , а (μ) и (m) пробегают все допустимые схемы Гельфанда.)

Подобным же образом подгруппа в $U(2) \times U(n)$ преобразований $\{(\mathbb{1}_{2l+1}, \mathbb{1}_n, U, V')\}$ реализуется бозонной $2 \times n$ -матрицей B , и бозонные полиномиальные векторы

$$\left| \left(\begin{array}{c} (\mu') \\ [(n/2) + S \quad (n/2) - S \quad 0 \cdots 0] \\ \diagdown \quad \quad \quad \diagdown \\ (n/2) + S \quad (n/2) - S \\ (n/2) + M_S \end{array} \right) \right\rangle \quad (7.5.147)$$

являются базисом всех векторов однородных полиномиальных бозонных состояний от (b_σ^α) степени n . (Базис нумеруется благодаря тому, что $S = (n/2)$, $(n/2) - 1, \dots, 1/2$ или 0 ; $M_S = S, \dots, -S$, а (μ') пробегает все допустимые схемы Гельфанда.)

Используя свойства 1 — 4, завершим теперь доказательство соотношения (7.5.126).

Пространство $\mathcal{B}(l^n)$ натягивается на множество ортонормированных векторов, полученных путем образования тензорного произведения базиса (7.5.146) с базисом (7.5.147). Таким образом, пространство $\mathcal{B}(l^n)$ является пространством представления (при действии операторов, определенных формулой (7.5.142))

$$\sum \oplus [m_{1,2l+1} \cdots m_{n,2l+1} 0 \cdots 0] \otimes [m_{1,2l+1} \cdots m_{n,2l+1}] \otimes \left[\frac{n}{2} + S \quad \frac{n}{2} - S \right] \otimes \left[\frac{n}{2} + S \quad \frac{n}{2} - S \quad 0 \cdots 0 \right] \quad (7.5.148)$$

группы $[U(2l+1) \times U(n)] \times [U(2) \times U(n)]$, где суммирование ведется по всем разбиениям $[m_{1,2l+1} \cdots m_{n,2l+1}]$ числа n и по всем $S = n/2, n/2 - 1, \dots, 1/2$ или 0.

Подпространство $\mathcal{B}'(l^n)$ пространства $\mathcal{B}(l^n)$, натянутое на векторы-произведения, полученные ограничением схем Гельфанда (μ) и (μ') в формулах (7.5.146) и (7.5.147) соответственно множеством схем, имеющих вес $(1, 1, \dots, 1)$, является пространством представления (7.5.148) подгруппы

$$[U(2l+1) \times S_n] \times [U(2) \times S_n]. \quad (7.5.149)$$

Используя свойство 3, видим, что антисимметричное представление $[1^n]$ группы S_n (диагональная подгруппа группы $S_n \times S_n$ в (7.5.149)) реализуется в тех подпространствах пространства $\mathcal{B}'(l^n)$, для которых неприводимое представление $[m_{1,2l+1} \cdots m_{n,2l+1}]$ подгруппы S_n из прямого произведения $U_{2l+1} \times S_n$ сопряжено неприводимому представлению $[n/2 + S, n/2 - S, 0 \dots 0]$ подгруппы S_n из $U(2) \times S_n$. Выбирая удовлетворяющие этому условию базисные векторы из множества базисных векторов пространства $\mathcal{B}'(l^n)$ и используя коэффициенты (7.5.134), чтобы образовать линейные комбинации базисных векторов, преобразующихся по неприводимому представлению $[1^n]$ группы S_n при действии $(\mathbb{1}_{2l+1}, \Gamma(P), \mathbb{1}_2, \Gamma(P)) (\mathbb{1}_k$ — единичная матрица размерности k), получаем подпространство $\mathcal{B}''(l^n) \subset \mathcal{B}'(l^n) \subset \mathcal{B}(l^n)$ с базисом

$$\left\{ |(\tilde{T}_{U_{2l+1}} | T_{U_2})\rangle : \begin{array}{l} \tilde{T}_{U_{2l+1}} - \text{стандартная диаграмма Вейля для} \\ \text{группы } U_{2l+1} \text{ формы } \tilde{T}; T_{U_2} - \text{стандартная} \\ \text{диаграмма Вейля для группы } U_2 \text{ формы } T; \\ S = (n/2), (n/2) - 1, \dots, 1/2 \text{ или } 0. \end{array} \right\} \quad (7.5.150)$$

Базис (7.5.150) а) ортонормирован, б) имеет размерность $\binom{4l+2}{n}$, в) однороден степени n по (a_k^n) и по (b_k^n) и г) антисимметричен при перестановках верхних индексов $(1, 2, \dots, n)$. Следовательно, $\mathcal{B}''(l^n) = \mathcal{B}^A(l^n)$. ■

и. Операторные структуры в l^n -конфигурациях. Выше мы отметили, что построение базисных векторов (7.5.126) не решает задачи построения состояний точного орбитального углового момента (LM_L). Последняя задача может быть описана двумя полезными и связанными путями: а) на нее можно смотреть, как на глобальную теоретико-групповую задачу разложения неприводимого пред-

ставления $[2^{(n/2)} - S_{12S}]$ группы $U(2l + 1)$ на неприводимые представления подгруппы $SO(3) \subset U(2l + 1)$ орбитального углового момента; б) на нее можно смотреть, как на задачу теории алгебр Ли об определении всех линейных комбинаций базисных векторов (7.5.132), на которых операторы полного орбитального углового момента (точнее из бозонные операторные аналоги) имеют стандартное мультиметное действие. В любом подходе к задаче существенно правильно выделить подгруппу $SO(3)$ в $U(2l + 1)$, которая порождается операторами полного углового момента. (Группа $SO(3)$ может вкладываться в $U(2l + 1)$ различными путями, которые не соответствуют физическому орбитальному угловому моменту.)

Рассмотрим сначала задачу с глобальной точки зрения. Для каждого $U \in U(2l + 1)$ при действии операторов $\mathcal{A}(U, \mathbb{1}_n, \mathbb{1}_2, \mathbb{1}_n)$ (см. (7.5.142)) для каждой отдельной диаграммы $\tilde{T}_S$ базисные векторы (7.5.132) преобразуются линейно и неприводимо между собой. Коэффициенты в этом линейном преобразовании порождают неприводимое представление группы $U(2l + 1)$, обозначаемое через

$$D^{[2^{n/2} - S_{12S}]}(U), \quad U \in U(2l + 1) \quad (7.5.151)$$

(унитарная матрица размерности, заданной формулой (7.5.137)). Соответствующее преобразование самих бозонов задается формулой

$$a_k^2 \rightarrow \sum_{j=1}^{2l+1} u_{jk} a_j^2, \quad (7.5.152)$$

что отвечает преобразованию одночастичных состояний (см. примечание на стр. 369):

$$|nlm\rangle \rightarrow \sum_{m'} u_{l-m'+1, l-m+1} |nlm'\rangle. \quad (7.5.153)$$

При вращении на угол ϕ вокруг направления $\hat{n}$ одночастичные состояния подвергаются преобразованию

$$|nlm\rangle \rightarrow \sum_{m'=l}^{-l} (U(\phi, \hat{n}))_{l-m'+1, l-m+1} |nlm'\rangle, \quad (7.5.154)$$

где $U(\phi, \hat{n})$ — унитарная $(2l + 1) \times (2l + 1)$ -матрица вращения

$$U(\phi, \hat{n}) = e^{-i\phi \hat{n} \cdot \mathbf{J}^{(n)}}. \quad (7.5.155)$$

(Строки и столбцы нумеруются индексами $j, k = 1, 2, \dots, 2l + 1$.) Таким образом, преобразование в бозонном пространстве, соответствующее вращению в физическом пространстве, имеет вид

$$a_k^2 \rightarrow \sum_{j=1}^{2l+1} (U(\phi, \hat{n}))_{jk} a_j^2. \quad (7.5.156)$$

Этот результат показывает, что пространство $\mathcal{B}^{(n)}$ является пространством представления

$$D^{[2^{n/2} - S_{12S}]}(U(\phi, \hat{n})) \quad (7.5.157)$$

физической группы вращений (группы, порожденной операторами полного орбитального углового момента).

Представление (7.5.157) в общем случае приводимо. Задача нахождения состояний точного орбитального углового момента состоит в следующем: тре-

буется разложить представление (7.5.157) на неприводимые составляющие $D^L(\phi, \hbar)$, $L = 0, 1, 2, \dots, L_{\max}$.

Генераторами представления (7.5.157) группы $SO(3)$ являются сами эрмитовы $(2l + 1) \times (2l + 1)$ -матрицы углового момента J_i^l . Используя теперь преобразование Жордана (5.46) гл. 5, находим бозонную реализацию операторов орбитального углового момента $\mathcal{L}_i$ ($i = 1, 2, 3$)

$$\mathcal{L}_i = \sum_{m, m' = -l}^{-l} (J_i^{(l)})_{mm'} E_{l-m+1, l-m'+1}, \quad (7.5.158)$$

где

$$E_{jk} = \sum_{\alpha=1}^n a_j^\alpha \bar{a}_k^\alpha, \quad j, k = 1, 2, \dots, 2l + 1. \quad (7.5.159)$$

Точнее говоря, мы имеем соотношения

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_+ &= \sum_{m=l}^{-l} [(l-m)(l+m+1)]^{\frac{1}{2}} E_{l-m, l-m+1}, \\ \mathcal{L}_- &= \sum_{m=l}^{-l} [(l-m)(l+m+1)]^{\frac{1}{2}} E_{l-m+1, l-m}, \\ \mathcal{L}_3 &= \sum_{m=l}^{-l} m E_{l-m+1, l-m+1}. \end{aligned} \quad (7.5.160)$$

Если перефразировать в терминах алгебры Ли, то можно сказать, что задача нахождения состояний точного орбитального углового момента состоит в следующем: определить все линейные комбинации векторов $|(\vec{T}_{U_{2l}} + \vec{T}_{S_n})\rangle$ (7.5.132), на которых операторы $\mathcal{L}_\pm, \mathcal{L}_3$ имеют стандартное действие (метод старших весов).

Общее решение поставленной выше задачи (в двух формулировках) еще не появлялось в литературе, хотя решение для малых значений l (кратность 1 или 2) приведено во многих работах.

Трудность в решении задачи об орбитальном угловом моменте заключается в кратности появления заданного значения L полного орбитального углового момента; операторы $\mathcal{L}_\pm, \mathcal{L}_3$ не делают различия между подпространствами пространства $\mathcal{H}^A(l^n)$, которые характеризуются одним и тем же L . Рака [15, 16] пытался решить эту трудность путем введения других подгрупп группы $U(2l + 1)$, которые содержат группу вращений как подгруппу. Чтобы обсудить этот метод, нам потребуются дальнейшая разработка использованной выше техники отображения Жордана.

Результат, который должен быть сделан более явным, состоит в следующем: *каждое конечномерное пространство $\mathcal{V}$ со скалярным произведением, так же как векторное пространство всех линейных отображений пространства $\mathcal{V}$ в себя, может быть реализовано в терминах бозонов*. Докажем этот результат для произвольного пространства $\mathcal{V}$ со скалярным произведением размерности $\dim \mathcal{V} = d$.

Доказательство. Пусть $\psi_i, i = 1, 2, \dots, d$, обозначает ортонормированный базис в $\mathcal{V}$. Тогда $\mathcal{V}$ отображается в векторное пространство $\mathcal{B}$ ($\dim \mathcal{B} = d$) бозонных состояний, и это отображение задается по правилу

$$\psi_i \rightarrow a_i |0\rangle. \quad (7.5.161)$$

Тогда произвольный вектор $\psi = \sum_i \lambda_i \psi_i \in \mathcal{V}$ отображается в вектор $|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i a_i |0\rangle \in \mathcal{B} (\lambda_i \in \mathbb{C})$.

Каждый линейный оператор $\mathcal{T}$, определенный на $\mathcal{V}$ формулой

$$\mathcal{T} \psi_i = \sum_j \mathcal{T}_{ji} \psi_j \quad (7.5.162)$$

теперь с помощью отображения Жордана отображается в линейный оператор

$$\mathcal{L}_{\mathcal{T}} = \sum_{ij} \mathcal{T}_{ij} a_i \bar{a}_j. \quad (7.5.163)$$

Этот оператор действует на $\mathcal{B}$ по формуле

$$\mathcal{L}_{\mathcal{T}}(a_i |0\rangle) = \sum_j \mathcal{T}_{ji} (a_j |0\rangle). \quad (7.5.164)$$

В более общей форме, если $\mathcal{T}\psi = \psi'$, то $\mathcal{L}_{\mathcal{T}}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$.

Отметим снова, что соответствие

$$\mathcal{T} \rightarrow \mathcal{L}_{\mathcal{T}} \quad (7.5.165)$$

линейно и сохраняет коммутирование:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\alpha\mathcal{T} + \beta\mathcal{T}'} &= \alpha\mathcal{L}_{\mathcal{T}} + \beta\mathcal{L}_{\mathcal{T}'}, \\ [\mathcal{L}_{\mathcal{T}}, \mathcal{L}_{\mathcal{T}'}] &= \mathcal{L}_{[\mathcal{T}, \mathcal{T}']}. \end{aligned} \quad (7.5.166) \quad \blacksquare$$

Применим теперь предыдущие результаты к тензорному произведению пространств с базисом

$$|(l^n)(m)\rangle \equiv |lm_1\rangle \otimes |lm_2\rangle \otimes \cdots \otimes |lm_n\rangle, \quad (7.5.167)$$

где $(m) = (m_1, m_2, \dots, m_n)$ и каждое $m_\alpha = l, l-1, \dots, -l$. (В обозначении для базисных векторов главное квантовое число было опущено.) Отображение (7.5.161) этого базисного вектора в бозонный базисный вектор задается формулой

$$|(l^n)(m)\rangle \rightarrow a_{l-m_1+1}^1 a_{l-m_2+1}^2 \cdots a_{l-m_n+1}^n |0\rangle. \quad (7.5.168)$$

Бозонный оператор, соответствующий оператору $\mathcal{T}$, определенному формулой

$$\mathcal{T} |(l^n)(m)\rangle = \sum_{(m')} \langle (l^n)(m') | \mathcal{T} | (l^n)(m) \rangle | (l^n)(m') \rangle \quad (7.5.169)$$

имеет вид

$$\mathcal{L}_{\mathcal{T}} = \sum_{(m)(m')} \langle (l^n)(m') | \mathcal{T} | (l^n)(m) \rangle \prod_{\alpha=1}^n a_{l-m_\alpha+1}^\alpha \bar{a}_{l-m_\alpha+1}^\alpha. \quad (7.5.170)$$

Изложим кратко частные случаи соотношений (7.5.169) и (7.5.170), соответствующие операторам одной и двух частиц.

Оператор одной частицы

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_1 &= T \otimes 1 \otimes \cdots \otimes 1 + 1 \otimes T \otimes \cdots \otimes 1 + \cdots \\ &\quad + 1 \otimes 1 \otimes \cdots \otimes 1 \otimes T, \quad n \text{ слагаемых,} \\ T |lm\rangle &= \sum \langle lm' | T | lm \rangle |lm'\rangle, \\ \langle (l^n)(m') | \mathcal{T}_1 | (l^n)(m) \rangle &= \sum_{x=1}^{m'_n} \left(\prod_{\beta \neq x} \delta_{m'_\beta m_\beta} \right) \langle lm'_x | T | lm_x \rangle, \\ \mathcal{L}_{\mathcal{T}_1} &= \sum_{mm'} \langle lm' | T | lm \rangle E_{l-m'+1, l-m+1}. \end{aligned} \quad (7.5.171)$$

Здесь $E_{kk'}$ определяется формулой (7.5.159); мы использовали тот факт, что $\sum_k a_k^\alpha \bar{a}_k^\alpha$ имеет на векторе бозонного состояния (7.5.168) собственное значение 1 для каждого $\alpha = 1, \dots, n$.

Оператор двух частиц

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_2 &= T_1 \otimes T_2 \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1 + T_1 \otimes 1 \otimes T_2 \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1 + \dots \\ &\quad + 1 \otimes \dots \otimes 1 \otimes T_1 \otimes T_2, \quad \left(\begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} \right) \text{ слагаемых,} \\ T_s |lm\rangle &= \sum_{m'} \langle lm' | T_s | lm \rangle |lm'\rangle, \quad s = 1, 2, \\ \langle (l^n)(m') | \mathcal{T}_2 | (l^n)(m) \rangle &= \sum_{\beta > \alpha = 1}^n \left(\prod_{\gamma \neq \alpha, \beta} \delta_{m_\gamma m_\gamma} \right) \langle lm'_\alpha | T_1 | lm_\alpha \rangle \langle lm'_\beta | T_2 | lm_\beta \rangle, \\ \mathcal{L}_{\mathcal{T}_2} &= \sum_{\beta > \alpha = 1}^n \sum_{mm'm''m'''} \langle lm''' | T_1 | lm'' \rangle \langle lm' | T_2 | lm \rangle \\ &\quad \times E_{l-m'''+1, l-m''+1}^{\alpha\alpha} E_{l-m'+1, l-m+1}^{\beta\beta}, \end{aligned} \quad (7.5.172)$$

где

$$E_{kk'}^{\alpha\alpha} = a_k^\alpha \bar{a}_k^\alpha.$$

(Эти результаты имеют очевидное распространение на оператор k частиц.)

Приведем несколько представляющих интерес операторов одной частицы.

1. Выберем в качестве T оператор кет-бра $T = |lm'\rangle\langle lm|$. Тогда оператор одной частицы $\mathcal{T}_1$ имеет бозонное операторное отображение

$$\mathcal{L}_{\mathcal{T}_1} = E_{l-m'+1, l-m+1}. \quad (7.5.173)$$

2. Выберем в качестве T оператор Вигнера $\langle a_\lambda^0 - a \rangle$, определенный формулой

$$\left\langle \begin{matrix} 0 \\ a \\ \lambda \end{matrix} - a \right\rangle |lm\rangle = C_{m, \lambda, m+\lambda}^{l a l} |l, m+\lambda\rangle. \quad (7.5.174)$$

Тогда оператор одной частицы $\mathcal{T}_1$ имеет бозонное операторное отображение

$$\mathcal{L}_{\mathcal{T}_1} = \sum_m C_{m, \lambda, m+\lambda}^{l a l} E_{l-m-\lambda+1, l-m+1}. \quad (7.5.175)$$

Последние операторы важны для понимания роли углового момента для l^n -конфигурации; мы рассмотрим их свойства прежде, чем дать пример оператора двух частиц.

Оператор, заданный формулой (7.5.175), определяется для всех $a = 0, 1, 2, \dots$, $2l$ и $\lambda = a, a-1, \dots, -a$. Удобно дать несколько другое определение этих операторов

$$V_\lambda^a \equiv \sqrt{(2a+1)/(2l+1)} \sum_{mm'} C_{m\lambda m'}^{l a l} E_{l-m'+1, l-m+1}. \quad (7.5.176)$$

Коэффициенты

$$W_{a\lambda, mm'} = \sqrt{(2a+1)/(2l+1)} C_{m\lambda m'}^{l a l} \quad (7.5.177)$$

в этом определении являются элементами $(2l+1)^2$ -мерной вещественной ортогональной матрицы, в которой строки нумеруются парой $(a\lambda)$ ($\lambda = a, a-1, \dots$),

$-a$; $a = 0, 1, \dots, 2l$), а столбцы — парой (mm') ($m = l, l-1, \dots, -l$; $m' = l, l-1, \dots, -l$).

Таким образом, обращение формулы (7.5.176) имеет вид

$$E_{l-m'+1, l-m+1} = \sum_{a\lambda} \sqrt{(2a+1)/(2l+1)} C_{m\lambda m'}^{l a l} V_{\lambda}^a. \quad (7.5.178)$$

Соотношения (7.5.176) и (7.5.178) показывают, что множества операторов

$$\{E_{jk}; j, k = 1, 2, \dots, 2l+1\} \quad (7.5.179)$$

и операторов

$$\{V_{\lambda}^a; \lambda = a, a-1, \dots, -a; a = 0, 1, \dots, 2l\} \quad (7.5.180)$$

являются просто различными базисами алгебры Ли группы $U(2l+1)$.

Физическое значение базиса (7.5.180) следует из проверки следующих соотношений:

$$V_{+1}^1 = -[3/(2l)(l+1)(2l+1)]^{\frac{1}{2}} \mathcal{L}_+,$$

$$V_0^1 = [3/(l+1)(2l+1)]^{\frac{1}{2}} \mathcal{L}_3,$$

$$V_{-1}^1 = [3/(2l)(l+1)(2l+1)]^{\frac{1}{2}} \mathcal{L}_-; \quad (7.5.181)$$

$$[\mathcal{L}_{\pm}, V_{\lambda}^a] = [(a \mp \lambda)(a \pm \lambda + 1)]^{\frac{1}{2}} V_{\lambda \pm 1}^a,$$

$$[\mathcal{L}_3, V_{\lambda}^a] = \lambda V_{\lambda}^a. \quad (7.5.182)$$

Таким образом, базис $\{V_{\lambda}^a\}$ алгебры Ли группы $U(2l+1)$ соответствует полной классификации генераторов группы $U(2l+1)$ как неприводимых тензорных операторов по отношению к подгруппе вращений, порожденной полным орбитальным угловым моментом.

Базис $\{V_{\lambda}^a\}$ алгебры Ли группы $U(2l+1)$ был явно введен Рака¹⁾ [15, 16], для того чтобы сделать более наглядными свойства полного углового момента унитарной группы $U(2l+1)$ и ее подгрупп.

Используя коммутационные соотношения для базиса Вейля $\{E_{jk}\}$, а именно

$$[E_{jk}, E_{j'k'}] = \delta_{kj'} E_{jk'} - \delta_{jk'} E_{j'k}, \quad (7.5.183)$$

находим коммутационные соотношения для базиса Рака $\{V_{\mu}^k\}$

$$[V_{\lambda}^a, V_{\mu}^b] = \sum_{c\nu} A_{\lambda\mu\nu}^{abc} V_{\nu}^c, \quad (7.5.184)$$

где структурные константы $A_{\lambda\mu\nu}^{abc}$ определяются формулой

$$A_{\lambda\mu\nu}^{abc} \equiv [(-1)^{a+b-c} - 1] C_{\lambda\mu\nu}^{abc} [(2a+1)(2b+1)]^{\frac{1}{2}} W(abll; cl). \quad (7.5.185)$$

(Вывод структурных констант в этой форме использует соотношение (7.5.178), а также соотношение (3.267) гл. 3 и симметрии коэффициентов Вигнера.)

Полученные выше результаты полностью решают задачу вложения физической орбитальной группы вращений $SO(3)$ в унитарную группу $U(2l+1)$:

$$U(2l+1) \supset SO(3). \quad (7.5.186)$$

¹⁾ Тензорный оператор Рака $U^{(a)}$ связан с V^a формулой $U^{(a)} = V^a / \sqrt{2a+1}$.

Однако, так как неприводимые представления группы $SO(3)$ в общем случае в редукции неприводимого представления группы $U(2l+1)$ в прямую сумму неприводимых представлений группы $SO(3)$ встречаются с повторениями, задача построения состояний точного орбитального углового момента еще не решена. Дополнительные индексы для определения подпространств в $\mathcal{B}^A(l^n)$, которые неприводимы при действии $\mathcal{L}$ и имеют один и тот же индекс L углового момента, можно ввести тогда, когда мы можем найти такую группу G , что

$$U(2l+1) \supset G \supset SO(3). \quad (7.5.187)$$

Тогда пространства неприводимых представлений группы G будут инвариантны при действии $\mathcal{L}$, а индексы неприводимых представлений группы G будут давать дополнительные квантовые числа.

Одно из преимуществ использования базиса Рака $\{+V^a : a = 0, 1, \dots, 2l\}$ алгебры Ли группы $U(2l+1)$ состоит в том, что можно сразу выделить базис алгебры Ли собственной ортогональной группы $SO(2l+1)$. Как видно из соотношений (7.5.184) и (7.5.185), множество операторов

$$\{V^a : a = 1, 3, \dots, 2l-1\} \quad (7.5.188)$$

образует замкнутую подалгебру, которая содержит $\mathcal{L}$. Более того, каждый базисный элемент множества (7.5.188), как может быть прямо показано из (7.5.176), коммутирует с положительно определенной квадратичной формой

$$\sum_m (-1)^m a_{l+m+1}^2 a_{l-m+1}^2 \quad (7.5.189)$$

для каждого $\alpha = 1, 2, \dots, n$. Этот результат показывает, что базис (7.5.188) является множеством генераторов ортогональной группы преобразований $SO(2l+1)$, которая оставляет квадратичную форму (7.5.189) инвариантной.

Редукция неприводимого представления

$$[2^{(n,2)} - S \quad 1^{2S} \quad 0^{2l+1-(n,2)-S}] \quad (7.5.190)$$

группы $U(2l+1)$ на неприводимые представления подгруппы $SO(2l+1)$ дает только один дополнительный индекс — квантовое число синьорити ν [15, 16]. Рассмотрим теперь теоретико-групповой источник этого результата¹⁾.

Неприводимые представления группы $SO(2l+1)$ обозначаются разбиениями вида

$$[j_1 j_2 \dots j_l], \quad (7.5.191)$$

где $j_1, j_2, \dots, j_l$ — целые числа, удовлетворяющие условию

$$j_1 \geq j_2 \geq \dots \geq j_l \geq 0. \quad (7.5.192)$$

Единственные неприводимые представления группы $SO(2l+1)$, которые встречаются в неприводимом представлении (7.5.190) группы $U(2l+1)$, имеют вид [32, 47]

$$[2^p 1^q 0^{l-p-q}], \quad (7.5.193)$$

¹⁾Рака ввел квантовое число синьорити, используя понятие «оператора обмена», но отметил связь с неприводимыми представлениями группы $SO(2l+1)$. Этот подход обсуждается в разд. 9 по ядерной физике.

где

$$\begin{aligned} p &= v/2 - S, \\ q &= \min(2S - 2l + 1 - v). \end{aligned} \quad (7.5.194)$$

В этом результате v — целое число, которое может принимать значения

$$v = 2S, 2S + 2, \dots, n. \quad (7.5.195)$$

Таким образом, дополнительный индекс v нумерует все неприводимые представления группы $SO(2l + 1)$, которые встречаются в частном неприводимом представлении (7.5.190) группы $U(2l + 1)$, поскольку, как мы сейчас покажем, кратности отсутствуют.

В редукции неприводимого представления группы $U(2l + 1)$ типа $[2^a 1^b 0^{2l+1-a-b}]$ на неприводимые представления подгруппы $SO(2l + 1)$ кратности отсутствуют. Доказательство этого результата может быть дано следующим образом. Размерность неприводимого представления $[2^p 1^q 0^{2l-p-q}]$ группы $SO(2l + 1)$ равна

$$d_{2l+1}(p, q) = \frac{(q+1)(2l-2p-q+2)}{(2l+2)(2l+3)} \binom{2l+3}{p} \binom{2l+3}{p+q+1}. \quad (7.5.196)$$

Просуммировав эту формулу по всем парам (p, q) , заданным формулой

$$(p, q) = (p, \min(b, 2l + 1 - b - 2p)), \quad p = 0, 1, \dots, a,$$

получим размерность неприводимого представления $[2^a 1^b 0^{2l+1-a-b}]$ группы $U(2l + 1)$ (см. формулу (7.5.137))

$$\sum_{(p,q)} d_{2l+1}(p, q) = \frac{b+1}{a+b+1} \binom{2l+2}{a} \binom{2l+1}{a+b}. \quad \blacksquare \quad (7.5.197)$$

Явное разложение неприводимых представлений группы $U(2l + 1)$ на неприводимые представления подгруппы $SO(2l + 1)$ для $l = 1, 2, \dots, 6$ можно найти в книге [47].

Другой метод [15] введения квантового числа v состоит в диагонализации квадратичного оператора Казимира¹⁾ группы $SO(2l + 1)$:

$$C^2 \equiv 2 \sum_{a \text{ odd}} \sum_{\lambda} (-1)^k V_{\lambda}^a V_{-\lambda}^a. \quad (7.5.198)$$

Собственное значение оператора C^2 на пространстве общего неприводимого представления группы $SO(2l + 1)$, заданного числами $[j_1 j_2 \dots j_l]$, имеет вид

$$j_1(j_1 + 2l - 1) + j_2(j_2 + 2l - 3) + \dots + j_l(j_l + 1).$$

Используя частные неприводимые представления вида (7.5.193), находим, таким образом, что диагонализация оператора C^2 на пространстве неприводимого представления (7.5.190) группы $U(2l + 1)$ порождает собственные значения λ_v :

$$\lambda_v \equiv v \left(2l + 2 - \frac{v}{2} \right) - 2S(S + 1). \quad (7.5.199)$$

соответствующие значениям (7.5.195) нелиниины v .

¹⁾ Существует / взаимно коммутирующих независимых полиномиальных форм от генераторов группы $SO(2l + 1)$ степеней $2, 4, \dots, 2l$, которые коммутируют со всеми элементами алгебры. При применении к пространствам частных неприводимых представлений (7.5.193) это множество / операторов становится зависимым от квадратичного оператора Казимира и от оператора Казимира четвертой степени.

Применим теперь результаты редукции с группы на подгруппу $U(2l+1) \supset SO(2l+1)$ к пространству $\mathcal{B}^A(l^n)$ (в котором базис задан формулой (7.5.126)). Так как спиновая часть базиса уже определена, мы ограничим наше внимание подпространством $\mathcal{B}^A(l^n, S)$ с базисом

$$\left\{ |T_{U_{2l+1}} T_{U_2}\rangle : T - \text{стандартная диаграмма Вейля формы} [2^{(n/2)} - S 1^{2S}] \text{ при заданных } l, S, M_S \right\}. \quad (7.5.200)$$

Таким образом, мы имеем дело только с редукцией пространства неприводимого представления группы $U(2l+1)$ формы $[2^{(n/2)} - S 1^{2S}]$ на пространств неприводимых представлений подгруппы $SO(2l+1)$, как упоминалось выше.

Приведенный анализ показывает, что пространство $\mathcal{B}^A(l^n, S)$ можно однозначно разложить на пространства $\mathcal{B}^A(l^n, S, v)$ неприводимых представлений подгруппы $SO(2l+1)$ типа (7.5.193), которые обозначаются квантовым числом синьорити v :

$$\mathcal{B}^A(l^n, S) = \sum_r \oplus \mathcal{B}^A(l^n, S, r). \quad (7.5.201)$$

Суммирование в этой прямой сумме ведется по $v = 2S, 2S+2, \dots, n$. Каждое подпространство $\mathcal{B}^A(l^n, S, v)$ инвариантно относительно действия оператора полного углового момента L и неприводимо относительно действия множества генераторов $\{V^a : a = 1, 3, \dots, 2l-1\}$ подгруппы $SO(2l+1)$. Разложение неприводимых представлений группы $U(2l+1)$ на неприводимые представления подгруппы $SO(2l+1)$, соответствующие (7.5.201), для $l=1$ и $l=2$ дано в табл. 7.1.

Таблица 7.1

Разложение неприводимых представлений $[2^{n/2} - S 1^{2S} 0^{2l+1-n/2-S}]$ группы $U(2l+1)$ на неприводимые представления подгруппы $SO(2l+1)$, обозначенные квантовым числом синьорити для $l=1$ и $l=2$

l^n	$SU(2l+1)$	$SO(2l+1)$	(S, v)
p^1	[100] =	[1]	$(\frac{1}{2}, 1)$
p^2	[110] =	[1]	$(1, 2)$
	[200] =	$[0] \oplus [2]$	$(0, 0) + (0, 2)$
p^3	[111] =	[1]	$(\frac{3}{2}, 3)$
d^1	[10000] =	[1]	$(\frac{1}{2}, 1)$
d^2	[11000] =	[11]	$(1, 2)$
	[20000] =	$[00] \oplus [20]$	$(0, 0) + (0, 2)$
d^3	[11100] =	[11]	$(\frac{3}{2}, 3)$
	[21000] =	$[10] \oplus [21]$	$(\frac{1}{2}, 1) + (\frac{1}{2}, 3)$
d^4	[11110] =	[10]	$(2, 4)$
	[21100] =	$[11] \oplus [21]$	$(1, 2) + (1, 4)$
	[22000] =	$[00] \oplus [20] \oplus [22]$	$(0, 0) + (0, 2) + (0, 4)$
d^5	[11111] =	[00]	$(\frac{5}{2}, 5)$
	[21110] =	$[11] \oplus [20]$	$(\frac{3}{2}, 3) + (\frac{3}{2}, 5)$
	[22100] =	$[10] \oplus [21] \oplus [22]$	$(\frac{1}{2}, 1) + (\frac{1}{2}, 3) + (\frac{1}{2}, 5)$

Объединим теперь результаты для d^n -конфигураций, заданные в табл. 7.1, с разложением неприводимых представлений группы $SO(5)$ на неприводимые представления $[L]$ подгруппы $SO(3)$:

$$\begin{aligned} [00] &= [0] \\ [10] &= [2] \\ [11] &= [1] \oplus [3] \\ [20] &= [2] \oplus [4] \\ [21] &= [1] \oplus [2] \oplus [3] \oplus [4] \oplus [5] \\ [22] &= [0] \oplus [2] \oplus [3] \oplus [4] \oplus [6]. \end{aligned} \quad (7.5.202)$$

В этих редукциях $[L]$ встречается без повторений, и, следовательно, при действии $\mathcal{L}$ каждое пространство $\mathcal{B}^A(l^n, S, v)$ однозначно разлагается на пространства неприводимых представлений $\mathcal{B}^A(l^n, v, L, S)$:

$$\mathcal{B}^A(l^n, v, S) = \sum_L \oplus \mathcal{B}^A(l^n, v, L, S). \quad (7.5.203)$$

Таким образом, квантовое число синьорити v дает дополнительный индекс, требуемый для полной классификации всех состояний точного углового момента в d^n -конфигурациях (v важно, но для p^n -конфигураций оно излишне).

Полная теоретико-групповая классификация описанных выше состояний для p^n - и d^n -конфигураций обычно не решает задачи построения состояний точного углового момента для физических систем. Причина состоит в том, что обычно оператор Казимира C^2 (формула (7.5.198)) не коммутирует с эффективным оператором возмущения (физическим возмущением, ограниченным пространством $\mathcal{B}^A(l^n)$), что требуется для аппроксимации физических уровней энергии. Например, оператор электростатического отталкивания $\mathcal{E}_R$ (см. (7.5.217)) с необходимостью коммутирует с $\mathcal{L}$ и $\mathcal{L}_3$, но не коммутирует с C^2 . Но этот результат не аннулирует все результаты, полученные с помощью теоретико-группового анализа. Это может быть выяснено с помощью примера, к которому мы теперь переходим.

Рассмотрим пространство $\mathcal{B}^A(d^5, \frac{1}{2})$, соответствующее индексам $[22100]$ неприводимого представления группы $U(5)$. Это пространство содержит три ортонормированных вектора, имеющих $L = M_L = 2$ (векторы старшего веса) и $v = 1, 3, 5$ (см. табл. 7.1 и формулу (7.5.202)). Введем для этих векторов обозначение $|v, L\rangle$:

$$|1, 2\rangle, |3, 2\rangle, |5, 2\rangle. \quad (7.5.204)$$

Так как оператор электростатического отталкивания $\mathcal{E}_R$ коммутирует с полным угловым моментом $\mathcal{L}$, трехмерное пространство, натянутое на векторы (7.5.204), инвариантно относительно действия $\mathcal{E}_R$. Таким образом, чтобы вычислить поправки первого порядка к энергии нулевого порядка состояния, имеющего $n = 5$, $l = 2$ и $S = \frac{1}{2}$, необходимо лишь диагонализировать 3×3 -матрицу.

Этот пример показывает и другое. С точки зрения диагонализации оператора возмущения, который коммутирует с $\mathcal{L}$, любая схема, классифицирующая векторы, принадлежащие к пространству векторов старшего веса для заданного L , так же хороша, как и теоретико-групповая схема.

Полезно отметить, что с точки зрения старших весов группы $SO(3)$ теоретико-групповая классификация $U(2l+1) \supset SO(2l+1)$ соответствует определению множества векторов $|\gamma\rangle v, L \rangle \in \mathcal{B}^A(l^n, S)$, таких, что

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_+ |\gamma\rangle v, L \rangle &= 0, & \mathcal{L}_3 |\gamma\rangle v, L \rangle &= L |\gamma\rangle v, L \rangle, \\ C^2 |\gamma\rangle v, L \rangle &= \lambda_v |\gamma\rangle v, L \rangle, \end{aligned} \quad (7.5.205)$$

где собственное значение λ_v дается формулой (7.5.199). Таким образом, для d^n -конфигураций все решения соотношений (7.5.205) индексируются собственными значениями самих операторов, т.е. с помощью v и L . Для $l \geq 3$ требуются дополнительные индексы (γ), чтобы перенумеровать решения соотношений (7.5.205); теперь мы рассмотрим этот вопрос.

Как отмечено выше, группы $SO(2l+1)$ не достаточно для классификации всех состояний углового момента для l^n -конфигураций при $l \geq 3$. Неприводимые представления группы $SO(2l+1)$ типа (7.5.193) разлагаются в сумму более чем одного неприводимого представления подгруппы $SO(3)$ (см. [18, 47]). В теоретико-групповом подходе эту задачу пытаются решить путем поиска другой подгруппы G , на этот раз в цепочке подгрупп

$$U(2l+1) \supset SO(2l+1) \supset G \supset SO(3). \quad (7.5.206)$$

Замечательно, что для l^n -конфигураций ($l = 3$) такая подгруппа G существует; на это впервые указал Рака [15]. Именно базис Рака алгебры Ли группы $U(2l+1)$ делает этот факт явным, если его сопоставить с тем наблюдением, что коэффициент Рака $W(5533; 33)$ обращается в нуль¹⁾:

$$W(5533; 33) = 0. \quad (7.5.207)$$

Таким образом, положив в (7.5.184) $l = 3$, находим, что множество тензорных операторов ранга 1 и 5 (всего четырнадцать операторов) образует замкнутую подалгебру алгебры Ли группы $SO(7)$. Рака определил, что эта алгебра является алгеброй Ли исключительной группы Ли G_2 . Таким образом, базис алгебры Ли группы G_2 есть

$$\{V_{\lambda}^1, V_{\mu}^5: \lambda = +1, 0, -1; \mu = +5, +4, \dots, -5\}. \quad (7.5.208)$$

Неприводимые представления группы G_2 характеризуются парой целых чисел $u = (u_1, u_2)$, $u_1 \geq u_2 \geq 0$, и квадратичный оператор Казимира для G_2 имеет вид

$$G^2 \equiv \frac{1}{4} \sum_{a=1,5} \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda} V_{\lambda}^a V_{-\lambda}^a. \quad (7.5.209)$$

¹⁾ Этот коэффициент Рака обращается в нуль, несмотря на то что выполняются условия треугольника и все симметрии. Никакого общего объяснения этого факта не существует, хотя здесь такое обращение в нуль может быть следствием существования вложения $SO(7) \supset G_2 \supset SO(3)$. Такие нули более детально обсуждаются в работе [75]. Выраженные в терминах порождающей функции для $6j$ -коэффициентов (см. приложение Г гл. 5) эти обращения в нуль означают, что определенные одночлены от бозонов отсутствуют в разложении, хотя можно было бы ожидать их присутствия. То же явление имеет место для $3j$ -коэффициентов [75].

(Напомним, что в этом результате $l = 3$.) Собственное значение λ_u оператора G^2 на пространстве неприводимого представления, задаваемого индексами $u = (u_1, u_2)$, определяется выражением

$$\lambda_u = (u_1^2 + u_2^2 + u_1 + u_2 + 5u_1 + 4u_2)/12. \quad (7.5.210)$$

(См. [15, 16, 18].)

Теперь мы можем перейти, используя неприводимые представления, которые возникают для цепочки групп

$$U(7) \supset SO(7) \supset G_2 \supset SO(3), \quad (7.5.211)$$

к разложению пространства $\mathcal{B}^A(l^n, S, v)$ на пространства неприводимых представлений группы G_2 . Метод вполне аналогичен методу, проиллюстрированному выше для d^n -конфигураций. Единственными неприводимыми представлениями группы G_2 , которые возникают в редукции по группам цепочки (7.5.211) для l^n -конфигурации, являются (00), (10), (11), (20), (21), (22), (30), (31) и (40) (см. [47]).

Пространство векторов старшего веса для группы $SO(3)$ натягивается на множество векторов $|(\gamma) u, v, L \rangle \in \mathcal{B}^A(l^3, S)$, которые удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_+ |(\gamma) u, v, L \rangle &= 0, & \mathcal{L}_3 |(\gamma) u, v, L \rangle &= L |(\gamma) u, v, L \rangle, \\ \mathcal{C}^2 |(\gamma) u, v, L \rangle &= \lambda_u |(\gamma) u, v, L \rangle, & G^2 |(\gamma) u, v, L \rangle &= \lambda_u |(\gamma) u, v, L \rangle. \end{aligned} \quad (7.5.212)$$

Но индексы u, v и L теперь не нумеруют всех решений соотношений (7.5.212) (угловые моменты $L = 3, 5, 6, 7$ имеют кратность 2 в редукции неприводимого представления (31) группы G_2 , а угловые моменты $L = 4, 6, 8$ имеют кратность 2 в редукции неприводимого представления (40)). Таким образом, цепочка групп (7.5.211) не порождает полной классификации состояний углового момента. Однако этот недостаток не очень серьезный, так как имеются только состояния с кратностью 2.

Явное построение базисов, обладающих рассмотренными выше свойствами редукции с группы на подгруппу, является сложной задачей; она будет рассмотрена ниже лишь в общем виде в замечаниях.

Предыдущие примеры хорошо иллюстрируют, как техника углового момента прямо приводит к классификации тензорных операторов, в качестве которых выступают генераторы группы Ли, которая содержит подгруппу углового момента, и как такие группы используются в физических задачах. Однако мы подчеркнули, что даже полная классификация всех состояний углового момента в l^n -конфигурациях в общем случае не соответствует построению состояний, которые диагонализуют, например, оператор эффективного электростатического отталкивания. Чтобы сделать этот результат более ясным, рассмотрим, как взаимодействие электростатического отталкивания (7.5.60) отображается в бозонный оператор $\mathcal{C}_R$, действующий в пространстве $\mathcal{B}^A(l^n)$.

Перепишем соотношение (7.5.60) в виде

$$H_1 = \sum_{\beta > \alpha = 1}^n \sum_{a=0}^{\alpha} r_a(r_{\alpha}, r_{\beta}) \frac{4\pi}{2a+1} \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda} Y_{a\lambda}(\hat{x}_{\alpha}) Y_{a,-\lambda}(\hat{x}_{\beta}). \quad (7.5.213)$$

Мы можем интерпретировать H_1 как сумму операторов двух частиц и применить формулы (7.5.172) или же можем прямо обратиться к формулам (7.5.169) и (7.5.170). Мы следуем последнему пути, начиная с соотношения¹⁾

$$\begin{aligned} \langle (l^n)(m') | H_1 | (l^n)(m) \rangle = & \sum_{\beta > \alpha = 1}^n \left(\prod_{\gamma \neq \alpha, \beta} \delta_{m_\gamma} \right) \sum_{a=0}^{2l} F^a(n'l; n'l) (C_{000}^{lal})^2 \\ & \times \sum_{\lambda} (-1)^\lambda C_{m_\lambda, \lambda, m_\lambda}^{lal} C_{m_\beta, -\lambda, m_\beta}^{lal} \end{aligned} \quad (7.5.214)$$

(При получении этого результата использован интеграл Гаунта (3.192) гл. 3 от трех сферических функций.) Подставляя этот результат в (7.5.170), находим

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_R = & \sum_{a=0}^{2l} F^a(n'l; n'l) (C_{000}^{lal})^2 \sum_{\beta > \alpha = 1}^n \sum_{\lambda} (-1)^\lambda \left(\sum_{v\lambda v'} C_{v\lambda v'}^{lal} E_{l-v, v'+1, l-v+1}^{xx} \right) \\ & \times \left(\sum_{mm'} C_{m, -\lambda, m'}^{lal} E_{l-m', 1, l-m+1}^{\beta\beta} \right). \end{aligned} \quad (7.5.215)$$

(См. замечание после формулы (7.5.171).) Выражение (7.5.215) может быть дальше упрощено путем использования симметрии слагаемых в сумме относительно перестановки α и β , определения V_{λ}^a , данного в (7.5.176), и операторного тождества (на состояниях (7.5.168):

$$E_{jk}^{2a} E_{jk}^{2a} = \delta_{kj} E_{jk}^{2a}. \quad (7.5.216)$$

Выполняя этот шаг, получаем следующий вид оператора электростатического отталкивания $\mathcal{E}_R$:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_R = & \frac{1}{2} \sum_a F^a(n'l; n'l) \frac{2l+1}{2a+1} (C_{000}^{lal})^2 \\ & \times \left[\sum_{\lambda} (-1)^\lambda V_{\lambda}^a V_{-\lambda}^a - \frac{2a+1}{2l+1} \sum_k E_{kk} \right]. \end{aligned} \quad (7.5.217)$$

Оператор $\mathcal{E}_R$ является ограничением энергии электростатического отталкивания на пространство $\mathcal{B}^A(l^n)$. Именно этот оператор $\mathcal{E}_R$ должен быть диагонализирован, чтобы получить энергетические поправки, обусловленные электростатическим отталкиванием. Отметим, что $\mathcal{E}_R$ записан в такой форме, которая делает очевидной его инвариантность относительно группы $SO(3)$, порожденной $\mathcal{L}(\sum_k E_{kk}$ — оператор числа частиц, который может быть заменен на l). Так как

по построению оператор $\mathcal{E}_R$ имеет полиномиальную форму относительно генераторов $\{E_{jk}\}$ группы $U(2l+1)$, то он также коммутирует с каждым из $(2l+1)$ взаимно коммутирующих эрмитовых операторов $\mathcal{L}_k^{(2l+1)}$ ($k = 1, 2, \dots, (2l+1)$), одновременные собственные векторы которых определяют простран-

¹⁾ Чтобы избежать смешивания числа эквивалентных электронов n с главным квантовым числом, мы обозначаем ниже последнее через n' .

ство общего неприводимого представления $[m_{1, 2l+1}, m_{2, 2l+1}, \dots, m_{2l+1, 2l+1}]$ группы $U(2l+1)$ (см. формулу (А. 61), приложение А гл. 5). (При действии на частные состояния типа (7.5.168) только два из этих операторов независимы.) В частном случае $l = 3$ оператор $\mathcal{E}_R$ не коммутирует ни с оператором Казимира группы $SO(2l+1)$, ни с оператором Казимира группы G_2 .

Отметим снова, что задача диагонализации оператора $\mathcal{E}_R$ на пространстве $\mathcal{B}^A(l^n)$ может решаться различными путями. В «худшем» подходе можно просто диагонализировать матрицу размерности $\binom{4l+2}{n}$, представляющую $\mathcal{E}_R$ в некотором базисе пространства $\mathcal{B}^A(l^n)$. В «наилучшем» подходе ищем принципы, посредством которых может быть найдено пространство векторов старшего веса с каждым заданным L . Описанный выше подход сужения с группы на подгруппу является лишь одним таким подходом к «задаче о кратности для старших весов».

Как отмечено выше, в литературе имеется множество других подходов к «задаче о кратности». Мы приводим работы, представляющие особый интерес [47 — 556], хотя не все обсуждаемые в них подходы развивались для применений в атомной спектроскопии. (Обзор некоторых из этих подходов дан в работе [56].)

Замечания. а) Мы заключаем наше обсуждение атомной спектроскопии, хотя, очевидно, опущено много важных тем (генеалогические коэффициенты, jj -и другие схемы связи и т.д.). Метод углового момента важен также и для этих тем, и мы отсылаем читателя к учебной литературе по этим вопросам [9, 18 — 20, 47, 57 — 59]. б) Мы не рассмотрели, как различные подходы используются для вычисления уровней энергии и сравнения с действительными спектрами. Последнее является задачей громадных размеров, зависящей от концептуальных структур, а также от деталей вычислительных методов. Более того, были предложены новые методы вычисления (основанные на унитарной группе) [44, 45, 60 — 66]. Более детальное обсуждение этих вопросов, чем приведенное в этом разделе, завело бы нас слишком далеко в область современных исследований по атомной спектроскопии, тогда как целью настоящей книги является описание техники углового момента.

к. Приложение: явные спинорные состояния. В этом приложении мы даем построение состояний точного полного спина (SM_ϕ) , которые возникают при связывании n угловых моментов спина $\frac{1}{2}$. По этому вопросу имеется обширная литература, использующая разнообразные методы. Наиболее популярным, вероятно, является метод оператора проектирования [67]. Мы основываем наш метод на понятии оператора Вигнера, введенного в разд. 21 гл. 3. Структурная простота основного результата (П. 23) (см. ниже) является прекрасным примером возможностей методов углового момента, когда они комбинируются с результатами теории групп симметрии. Другие подходы изложены в литературе ([33, 34, 38, 43, 67 — 70], см. также цитируемую там литературу).

Напомним кратко определение действия перестановки $P \in S_n$ на тензорное произведение пространств $\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{j_n}$, соответствующее n кинематически независимым угловым моментам и имеющее базис

$$\{|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \otimes \dots \otimes |j_n m_n\rangle : \text{каждое } m_i = j_i, j_i - 1, \dots, -j_i\}. \quad (\text{П.1})$$

Для P , заданного формулой

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n \end{pmatrix}, \quad (\text{П.2})$$

имеем¹⁾

$$P: |j_1 m_1\rangle \otimes \cdots \otimes |j_n m_n\rangle \rightarrow |j_{i_1} m_{i_1}\rangle \otimes \cdots \otimes |j_{i_n} m_{i_n}\rangle. \quad (\text{П.3})$$

В общем случае действие перестановки должно отображать пространство $\mathcal{H}_{j_1 j_2 \dots j_n}$ в пространство $\mathcal{H}_{i_1 i_2 \dots i_n}$.

В дальнейшем мы ограничимся случаем равных угловых моментов $k = j_1 = j_2 = \dots = j_n$, так что каждое $P \in S_n$ отображает $(2k + 1)^n$ -мерное векторное пространство $\mathcal{Y}_k^{(n)} \equiv \mathcal{H}(kk \dots k)$, натянутое на базисные векторы

$$\{|k m_1\rangle \otimes \cdots \otimes |k m_n\rangle: \text{каждое } m_i = k, k - 1, \dots, -k\} \quad (\text{П.4})$$

на себя. В самом деле, матрица $D(P)$, построенная согласно действию (П.3) перестановки P на базис (П.4), является $(2k + 1)^n$ -мерной матрицей, столбцы (строки) которой являются перестановкой столбцов (строк) единичной матрицы размерности $(2k + 1)^n$. Более того, след матрицы $D(P)$ дается формулой

$$\text{tr } D(P) = \text{числу индексов частиц, инвариантных относительно } P. \quad (\text{П.5})$$

Представление $P \rightarrow D(P)$ группы S_n в общем случае приводимо.

Рассмотрим далее полный угловой момент $J = \sum_{\alpha} J_{\alpha}$, учитывая, что пространство $\mathcal{Y}_k^{(n)}$ также является пространством представления

$$U \rightarrow \underbrace{D^k(U) \otimes D^k(U) \otimes \cdots \otimes D^k(U)}_{n \text{ раз}} = D(U) \quad (\text{П.6})$$

группы $SU(2)$. Так как для каждого $P \in S_n$ $[P, J] = 0$, то P также коммутирует с оператором вращения $\mathcal{U} = \exp[-i\psi \hat{n} \cdot J]$. Поэтому для каждого $P \in S_n$ и каждого $U \in SU(2)$ матрицы $D(P)$ и $D(U)$ коммутируют.

Таким образом, пространство $\mathcal{Y}_k^{(n)}$ является пространством представления

$$D(P)D(U) = D(U)D(P) \quad (\text{П.7})$$

прямого произведения групп $SU(2) \times S_n$. Используя свойства неприводимых представлений группы S_n , введенные в приложении А гл. 5, мы можем заключить, что пространство $\mathcal{Y}_k^{(n)}$ обладает ортонормированным базисом, который может быть обозначен через

$$|(\alpha); [\lambda](y); jm\rangle, \quad (\text{П.8})$$

где $[\lambda]$ — разбиение числа n на n частей, (y) — символ Яманучи, jm — квантовые числа углового момента для $SU(2)$, а (α) обозначает некоторое неопределенное множество дополнительных индексов, требуемое для полного описания базиса в $\mathcal{Y}_k^{(n)}$. Базисные векторы (П.8) характеризуются их трансформационными свойствами относительно $\mathcal{U}$ (см. разд. 6 гл. 3) и P :

$$\mathcal{U}|(\alpha); [\lambda](y); jm\rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^j(U) |(\alpha)[\lambda](y); jm'\rangle$$

¹⁾ Книга Вейля [13] (см., в частности, гл. 5) является стандартной работой, в которой развиваются следствия принципа Паули для классификации термов в атомных спектрах при помощи общих методов теории симметрической группы (групповая алгебра, диаграммы Юнга, юнговские операторы симметрии).

$$P|(x); [\lambda](y); jm\rangle = \sum_{(y')} D_{(y')(y)}^{[\lambda]}(P)|(x); [\lambda](y'); jm\rangle, \quad (\text{П.9})$$

где

$$P \rightarrow D^{[\lambda]}(P) \quad (\text{П.10})$$

обозначает унитарное неприводимое представление группы S_n .

Ясно, что на множество базисных векторов

$$\left\{ |(\alpha); [\lambda](y); jm\rangle: \begin{array}{l} m = j, j-1, \dots, -j; \\ (y) \text{ пробегает символы Яманучи} \\ \text{стандартных диаграмм Юнга формы } [\lambda] \end{array} \right\} \quad (\text{П.11})$$

натягивается пространство неприводимого представления

$$D^j(U) \otimes D^{[\lambda]}(P) \quad (\text{П.12})$$

прямого произведения групп $SU(2) \times S_n$.

К сожалению, до сих пор не дано полностью в явном виде построение базисных векторов (П.8) для произвольных n и k в основном из-за нерешенных задач, связанных с дополнительными индексами (α) , которые требуются чтобы разделить базис пространства $\mathcal{V}_k^{(n)}$ и которые предполагают наличие кратности неприводимого представления (П.12) группы $SU(2) \times S_n$ в представлении (П.7). Однако для случая $k = \frac{1}{2}$ можно доказать, используя стандартные формулы для характеров [13], что представление [П.7] содержит неприводимые представления группы $SU(2) \times S_n$ без кратностей. На этот случай мы теперь и обратим наше внимание (см. также [32, 71]).

Для случая связывания n угловых моментов спина $\frac{1}{2}$ индексы (α) в обозначении (П.8) для базисных векторов не требуются. Более того, разрешенные разбиения $[\lambda]$ числа n на n частей теперь приводят к очень специфической форме, связанной с самим j (см. [13], стр. 370):

$$[\lambda] = \left[\frac{n}{2} + j, \frac{n}{2} - j, 0, \dots, 0 \right], \quad (\text{П.13})$$

которая соответствует схеме Юнга с двумя строками

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|} \hline & & \dots & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & & & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{l} \frac{n}{2} + j \text{ клеток,} \\ \frac{n}{2} - j \text{ клеток.} \end{array} \quad (\text{П.14})$$

Наконец, j может принимать следующие значения:

$$\left\{ \frac{n}{2}, \frac{n}{2} - 1, \dots, \frac{1}{2} \text{ или } 0 \right\}. \quad (\text{П.15})$$

причем каждое значение встречается точно один раз. Тот факт, что допустимы только эти значения j , может быть выведен элементарными средствами путем использования ряда Клебша — Гордана группы $SU(2)$, повторно примененного к n попарным связываниям $k = \frac{1}{2}$.

Таким образом, пространство $\mathcal{V}_{\frac{1}{2}}^{(n)}$ разбивается в прямую сумму

$$\mathcal{V}_{\frac{1}{2}}^{(n)} = \sum_j \oplus \mathcal{V} \left[\frac{n}{2} + j, \frac{n}{2} - j \right], \quad (\text{П.16})$$

где суммирование ведется по значениям j из множества (П.15). Здесь $\mathcal{U}[n/2 + j, n/2 - j]$ обозначает пространство неприводимого представления

$$D^j(U) \otimes D^{[j+1, 1-j]}(P) \quad (\text{П.17})$$

группы $SU(2) \times S_n$. Размерность неприводимого представления $[\lambda] = [n/2 + j, n/2 - j]$ группы S_n задается формулой

$$\dim \left[\begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} + j, \begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} - j \right] = \frac{2(2j+1)}{2j+2+n} \binom{n}{\begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} - j}. \quad (\text{П.18})$$

так что размерность пространства $\mathcal{U}[n/2 + j, n/2 - j]$ равна

$$\dim \mathcal{U} \left[\begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} + j, \begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} - j \right] = (2j+1) \dim \left[\begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} + j, \begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} - j \right]. \quad (\text{П.19})$$

Таким образом, из соотношения (П.16) следует тождество

$$\sum_j (2j+1) \dim \left[\begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} + j, \begin{matrix} n \\ 2 \end{matrix} - j \right] = 2^n. \quad (\text{П.20})$$

Можно ввести различные обозначения для ортонормированных базисных векторов пространства $\mathcal{U}[n/2 + j, n/2 - j]$, которые в различной степени отражают теоретико-групповую структуру базиса. Наиболее сжатое обозначение дается формулой (П.8), в которой не требуется дополнительный индекс (α), и мы можем также выбросить индекс $[\lambda]$, так как n в любом случае подразумевается и уже встречалось j . Хотя ниже мы будем использовать это обозначение (по типографским причинам), существует несколько других обозначений, которые более ясно показывают лежащую в основе групповую структуру. В самом деле, тот факт, что форма схемы связана с j формулой (П.14), имеет глубокое и важное начало, на которое мы теперь укажем.

Схема Юнга (П.14) играет двойную роль. В приложении А гл. 5 мы видели, что когда она стандартным образом заполнена числами $1, 2, \dots, n$, то мы получаем диаграммы Юнга, которые могут быть использованы для описания базисных векторов в пространстве неприводимого представления группы S_n . Мы также видели, что схема может быть заполнена единицами и двойками, что приводит к множеству стандартных диаграмм Вейля, которые могут быть использованы для нумерования базисных векторов пространства неприводимого представления группы $U(2)$.

Интересным моментом является то, что форма схемы Юнга одинакова как для неприводимых представлений группы S_n , так и для неприводимых представлений группы $SU(2)$, которые входят в прямое произведение (П.12).

Подходящее обозначение для базисных векторов, явно показывающее отмеченную выше структурную особенность, имеет вид

$$\left| \left(\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \dots & \square & \dots & \square \\ \hline \square & \square & \dots & \square & \dots & \square \\ \hline \end{array} \right) \right\rangle, \quad (\text{П.21})$$

где две схемы имеют одну и ту же форму $[n/2 + j, n/2 - j]$. Затем мы заполняем правую схему числами $1, 2, \dots, n$, чтобы получить стандартную диаграмму Юн-

га группы S_n ; подобным же образом левую схему заполняем единицами и двойками, чтобы получить стандартную диаграмму Вейля для группы $SU(2)$. Таким образом, описывается базис пространства $\mathcal{Y}(n/2 + j, n/2 - j)$.

Обозначение с помощью двойной схемы Гельфанда (приложение А гл. 5) для вектора состояния, соответствующего (П.21), имеет вид

$$\left| \left(\begin{array}{ccccccc} & & & & (m') & & \\ & & & & & & \\ \frac{n}{2} + j & \frac{n}{2} - j & & 0 & \dots & 0 & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & \frac{n}{2} + j & \frac{n}{2} - j & & 0 & \\ & & & & & & \\ & & & \frac{n}{2} + j & \frac{n}{2} - j & & \\ & & & & & & \\ & & & & \frac{n}{2} + m & & \end{array} \right) \right\rangle \quad (\text{П.22})$$

где (m') — схема веса $(1, 1, \dots, 1)$, т.е. величины в строке j должны складываться с j (и, конечно, должны удовлетворять условию промежуточности).

Обозначение (П.22) хотя и показывает явно структуру группы — подгруппа, является весьма избыточным. Мы привели его здесь, потому что оно прекрасно иллюстрирует способ получения частных результатов из наиболее общих результатов теории общей унитарной группы. Здесь соответствующая структура сужения на подгруппу имеет вид $SU(2) * S_n \subset U(n) * U(n)$.

Как указано выше, явные спинные состояния можно получить путем применения к частным случаям известных результатов из теории представлений общей унитарной группы (см. [72]). Однако использование здесь этого процесса сделало бы результат без необходимости недоступным. Так как сам конечный результат легко представить в терминах матричных элементов фундаментальных операторов Вигнера $\langle 1 \begin{smallmatrix} i \\ k \end{smallmatrix} 0 \rangle$ для группы $SU(2)$, $i, k = 1, 2$, то мы просто сформулируем результат и докажем его прямо из свойств самих фундаментальных операторов Вигнера (см. разд. 21 гл 3).

Ортонормированные связанные состояния спина j для n частиц спина $\frac{1}{2}$ задаются выражением

$$\begin{aligned} &= \sum_{k_1, k_2, \dots, k_n} \left\langle \begin{smallmatrix} 2j & 0 \\ j & m \end{smallmatrix} \right| \left\langle \begin{smallmatrix} i_1 \\ 1 & 0 \\ k_n \end{smallmatrix} \right\rangle \left\langle \begin{smallmatrix} i_2 \\ 1 & 0 \\ k_{n-1} \end{smallmatrix} \right\rangle \dots \left\langle \begin{smallmatrix} i_n \\ 1 & 0 \\ k_1 \end{smallmatrix} \right\rangle \left| \begin{smallmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix} \right\rangle \\ &\quad \times \left| \begin{smallmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ k_1 \end{smallmatrix} \right\rangle \otimes \left| \begin{smallmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ k_2 \end{smallmatrix} \right\rangle \otimes \dots \otimes \left| \begin{smallmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ k_n \end{smallmatrix} \right\rangle, \end{aligned} \quad (\text{П.23})$$

где обозначения имеют следующий смысл:

1) Каждый из индексов i_s и k_s ($s = 1, 2, \dots, n$) может принимать значения 0 или 1.

$$2) \quad \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -2 \end{vmatrix}. \quad (\text{П.24})$$

3) Суммирование по $k_1 k_2 \dots k_n$ ведется по всем множествам, содержащим $(n/2) + m$ единиц и $(n/2) - m$ нулей, но так как коэффициент автоматически равен нулю при невыполнении этих ограничений, мы можем игнорировать эти условия.

Заметим, что каждое i_s в наборе $(i_1 i_2 \dots i_n)$ может принимать значение 0 или 1. Однако, используя дающее сдвиг действие оператора Вигнера на вектор состояния (см. равенство (3.341) гл. 3), можно убедиться в том, что

$$\left\langle \begin{vmatrix} i_1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \right\rangle \left\langle \begin{vmatrix} i_2 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \right\rangle \dots \left\langle \begin{vmatrix} i_n \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \right\rangle \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{П.25})$$

если только $(i_1 i_2 \dots i_n)$ не является *решеточной перестановкой* типа

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \end{vmatrix} \quad 0^{\frac{n}{2}-j} 1^{\frac{n}{2}+j}. \quad (\text{П.26})$$

Иными словами, $\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \end{vmatrix}$ принадлежит нуль-пространству цепочки фундаментальных операторов Вигнера, появляющихся в (П.25), если только $(i_1 i_2 \dots i_n)$ не является решеточной перестановкой типа (П.26). Таким образом, определенные равенством (П.23) векторы равны нулю, если только $(i_1 i_2 \dots i_n)$ не является решеточной перестановкой типа (П.26), а эти перестановки есть не что иное, как символы Яманучи (если заменить нули на двойки) группы S_n для схемы Юнга $[n/2 + j \ n/2 - j]$. Мы таким образом находим весьма естественную интерпретацию решеточных перестановок и символов Яманучи на языке *операторных схем* цепочек фундаментальных коэффициентов Вигнера и нуль-пространства (этот результат обобщается на произвольную схему Юнга, см. [72]). Приведем теперь доказательство выражения (П.23).

Доказательство. Тот факт, что базисные векторы (П.23) охватывают все состояния точного углового момента, можно просто проверить путем демонстрации ортонормированности векторов:

$$\langle (i'_1 i'_2 \dots i'_n); j' m' | (i_1 i_2 \dots i_n); j m \rangle = \delta_{j' j} \delta_{m' m} \prod_{s=1}^n \delta_{i'_s i_s}, \quad (\text{П.27})$$

где $(i'_1 i'_2 \dots i'_n)$ и $(i_1 i_2 \dots i_n)$ — решеточные перестановки типа $0^{n/2-j'} 1^{n/2+j'}$ и $0^{n/2-j} 1^{n/2+j}$ соответственно. Поскольку мы уже знаем, что перечисление всех m , всех j и всех решеточных перестановок дает 2^n векторов, мы устанавливаем в результате демонстрации ортогональности, что векторы составляют базис 2^n -мерного пространства $\gamma_{1/2}^{(n)}$.

Используя ортонормированность произведения фундаментальных векторов состояния, появляющихся в правой части равенства (П.23), находим

$$\begin{aligned} & \langle (i'_1 i'_2 \dots i'_n); j' m' | (i_1 i_2 \dots i_n); j m \rangle \\ &= \sum_{k_1 \dots k_n} \left\langle \begin{vmatrix} 2j' & 0 \\ j' + m' & \end{vmatrix} \right\rangle \left\langle \begin{vmatrix} i'_1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \right\rangle \dots \left\langle \begin{vmatrix} i'_n \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \right\rangle \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \end{vmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\langle \begin{matrix} 2j & 0 \\ j+m & \end{matrix} \right| \left\langle \begin{matrix} i_1 \\ 1 & 0 \\ k_n & \end{matrix} \right\rangle \cdots \left\langle \begin{matrix} i_n \\ 1 & 0 \\ k_1 & \end{matrix} \right\rangle \left| \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & \end{matrix} \right\rangle \\
& = \left\langle \begin{matrix} 2j' & 0 \\ j'+m' & \end{matrix} \right| \sum_{k_1 \cdots k_n} \left\langle \begin{matrix} i'_1 \\ 1 & 0 \\ k_n & \end{matrix} \right\rangle \cdots \left\langle \begin{matrix} i'_n \\ 1 & 0 \\ k_1 & \end{matrix} \right\rangle \left\langle \begin{matrix} i'_n \\ 1 & 0 \\ k_1 & \end{matrix} \right\rangle^* \cdots \left\langle \begin{matrix} i_1 \\ 1 & 0 \\ k_n & \end{matrix} \right\rangle^* \left| \begin{matrix} 2j & 0 \\ j+m & \end{matrix} \right\rangle \\
& = \delta_{j'j} \delta_{m'm} (\text{множитель нуль-пространства}) \prod_{s=1}^n \delta_{i'_s i_s}, \text{ где также использована}
\end{aligned}$$

ортонормированность заданных соотношением (3.343) операторов Вигнера спина $\frac{1}{2}$. Наконец, мы видим, что когда $(i'_1 i'_2 \dots i'_n)$ и $(i_1 i_2 \dots i_n)$ являются решеточными перестановками, множитель нуль-пространства равен единице. ■

Можно убедиться в справедливости следующих полезных свойств выражения (П.23) для базисных векторов: 1) действие компонент $J_i (i = 1, 2, 3)$ полного углового момента на базисные векторы, определенное в виде действия на векторы в тензорном произведении пространств, может быть заменено действием J_i на конечный вектор состояния $\left| \begin{matrix} 2j & 0 \\ j+m & \end{matrix} \right\rangle$, появляющийся в матричном элементе,

и 2) действие (П.3) перестановки $P: 1 \rightarrow i_1, 2 \rightarrow i_2, \dots, n \rightarrow i_n$ на индексы $1, 2, \dots, n$, фигурирующие как индексы угловых моментов j_i , может быть заменено перестановкой $k_1 \rightarrow k_{i_1}, k_2 \rightarrow k_{i_2}, \dots, k_n \rightarrow k_{i_n}$, примененной к индексам $k_1, k_2, \dots, k_n$, появляющимся только в фундаментальных операторах Вигнера.

Эти два результата позволяют сделать следующие заключения: 1) действие операторов $J_3, J_{\pm}$ на базисные векторы имеет стандартный вид, и относительно унитарного преобразования $\mathcal{U}$ мы имеем стандартное преобразование

$$\mathcal{U} |(i_1 i_2 \dots i_n); jm\rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^j(U) |(i_1 i_2 \dots i_n); jm'\rangle; \quad (\text{П.28})$$

2) матричное представление перестановки $P: 1 \rightarrow i_1, 2 \rightarrow i_2, \dots, n \rightarrow i_n$ на базисе (П.22) задается согласно

$$\begin{aligned}
& D_{(i'_1 i'_2 \dots i'_n)(i_1 i_2 \dots i_n)}^{\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2} \}}(P) \\
& = \langle (i'_1 i'_2 \dots i'_n); jm | P | (i_1 i_2 \dots i_n); jm \rangle \\
& = \left\langle \begin{matrix} 2j & 0 \\ j+m & \end{matrix} \right| \sum_{k_1 \cdots k_n} \left\langle \begin{matrix} i'_1 \\ 1 & 0 \\ k_{i_n} & \end{matrix} \right\rangle \cdots \left\langle \begin{matrix} i'_n \\ 1 & 0 \\ k_{i_1} & \end{matrix} \right\rangle \\
& \quad \times \left\langle \begin{matrix} i_1 \\ 1 & 0 \\ k_1 & \end{matrix} \right\rangle^* \cdots \left\langle \begin{matrix} i_n \\ 1 & 0 \\ k_n & \end{matrix} \right\rangle^* \left| \begin{matrix} 2j & 0 \\ j+m & \end{matrix} \right\rangle.
\end{aligned} \quad (\text{П.29})$$

Последний результат дает явное выражение для матричных элементов представления группы S_n , реализованного на пространстве $\mathcal{H}(n/2 + j n/2 - j)$, через матричные элементы произведений фундаментальных коэффициентов Вигнера (этот результат обобщается на все неприводимые представления группы S_n , см. работы [73, 74]).

Замечания. а) Правила исчисления на языке схем (см. [31]) дают средство для вычисления матричных элементов, появляющихся в равенствах (П.23) и (П.29); б) бозонная реализация (7.5.129) спиновых состояний (П.23) получается при осуществлении отображения

$$|\frac{1}{2}, \frac{3}{2} - \sigma_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\frac{1}{2}, \frac{3}{2} - \sigma_n\rangle \rightarrow b_{\sigma_1}^1 b_{\sigma_2}^2 \cdots b_{\sigma_n}^n |0\rangle, \quad \sigma_i = 1, 2. \quad (\text{П.30})$$

Литература

1. *Fowler A.*, Report on Series in Line Spectra, Fleetway, London, 1922.
Доклад о сериях в спектрах линий.
2. *Paschen F.*, *Götze R.*, Seriensetze der Linienspektren, Springer, Berlin, 1922.
Закон серий в спектрах линий.
3. *Back E.*, *Landé A.*, Zeemaneffekt und Multiplettstruktur der Spektrallinien, Springer, Berlin, 1925.
Эффект Зеемана и мультиплетная структура спектральных линий.
4. *Van Vleck J. H.*, Quantum Principles of Line Spectra, Nat. Research Council Bull. 54, Washington, 1926.
Квантовые принципы спектров линий.
5. *Ruark A. E.*, *Urey H. C.*, Atoms, Molecules, and Quanta, McGraw-Hill, New York, 1930.
Атомы, молекулы и кванты.
6. *Pauling L.*, *Goudsmit S.*, The Structure of Line Spectra, McGraw-Hill, New York, 1930.
Строение спектров линий.
7. *White H. E.*, Introduction to Atomic Spectra, McGraw-Hill, New York, 1934.
Введение в теорию атомных спектров.
8. *Sommerfeld A.*, Atombau und Spektrallinien, II, Vieweg, Braunschweig, 1939. [Имеется перевод: *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектры. — М.: ГИТТЛ, 1956.]
9. *Slater J. C.*, Quantum Theory of Atomic Spectra, Vols. I, II, McGraw-Hill, New York, 1960.
Квантовая теория атомных спектров.
10. *Condon E. U.*, *Shortley G. H.*, The Theory of Atomic Spectra, Cambridge Univ. Press, London, 1935; reprinted 1953. [Имеется перевод: *Кондон Е.*, *Шортли Г.* Теория атомных спектров. — М.: ИЛ, 1961.]
- 10a. *Condon E. U.*, *Odabasi H.*, Atomic Spectra, Cambridge Univ. Press, New York, 1980.
Атомные спектры.
11. *Heisenberg W.*, Z. Physik, 33, 879 (1925).
Об интерпретации кинематических и механических соотношений в квантовой теории.
12. *Wigner E. P.*, Group Theory and Its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra, Academic Press, New York, 1959. [Имеется перевод: *Вигнер Е.* Теория групп и ее приложения в квантовомеханической теории атомных спектров. — М.: ИЛ, 1961.]
13. *Weyl H.*, Gruppentheorie und Quantenmechanik, Hirzel, Leipzig, 1928; 2nd ed, 1931.
Теория групп и квантовая механика.
14. *Eckart C.*, Rev. Mod. Phys., 2, 305 (1930).
Приложение теории групп к квантовой динамике многоатомных систем.

15. *Racah G.*, Phys. Rev., **61**, 186 (1942); **62**, 438 (1942); **63**, 368 (1943); **76**, 1352 (1949).
Теория сложных спектров.
16. *Racah G.*, Ergeb. Exakt. Naturw., **37**, 28 (1965).
Теория групп и спектроскопия.
17. *Slater J. C.*, Phys. Rev., **34**, 1293 (1929).
Теория сложных спектров.
18. *Judd B. R.*, Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, McGraw-Hill, New York, 1963.
Операторные методы в атомной спектроскопии.
19. *Собельман И.* Введение в теорию атомных спектров. — М.: Физматгиз, 1963.
20. *de-Shalit A., Talmi I.*, Nuclear Shell Theory, Academic Press, New York, 1963.
Теория ядерных оболочек.
21. *Hylleraas E. A.*, Z. Physik, **48**, 469 (1928), **54**, 347 (1929); **65**, 209 (1930).
Об основном состоянии атома гелия.
Новый расчет энергии гелия в основном состоянии, а также нижайшего терма ортого-
гелия.
Об основном терме двухэлектронной задачи для H^- , He, Li^+ , Be^{++} и т.д.
22. *Kinoshita T.*, Phys. Rev., **105**, 1490 (1957).
Основное состояние атома гелия.
23. *Pekeris C. L.*, Phys. Rev., **112**, 1649 (1958).
Основное состояние двухэлектронных атомов.
24. *Thomas L. H.*, Proc. Cambridge Phil. Soc., **23**, 542 (1927).
Вычисление атомных полей.
25. *Fermi E.*, Z. Physik, **48**, 73 (1928).
Статистический метод определения некоторых свойств атома и его применение в тео-
рии периодической системы элементов.
26. *Hartree D. R.*, Proc. Cambridge Phil. Soc., **24**, 89; 111 (1928).
Волновая механика атома с некулоновским центральным полем. I. Теория и методы.
II. Некоторые результаты и обсуждение.
27. *Фок В. А.*, Z. Physik, **61**, 126 (1930); **62**, 725 (1930).
Приближенный метод решения квантовомеханической задачи многих тел. «Само-
согласованное поле» с заменой для натрия.
- 27a. *Jensen J. H. D., Luttinger J. M.*, Phys. Rev., **86**, 907 (1952).
Распределения углового момента в модели Томаса — Ферми.
28. *Landé A.*, Z. Physik, **15**, 189 (1923).
Строение термов и эффект Зеемана для мультиплетов.
29. *Gray N. M., Wills L. A.*, Phys. Rev., **38**, 248 (1931).
Замечание о вычислении собственных функций в нулевом порядке.
30. *Baird G. E., Biedenharn L. C.*, J. Math. Phys., **4**, 1449 (1963).
О представлениях полупростых групп Ли.
31. *Biedenharn L. C., Louck J. D.*, Commun. Math. Phys., **8**, 89 (1968).
Исчисление на языке схем для тензорных операторов унитарных групп.
32. *Hamermesh M.*, Group Theory and Its Applications to Physical Problems, Addison-
Wesley, Reading, Mass., 1962. [Имеется перевод: *Хамермеш М.* Теория групп и ее при-
менение к физическим проблемам. — М.: Мир, 1966.]
33. *Goddard W. A.*, Phys. Rev., **157**, 73; 81 (1967).
Усовершенствованная квантовая теория многоэлектронных систем. Построение
собственных функций для S^2 , удовлетворяющих принципу Паули.
34. *Kramer P.*, Z. Physik, **216**, 68 (1968).
Коэффициенты расщепления симметрической группы для конфигураций оболочечной
и кластерной моделей.

35. *Kramer P.*, J. Math. Phys., 4, 639 (1968).
Неприводимые представления полупрямого произведения групп $K_n = A_n \times S_n$ и оболочечная модель гармонического осциллятора.
36. *Kramer P.* in: Group Theoretical Methods in Physics, Proc. of the Fifth Intern. Colloquium (R. T. Sharp and B. Kolman, eds.), pp. 173 — 179. Academic Press, New York, 1977.
Конечные представления унитарной группы и их применение в физике многих тел.
37. *Kramer P.*, *Seligman T. H.*, Nucl. Phys. A123, 161 (1969); A136, 545 (1969); A186, 49 (1972).
Исследования в ядерной кластерной модели. I. Матричные элементы в супермультиплетной схеме; II. Двухкластерные конфигурации; III. k -кластерные конфигурации.
38. *Seligman T. H.*, Double Coset Decompositions of Finite Groups and the Many Body Problem, Burg Monographs in Science (D. Clement, ed.) Burg, Basel, 1975.
Разложения конечных групп по двойным смежным классам и проблема многих тел.
39. *Matsen F. A.*, Advan. Quant. Chem., 1, 59 (1964); Int. J. Quantum Chem., 10, 525 (1976).
Бесспиновая квантовая химия. XVIII. Формулировка многоэлектронной задачи на языке унитарной группы.
40. *Matsen F. A.*, *Klein D. J.*, *Foyt D. C.*, J. Phys. Chem., 75, 1866 (1971).
Бесспиновая квантовая химия. X. Эффективный спиновый гамильтониан.
41. *Klein D. J.*, *Junker B. R.*, J. Chem. Phys. 54, 4290 (1971).
Свободное от спина вычисление матричных элементов. I. Теоретико-групповое вычисление чисел Паулинга.
42. *Junker B. R.*, *Klein D. J.*, J. Chem. Phys., 55, 5532 (1971).
Свободное от спина вычисление матричных элементов. II. Упрощения за счет групп инвариантности.
43. *Patterson C. W.*, *Harter W. G.*, J. Math. Phys., 17, 1125; 1137 (1976).
Каноническая симметризация унитарных базисов. I. Канонические базисы Вейля, II. Бозонный и фермионный базисы.
44. *Paldus J.* in: Theoretical Chemistry — Advances and Perspectives (H. Eyring and D. J. Henderson, eds.), Vol. 2, pp. 131 — 290, Academic Press, New York, 1976.
Проблема многоэлектронных корреляций. Теоретико-групповой подход.
45. *Paldus J.*, J. Chem. Phys., 61, 5321 (1974); Phys. Rev., A14, 1620 (1976).
Теоретико-групповой подход к конфигурационному взаимодействию и вычисления на основе теории возмущений для атомных и молекулярных систем. Подход унитарной группы к многоэлектронной корреляционной задаче: связь между формулировками на языке схем Гельфанда и диаграмм Вейля.
46. *Louck J. D.* in: Group Theoretical Methods in Physics, Proc. of the Seventh Intern. Colloquium (W. Beiglböck, A. Bohm, and E. Takasugi, eds.), pp. 39 — 50, Springer, Berlin, 1979.
Применение бозонных полиномов группы $U(n)$ к физическим проблемам.
47. *Wybourne B. G.*, Symmetry Principles and Atomic Spectroscopy, Wiley, (Interscience), New York, 1970.
Принципы симметрии и атомная спектроскопия.
48. *Shudeman C. L. B.*, J. Franklin Inst., 224, 501 (1937).
Эквивалентные электроны и их спектроскопические термы.
49. *Armstrong L., Jr.*, *Judd B. R.*, Proc. Roy. Soc. London, A315, 27 (1970).
Квазичастицы в теории атомных оболочек.
50. *Bargmann V.*, *Moshinsky M.*, Nucl. Phys., 23, 177 (1961).

- Гармонические осцилляторы с точки зрения теории групп. II. Интегралы движения для квадруполь-квадрупольного взаимодействия.
51. *Moshinsky M., Syamala Devi V.*, J. Math. Phys., 10, 455 (1969).
Общий подход к генеалогическим коэффициентам.
 52. *Syamala Devi V.*, J. Math. Phys., 11, 162 (1970).
Базисы для неприводимых представлений унитарной группы в цепочке симплектической группы.
 53. *Wybourne B. G.*, J. Math. Phys., 10, 467 (1969).
Закон обратимости Эрмита и состояния углового момента конфигураций эквивалентных частиц.
 54. *Judd B. R. et al.*, J. Math. Phys., 15, 1787 (1974).
Полные наборы коммутирующих операторов и скаляры группы $O(3)$ в обертывающей алгебре группы $SU(3)$.
 55. *Chacón E., Moshinsky M., Sharp R. T.*, J. Math. Phys., 17, 668 (1976).
 $U(5) \supset O(5) \supset O(3)$ и точное решение задачи о квадрупольных колебаниях ядра.
 - 55a. *Kramer P., John G., Schenzle D.*, Group Theory and the Interaction of Composite Nucleon Systems, Vieweg, Braunschweig, 1980.
Теория групп и взаимодействие составных нуклонных систем.
 - 55b. *Patena J., Sharp R. T.*, J. Phys. A: Math. Gen., 13, 397 (1980).
Производящие функции для плетизмов конечных и непрерывных групп.
 56. *Louck J. D.* in: Proc. of the Intern. Symp. on Math. Physics, Vol. 1, pp. 121 — 154, Mexico City, 1976.
Проблема описания вектора состояния: обзор структурных принципов.
 57. *Judd B. R.*, Second Quantization and Atomic Spectroscopy, J. Hopkins Press, Baltimore, 1967. [Имеется перевод: Джадд Б. Р. Вторичное квантование и атомная спектроскопия. — М.: Мир, 1970.]
 58. *Cowan R. D.*, The Theory of Atomic Structure and Spectra, Univ. of California Press, Berkeley, 1981.
Теория атомной структуры и спектры.
 59. *Weissbluth M.*, Atoms and Molecules, Academic Press, New York, 1978.
Атомы и молекулы.
 60. *Harter W. G.*, Phys. Rev., A8, 2819 (1973).
Альтернативный базис для теории сложных спектров. I.
 61. *Harter W. G., Patterson C. W.*, Phys. Rev., 13, 1067 (1976).
Альтернативный базис для теории сложных спектров. II.
 62. *Harter W. G., Patterson C. W.*, A Unitary Calculus for Electronic Orbitals, Springer, Berlin, 1976.
Унитарное исчисление для электронных орбиталей.
 63. *Shavitt I.*, Int. J. Quantum Chem., S11, 131 (1977).
Теоретико-групповые понятия для подхода унитарной группы к многоэлектронной корреляционной задаче.
 64. *Matsen F. A.*, Advan. Quantum Chem., 11, 223 (1978).
Унитарная группа и задача многих тел.
 65. *Drake J., Drake G. W. F., Schlesinger M.*, Phys. Rev., A15, 807 (1977).
Спин-орбитальные параметры на основе метода Гельфанда — Хартера — тестовое вычисление.
 66. *Drake G. W. F., Schlesinger M.*, Phys. Rev., A15, 1990 (1977).
Подход векторной связи к орбитальным и зависящим от спина диаграммным матричным элементам в теории сложных спектров.
 67. *Löwdin P.-O.*, Phys. Rev., 91, 1509 (1955).

- Квантовая теория многочастичных систем. III. Расширение схемы Хартри — Фока с целью включения вырожденных систем и эффектов корреляции.
68. *Pauncz R.*, *Alternant Molecular Orbital Method*, Saunders, Philadelphia, 1967.
 - Метод альтернантных молекулярных орбиталей.
 69. *Rotenberg A.*, *J. Chem. Phys.*, **39**, 512 (1963).
 - Вычисление точных собственных функций спина и орбитального углового момента с помощью метода проекционных операторов.
 70. *Murty J. S.*, *Sarma C. R.*, *Int. J. Quantum Chem.*, **9**, 1097 (1975).
 71. *Ландау Л. Д.*, *Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Физматгиз, 1963.
 72. *Louck J. D.*, *Biedenharn L. C.* in: *The Permutation Group and Its Applications in Physics and Chemistry* (J. Hinze, ed.), pp. 121 — 147. *Lecture Notes in Chemistry*, **12**, Springer, Berlin, 1979.
 - Группа перестановок и связывание n угловых моментов спина $\frac{1}{2}$.
 73. *Louck J. D.*, *Biedenharn L. C.*, *J. Math. Phys.*, **14**, 1336 (1973).
 - Структура канонических тензорных операторов в унитарных группах. III. Дальнейшая разработка бозонных полиномов и их приложений.
 74. *Biedenharn L. C.*, *Louck J. D.* in: *The Permutation Group and Its Applications in Physics and Chemistry* (J. Hinze, ed.), pp. 148 — 163. *Lecture Notes in Chemistry*, **12**, Springer, Berlin, 1979.
 - Представления симметрической группы как частные случаи бозонных полиномов в $U(n)$.
 75. *Biedenharn L. C.*, *Louck J. D.*, *The Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
 - Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

6. Электромагнитные процессы

а. Предварительные замечания. Цель настоящего раздела состоит в том, чтобы проиллюстрировать основные понятия и применение метода углового момента на конкретных примерах электромагнитных явлений. При рассмотрении электромагнитных процессов возникает определенная трудность; квантовая теория электромагнетизма (квантовая электродинамика (КЭД)) относится к замечательным достижениям теоретической физики, но именно этот факт означает, что всякое конспективное изложение не достигает цели. В соответствии с этим в нашем изложении мы ограничимся рассмотрением только процессов первого порядка (обмен одним квантом), для которых теоретико-полевые аспекты несущественны (если не считать обоснования рассмотрения, используемого для спонтанного и индуцированного излучения). Следствия такого ограничения не играют существенной роли для приложений в ядерных и адронных процессах; однако это ограничение может быть существенным для специального случая нелинейной оптики (лазерные явления).

Метод углового момента имеет большое значение при рассмотрении электромагнитных процессов первого порядка (одноквантовых). Такое рассмотрение основано на квантовой интерпретации уравнений Максвелла, согласно которой электромагнитное поле рассматривается не столько как набор полевых операторов (которые порождают и уничтожают фотоны в теоретико-полевой трак-

- Гармонические осцилляторы с точки зрения теории групп. II. Интегралы движения для квадруполь-квадрупольного взаимодействия.
51. *Moshinsky M., Syamala Devi V.*, J. Math. Phys., 10, 455 (1969).
Общий подход к генеалогическим коэффициентам.
 52. *Syamala Devi V.*, J. Math. Phys., 11, 162 (1970).
Базисы для неприводимых представлений унитарной группы в цепочке симплектической группы.
 53. *Wybourne B. G.*, J. Math. Phys., 10, 467 (1969).
Закон обратимости Эрмита и состояния углового момента конфигураций эквивалентных частиц.
 54. *Judd B. R. et al.*, J. Math. Phys., 15, 1787 (1974).
Полные наборы коммутирующих операторов и скаляры группы $O(3)$ в обертывающей алгебре группы $SU(3)$.
 55. *Chacón E., Moshinsky M., Sharp R. T.*, J. Math. Phys., 17, 668 (1976).
 $U(5) \supset O(5) \supset O(3)$ и точное решение задачи о квадрупольных колебаниях ядра.
 - 55a. *Kramer P., John G., Schenzle D.*, Group Theory and the Interaction of Composite Nucleon Systems, Vieweg, Braunschweig, 1980.
Теория групп и взаимодействие составных нуклонных систем.
 - 55b. *Patara J., Sharp R. T.*, J. Phys. A: Math. Gen., 13, 397 (1980).
Производящие функции для плетизмов конечных и непрерывных групп.
 56. *Louck J. D.* in: Proc. of the Intern. Symp. on Math. Physics, Vol. 1, pp. 121 — 154, Mexico City, 1976.
Проблема описания вектора состояния: обзор структурных принципов.
 57. *Judd B. R.*, Second Quantization and Atomic Spectroscopy, J. Hopkins Press, Baltimore, 1967. [Имеется перевод: Джадд Б. Р. Вторичное квантование и атомная спектроскопия. — М.: Мир, 1970.]
 58. *Cowan R. D.*, The Theory of Atomic Structure and Spectra, Univ. of California Press, Berkeley, 1981.
Теория атомной структуры и спектры.
 59. *Weissbluth M.*, Atoms and Molecules, Academic Press, New York, 1978.
Атомы и молекулы.
 60. *Harter W. G.*, Phys. Rev., A8, 2819 (1973).
Альтернативный базис для теорий сложных спектров. I.
 61. *Harter W. G., Patterson C. W.*, Phys. Rev., 13, 1067 (1976).
Альтернативный базис для теорий сложных спектров. II.
 62. *Harter W. G., Patterson C. W.*, A Unitary Calculus for Electronic Orbitals, Springer, Berlin, 1976.
Унитарное исчисление для электронных орбиталей.
 63. *Shavitt I.*, Int. J. Quantum Chem., S11, 131 (1977).
Теоретико-групповые понятия для подхода унитарной группы к многоэлектронной корреляционной задаче.
 64. *Matsen F. A.*, Advan. Quantum Chem., 11, 223 (1978).
Унитарная группа и задача многих тел.
 65. *Drake J., Drake G. W. F., Schlesinger M.*, Phys. Rev., A15, 807 (1977).
Спин-орбитальные параметры на основе метода Гельфанда — Хартера — тестовое вычисление.
 66. *Drake G. W. F., Schlesinger M.*, Phys. Rev., A15, 1990 (1977).
Подход векторной связи к орбитальным и зависящим от спина диаграммным матричным элементам в теории сложных спектров.
 67. *Löwdin P.-O.*, Phys. Rev., 91, 1509 (1955).

- Квантовая теория многочастичных систем. III. Расширение схемы Хартри — Фока с целью включения вырожденных систем и эффектов корреляции.
68. *Pauncz R.*, Alternant Molecular Orbital Method, Saunders, Philadelphia, 1967.
Метод альтернантных молекулярных орбиталей.
 69. *Rotenberg A.*, J. Chem. Phys., 39, 512 (1963).
Вычисление точных собственных функций спина и орбитального углового момента с помощью метода проекционных операторов.
 70. *Murty J. S., Sarma C. R.*, Int. J. Quantum Chem., 9, 1097 (1975).
 71. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Физматгиз, 1963.
 72. *Louck J. D., Biedenharn L. C.* in: The Permutation Group and Its Applications in Physics and Chemistry (J. Hinze, ed.), pp. 121 — 147. Lecture Notes in Chemistry, 12, Springer, Berlin, 1979.
Группа перестановок и связывание n угловых моментов спина $\frac{1}{2}$.
 73. *Louck J. D., Biedenharn L. C.*, J. Math. Phys., 14, 1336 (1973).
Структура канонических тензорных операторов в унитарных группах. III. Дальнейшая разработка бозонных полиномов и их приложений.
 74. *Biedenharn L. C., Louck J. D.* in: The Permutation Group and Its Applications in Physics and Chemistry (J. Hinze, ed.), pp. 148 — 163. Lecture Notes in Chemistry, 12, Springer, Berlin, 1979.
Представления симметрической группы как частные случаи бозонных полиномов в $U(n)$.
 75. *Biedenharn L. C., Louck J. D.*, The Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

6. Электромагнитные процессы

а. Предварительные замечания. Цель настоящего раздела состоит в том, чтобы проиллюстрировать основные понятия и применение метода углового момента на конкретных примерах электромагнитных явлений. При рассмотрении электромагнитных процессов возникает определенная трудность; квантовая теория электромагнетизма (квантовая электродинамика (КЭД)) относится к замечательным достижениям теоретической физики, но именно этот факт означает, что всякое конспективное изложение не достигает цели. В соответствии с этим в нашем изложении мы ограничимся рассмотрением только процессов первого порядка (обмен одним квантом), для которых теоретико-полевые аспекты несущественны (если не считать обоснования рассмотрения, используемого для спонтанного и индуцированного излучения). Следствия такого ограничения не играют существенной роли для приложений в ядерных и адронных процессах; однако это ограничение может быть существенным для специального случая нелинейной оптики (лазерные явления).

Метод углового момента имеет большое значение при рассмотрении электромагнитных процессов первого порядка (одноквантовых). Такое рассмотрение основано на квантовой интерпретации уравнений Максвелла, согласно которой электромагнитное поле рассматривается не столько как набор полевых операторов (которые порождают и уничтожают фотоны в теоретико-полевой трак-

товке), но скорее как набор эвристических аналогов волновых функций (амплитуд вероятности) для фотона (см. [1]). Уравнения Максвелла ковариантны относительно группы Пуанкаре¹⁾ и инвариантны (насколько известно в настоящее время [4]) относительно обращения времени и пространственного отражения (четности). Эти уравнения идентифицируют фотон как безмассовую частицу единичного внутреннего спина ($S = 1$). Для частиц нулевой массы спиральность (проекция внутреннего спина вдоль направления движения $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{p}}$) является инвариантом группы Пуанкаре и имеет в точности два значения $\pm S$ (для спина $S > 0$ и в предположении инвариантности при отражении).

Из сказанного следует, что построения углового момента для свободного электромагнитного поля относятся к симметрии, выполняющейся абсолютно; в соответствии с этим собственно фотонное поле может быть разложено по состояниям точного углового момента. Эти состояния являются *мультипольными полями* для уравнения Максвелла. Именно в анализе мультипольных полей аппарат углового момента играет наиболее значительную роль.

Эти следствия симметрии относительно группы Пуанкаре применимы строго к свободному фотонному полю. Дальнейшее следствие симметрии относительно группы Пуанкаре (для безмассового поля спина 1) состоит в том, что потенциалы (см. ниже) являются с необходимостью калибровочно-инвариантными, и если имеется взаимодействие с током, то для непротиворечивости картины ток должен сохраняться [5]. Это фиксирует вид взаимодействия между фотонным полем и источниками.

Особую важность метод мультиполей имеет в квантовой физике²⁾. Причиной состоит в том, что источники электромагнитного поля (атомные, ядерные и адронные системы) обладают состояниями квантованного углового момента. Соответственно число неисчезающих мультипольных моментов (см. выражения (7.6.19)) для этих систем *конечно*. Соображения относительно *размера* неисчезающих моментов на практике накладывают дальнейшие ограничения на мультипольное разложение для электромагнитных полей, так что использование метода мультиполей становится решающим. (Заметим, что методы теории углового момента входят также в рассмотрение поляризационных свойств фотонного поля; это обсуждается ниже в разд. м.)

б. Мультипольное излучение. Уравнения Максвелла для электромагнитного поля ($\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$) в пустоте (но с источниками) принимают вид³⁾

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0, & \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \mu_0 \mathbf{j}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, & \nabla \cdot \mathbf{E} &= \rho/\epsilon_0. \end{aligned} \quad (7.6.1)$$

¹⁾ Уравнения Максвелла без источников в действительности ковариантны относительно большей группы, а именно относительно 15-параметрической конформной группы [2, 3].

²⁾ Понятия мультиполей и мультипольных моментов относятся также и к классической физике. Фактически Максвелл развивал детальную теорию мультипольных моментов (но не опирающуюся непосредственно на рассуждения, связанные с угловым моментом).

³⁾ Мы пользуемся единицами рационализованной системы МКС. Для краткости величина $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ обозначена через $\mathbf{E}$, а $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$ — через $\mathbf{B}$.

Из этих уравнений следует уравнение непрерывности

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (7.6.2)$$

для заряда и источников тока (которые мы будем интерпретировать кратко как квантовомеханические средние).

Первый интеграл выписанных выше двух уравнений без источников вводит векторный потенциал $\mathbf{A}$ и скалярный потенциал ϕ (которые вместе образуют лоренцев 4-вектор):

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &\equiv \nabla \times \mathbf{A}, \\ \mathbf{E} &\equiv -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi. \end{aligned} \quad (7.6.3)$$

Вводя эти выражения в уравнения Максвелла, получаем известный результат

$$\begin{aligned} \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A} &= -\mu_0 \mathbf{j}, \\ \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \phi &= -\rho/\epsilon_0, \end{aligned} \quad (7.6.4)$$

где мы наложили калибровочное условие Лоренца

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0, \quad (7.6.5)$$

чтобы упростить вид уравнений.

Для квантовомеханических приложений (с использованием возмущения первого порядка) принимают, что источники находятся в состояниях с точной энергией до и после каждого перехода. Поэтому полезно провести фурье-анализ уравнений, соответствующих гармоническим источникам ($\omega = (E_i - E_f)/\hbar$; волновое число k обозначает величину ω/c). Заметим также, что зависимость от времени выбрана в виде $e^{-i\omega t}$ с положительной частотой ω .

В результате такого шага электромагнитные потенциалы ($\mathbf{A}$, ϕ) заменяются их фурье-образами $\mathbf{A}(\mathbf{x}, \omega)$ и $\phi(\mathbf{x}, \omega)$; аналогично в качестве источников теперь имеем $\rho(\mathbf{x}, \omega)$ и $\mathbf{j}(\mathbf{x}, \omega)$. Тогда уравнения (7.6.4) принимают вид неоднородных скалярного и векторного уравнений Гельмгольца [6, 7]:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2) \mathbf{A}(\mathbf{x}, \omega) &= -\mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{x}, \omega), \\ (\nabla^2 + k^2) \phi(\mathbf{x}, \omega) &= -\rho(\mathbf{x}, \omega)/\epsilon_0. \end{aligned} \quad (7.6.6)$$

Решение этих уравнений, соответствующее излучательному граничному условию (уходящие волны для $r \rightarrow \infty$), достигается стандартным способом при помощи функций Грина:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{x}, \omega) &= \mu_0 \int d^3 \mathbf{x}' \mathbf{j}(\mathbf{x}', \omega) \cdot \mathbf{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \\ \phi(\mathbf{x}, \omega) &= \epsilon_0^{-1} \int d^3 \mathbf{x}' \rho(\mathbf{x}', \omega) G_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \end{aligned} \quad (7.6.7)$$

где скалярная и диадичная функции Грина задаются явно в виде

$$\begin{aligned} G_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= e^{ikR}/(4\pi R), \\ \underline{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \underline{1} G_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad R \equiv \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|. \end{aligned} \quad (7.6.8)$$

Для получения желаемого мультипольного разложения для потенциалов A и ϕ достаточно найти мультипольное разложение соответствующей функции Грина. В скалярном случае при этом вводятся сферические гармоники, и результат хорошо известен:

$$G_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = ik \sum_{lm} j_l(kr_{<}) h_l^{\text{out}}(kr_{>}) Y_{lm}(\hat{x}) Y_{lm}^*(\hat{x}'). \quad (7.6.9)$$

Мы использовали здесь стандартное обозначение Морзе [6, 7] для регулярных сферических функций Бесселя j_l и для выходящих сферических функций Ганкеля h_l^{out} . (Символ $r_{<}(r_{>})$ обозначает меньший (большой) из двух радиусов (r, r'); $\hat{x}$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{x}$, т.е. $\hat{x} = \mathbf{x}/r$.)

Аналогичный шаг для диадичной функции Грина осуществляется при помощи векторных сферических гармоник (разд. 9 — 13 гл. 6). Это дает¹⁾

$$\underline{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = ik \sum_{jlm} j_l(kr_{<}) h_l^{\text{out}}(kr_{>}) Y_{ilm}(\hat{x}) Y_{ilm}^*(\hat{x}') \quad (7.6.10)$$

Этот результат, хотя и верный, имеет форму, не очень удобную для применения. Причина состоит в том, что полезные с физической точки зрения мультипольные решения основаны на частных свойствах дивергенции и вихря (которые могут перемешивать орбитальные угловые моменты в противоположность векторным сферическим функциям, каждая из которых содержит один орбитальный угловой момент). Желательная форма мультипольных решений совпадает с решениями Хансена [8], которые мы кратко рассмотрим.

в. Мультипольные поля Хансена. Магнитные мультипольные поля $M_{lm}(\mathbf{x})$ определяются согласно

$$M_{lm}(\mathbf{x}) \equiv f_l(kr) Y_{lm}(\hat{x}), \quad (7.6.11)$$

где $f_l(kr)$ — сферическая функция Бесселя (регулярная или нерегулярная). Эти магнитные мультипольные поля называют также поперечными электрическими (ПЭ) полями, поскольку радиальное электрическое поле обращается в нуль.

Электрические мультипольные поля $N_{lm}(\mathbf{x})$ (или поперечные магнитные (ПМ) поля) определяются согласно

$$\begin{aligned} N_{lm}(\mathbf{x}) &\equiv -ik^{-1} \nabla \times \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{x}) \\ &= [(l+1)/(2l+1)]^{\frac{1}{2}} f_{l-1}(kr) Y_{l-1,l,m}(\hat{x}) \\ &\quad - [l/(2l+1)]^{\frac{1}{2}} f_{l+1}(kr) Y_{l+1,l,m}(\hat{x}). \end{aligned} \quad (7.6.12)$$

¹⁾ Поскольку единственными тензорными гармониками в данном разделе являются векторные сферические функции, удобно упростить обозначение, введенное в разд. 9. гл. 6, и принять $Y_{ilm} = Y^{(il)jm}$

При получении последнего выражения мы воспользовались соотношением (6.110) для операции вихря, а также свойствами сферических функций Бесселя, заданными согласно

$$\frac{df_l}{dx} - \frac{l}{x} f_l = -f_{l+1}, \quad \frac{df_l}{dx} + \frac{l+1}{x} f_l = f_{l-1}. \quad (7.6.13)$$

Продольные мультипольные поля $L_{lm}(\mathbf{x})$, которые в пустоте не возникают, поскольку их исключает условие на спиральность $\mathbf{S} \cdot \mathbf{P} \neq 0$, необходимы для полноты векторных мультипольных полей. Эти поля задаются (см. соотношения (6.109) — (6.111) гл. 6) в виде

$$\begin{aligned} L_{lm}(\mathbf{x}) &\equiv -ik^{-1} \nabla(f_l(kr) Y_{lm}(\hat{x})) \\ &= -i[l/(2l+1)]^{\frac{1}{2}} f_{l-1}(kr) Y_{l-1,l,m}(\hat{x}) \\ &\quad - i[(l+1)/(2l+1)]^{\frac{1}{2}} f_{l+1}(kr) Y_{l+1,l,m}(\hat{x}). \end{aligned} \quad (7.6.14)$$

Как следует из определений, векторные мультипольные поля $\mathbf{L}$, $\mathbf{M}$ и $\mathbf{N}$ имеют следующие свойства относительно операции дивергенции и вихря (см. (6.105)):

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{L}_{lm} &= ik f_l Y_{lm}, & \nabla \times \mathbf{L}_{lm} &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{M}_{lm} &= 0, & \nabla \times \mathbf{M}_{lm} &= ik \mathbf{N}_{lm}, \\ \nabla \cdot \mathbf{N}_{lm} &= 0, & \nabla \times \mathbf{N}_{lm} &= -ik \mathbf{M}_{lm}. \end{aligned} \quad (7.6.15)$$

Представляется полезным (например, для выявления векторных свойств этих мультипольных полей) выразить эти поля в более явном виде

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{x}) &= [l(l+1)]^{-\frac{1}{2}} f_l(kr) \mathbf{L} Y_{lm}(\hat{x}), \\ \mathbf{N}_{lm}(\mathbf{x}) &= \frac{[l(l+1)]^{-\frac{1}{2}}}{(kr)} \left\{ l(l+1) \hat{x} f_l(kr) - (i \hat{x} \times \mathbf{L}) \frac{d[(kr) f_l(kr)]}{d(kr)} \right\} Y_{lm}(\hat{x}), \\ \mathbf{L}_{lm}(\mathbf{x}) &= \left[-i \hat{x} \frac{df_l(kr)}{d(kr)} - (kr)^{-1} f_l(kr) (\hat{x} \times \mathbf{L}) \right] Y_{lm}(\hat{x}). \end{aligned} \quad (7.6.16)$$

Диадичную функцию Грина можно теперь выразить через мультипольные поля Хансена:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= ik \sum_{lm} \{ {}^{(st)} \mathbf{M}_{lm}^*(\mathbf{x}_{<}) {}^{(out)} \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{x}_{>}) \\ &\quad + {}^{(st)} \mathbf{N}_{lm}^*(\mathbf{x}_{<}) {}^{(out)} \mathbf{N}_{lm}(\mathbf{x}_{>}) + {}^{(st)} \mathbf{L}_{lm}^*(\mathbf{x}_{<}) {}^{(out)} \mathbf{L}_{lm}(\mathbf{x}_{>}) \}. \end{aligned} \quad (7.6.17)$$

Индексы (st) и (out) обозначают соответственно стоячие волны (регулярная функция Бесселя) и уходящие волны (функция Ганкеля), а $\mathbf{x}_{>} (\mathbf{x}_{<})$ обозначает тот вектор из пары $\mathbf{x}, \mathbf{x}'$, который имеет большую (меньшую) длину.

Формальное решение мультипольных потенциалов, излучаемых произвольными гармоническими зарядом и источниками тока, получается при введении в интегралы (7.6.7) выражений (7.6.17) и (7.6.9).

2. *Классические мультипольные моменты.* Будем предполагать, что источники ограничены конечной областью пространства. Тогда излучаемые мультипольные поля могут быть полностью описаны вне источников при помощи

мультипольных моментов. Для потенциалов из соотношений (7.6.7), (7.6.9) и (7.6.17) мы получаем следующие выражения (вне источников):

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{x}, \omega) &= (ik/\epsilon_0) \sum_{lm} p_{lm} h_l^{(out)}(kr) Y_{lm}(\hat{\mathbf{x}}), \\ A(\mathbf{x}, \omega) &= (ik\mu_0) \sum_{lm} [m_{lm}^{(out)} \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{x}) + n_{lm}^{(out)} \mathbf{N}_{lm}(\mathbf{x}) + l_{lm}^{(out)} \mathbf{L}_{lm}(\mathbf{x})],\end{aligned}\quad (7.6.18)$$

где введены мультипольные моменты l_{lm} , m_{lm} , n_{lm} , p_{lm} (продольный, магнитный, электрический и скалярный моменты соответственно), определенные интегралами по источникам:

$$\begin{aligned}m_{lm} &\equiv \int d^3\mathbf{x} \, \mathbf{j}(\mathbf{x}, \omega) \cdot {}^{(st)}\mathbf{M}_{lm}^*(\mathbf{x}), \\ n_{lm} &\equiv \int d^3\mathbf{x} \, \mathbf{j}(\mathbf{x}, \omega) \cdot {}^{(st)}\mathbf{N}_{lm}^*(\mathbf{x}), \\ l_{lm} &\equiv \int d^3\mathbf{x} \, \mathbf{j}(\mathbf{x}, \omega) \cdot {}^{(st)}\mathbf{L}_{lm}^*(\mathbf{x}), \\ p_{lm} &\equiv \int d^3\mathbf{x} \, \rho(\mathbf{x}, \omega) j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{x}}).\end{aligned}\quad (7.6.19)$$

Эти четыре типа мультипольных моментов не являются независимыми, но ограничены калибровочным условием Лоренца (7.6.5), что приводит к исключению продольных моментов, поскольку мы имеем

$$p_{lm} - (1/c)l_{lm} = 0, \quad (7.6.20)$$

так что следует оставить только скалярные моменты.

д. *Приведение электрических мультипольных моментов.* Электрические мультипольные моменты n_{lm} , определенные соотношениями (7.6.19), на первый взгляд не связаны простым способом с обычными (приближенными) электрическими моментами, которые выражаются интегралом по плотности заряда. Различие заключается в том, что определенные выше электрические мультипольные моменты являются *точными* и учитывают как зарядовый, так и токовый вклады, а также эффекты запаздывания. Чтобы проиллюстрировать это наглядно, требуются значительные выкладки, в результате которых электрический мультипольный момент можно выразить в эквивалентной форме

$$\begin{aligned}n_{lm} &= ic[l(l+1)]^{-\frac{1}{2}} \int d^3\mathbf{x} \, \rho(\mathbf{x}, \omega) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{x}}) \frac{d}{dr} [r j_l(kr)] \\ &\quad - k[l(l+1)]^{-\frac{1}{2}} \int d^3\mathbf{x} \, \mathbf{x} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, \omega) j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{x}}).\end{aligned}\quad (7.6.21)$$

Таким образом, мы видим, что общий электрический мультипольный момент состоит из двух слагаемых: одно явно зависит от осциллирующей плотности заряда, а другое зависит от плотности *радиального* тока. (Плотность попе-

речного тока обуславливает возникновение магнитных мультиполей.) Только в длинноволновом приближении ($\omega \rightarrow 0$) электрический мультипольный момент пропорционален обычному статическому моменту. В этом приближении вклад радиального тока имеет более высокий порядок, и мы находим

$$n_{lm} \simeq ic \left(\frac{l+1}{l} \right)^{\frac{1}{2}} [(2l+1)!!]^{-1} k^l \int d^3x \rho r^l Y_{lm}^*(\hat{x}). \quad (7.6.22)$$

В последнее выражение входит интеграл от обычного (статического) электрического мультипольного момента.

е. *Излучаемые мультипольные поля.* Излучаемые электромагнитные поля могут быть найдены из выражений (7.6.18) для потенциалов, если воспользоваться соотношением (7.6.3) и свойствами дивергенции и вихря решений Хансена (7.6.15).

Для магнитного поля получаем

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, \omega) = -(\mu_0 k^2) \sum_{lm} \{m_{lm}^{(out)} \mathbf{N}_{lm}(\mathbf{x}) - n_{lm}^{(out)} \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{x})\}, \quad (7.6.23)$$

а для электрического

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, \omega) = -(k^2 c \mu_0) \sum_{lm} \{n_{lm}^{(out)} \mathbf{N}_{lm}(\mathbf{x}) + m_{lm}^{(out)} \mathbf{M}_{lm}(\mathbf{x})\}. \quad (7.6.24)$$

Замечания. а) Вне источников электрические и магнитные поля можно выразить в виде суммы волн магнитного и электрического мультиполей с амплитудами, задаваемыми посредством соответствующих мультипольных моментов m_{lm} и n_{lm} . (Внутри источников такой простой результат не получается, поскольку амплитуды различных мультипольных волн зависят от координаты и, кроме того, существенными являются продольные волны.)

б) Мультипольные волны для $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$, которые возникают вне источников, распадаются на два типа — «электрические мультиполи» и «магнитные мультиполи». Электрические мультиполи n_{lm} соответствуют поперечным магнитным (ПМ) волнам, поскольку $\mathbf{Y}_{lm}$, а значит, и $\mathbf{M}_{lm}$ перпендикулярны радиус-вектору $\mathbf{x}$, а магнитные мультиполи соответствуют поперечным электрическим (ПЭ) волнам.

в) В области, свободной от источников, уравнения Максвелла обладают симметрией, которую называют *дуальностью*: $\mathbf{E} \rightarrow c\mathbf{B}$, $c\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{E}$; это преобразование осуществляет взаимную замену электрического и магнитного мультиполей: $m_{lm} \rightarrow n_{lm}$, $n_{lm} \rightarrow -m_{lm}$.

ж. *Удивительное свойство мультипольного разложения* [9]. Уравнения Максвелла в пустоте не содержат какого-либо физического параметра с размерностью длины. Следовательно, электромагнитное мультипольное излучение заданного типа (электрическое или магнитное) и мультипольного характера (lm) — и заданной силы — может генерироваться источниками, заключенными внутри сферы произвольного радиуса. (Это следует из приведенных выше мультипольных рядов для $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$, если выбрать плотность заряда-тока, обладающую желаемой вращательной симметрией, так что получается заданный мультиполь; сила источника может быть откалибрована произвольным образом.)

Эти рассуждения приводят к нескольким замечательным (и парадоксально выглядящим) результатам; все они могут быть выведены из теоремы, установленной Казимиром [9].

Пусть $j(x, \omega)$ и $\rho(x, \omega)$ — распределения плотности заряда-тока, изменяющиеся со временем как $\exp(-i\omega t)$ и равные нулю за пределами сферы радиуса R . Тогда всегда возможно найти другую плотность заряда-тока (j_1, ρ_1), равную нулю вне сферы радиуса $R_1 < R$, такую, что поле излучения вне R тождественно тому, которое порождается первоначальными источниками.

(Доказательство существенно опирается на наблюдения предыдущего раздела, использующие мультипольное разложение. Возможность обращения теоремы Казимира исследовалась в работе [9a].)

Приведем предельный случай применения этой теоремы, для чего процитируем Казимира [9]: «Предположим, что слон находится в сферической клетке и освещается только источниками когерентного света, расположенными внутри клетки. Тогда наблюдатели, находящиеся вне клетки, не могут быть уверены, что там действительно находится слон: клетка может быть пустой и иметь лишь специфическую плотность заряда-тока в ее центре».

Значение этой теоремы можно понять из того ее следствия, что произвольно точная угловая направленность может быть осуществлена при помощи произвольно малого источника. Это следствие становится еще более парадоксальным, если вспомнить, что физики обычно для оценки направленности антенны используют принцип неопределенности путем выбора зависимости углового отклонения $\Delta\phi$ от характерного размера антенны D в виде

$$\Delta\phi \approx \lambda/2\pi D = (kD)^{-1}. \quad (7.6.25)$$

Как показывает теорема, такое наивное использование принципа неопределенности некорректно.

Для получения такой точной направленности антенны малого размера («сверхэффективная антенна» [10]) требуется большое количество мультипольных полей одинакового порядка величины. В атомных, ядерных и адронных системах действительные мультипольные моменты имеют весьма различные порядки величины, так что эти соображения не имеют прямого отношения к таким системам.

3. Излучаемая мощность. Для определения излучаемого потока энергии, импульса и углового момента вычисляют (усредненный по времени) вектор Пойнтинга, заданный в виде $S = (\frac{1}{2}\mu_0)\text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{B}^*)$ с использованием асимптотической формы электромагнитных полей. Это дает исключительно сложный результат, как и следовало ожидать, поскольку он описывает наиболее общее возможное угловое распределение излучения от произвольного конечного источника. Хотя использование метода углового момента позволяет значительно упростить этот общий результат, но ответ все еще слишком сложен, чтобы приводить его здесь.

Но определение излучаемой мощности является достаточно простым. Для этого находим¹⁾

$$P \equiv \text{излучаемая мощность} \equiv r^2 \int d\omega \hat{x} \cdot S \\ = \frac{1}{2} k^2 (\mu_0/\varepsilon_0)^{\frac{1}{2}} \sum_{lm} \{|m_{lm}|^2 + |n_{lm}|^2\}. \quad (7.6.26)$$

и. Поток углового момента. Смысл мультипольных решений становится более очевидным, если рассмотреть задачу об угловом моменте, испускаемом излучающим источником. Плотность потока углового момента дается формулой

$$\mathcal{J} = (1/2) \sqrt{\varepsilon_0/\mu_0} \operatorname{Re} [\mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}^*)]. \quad (7.6.27)$$

Асимптотически (т.е. для больших r) ведущий член вектора Пойнтинга $\mathbf{E} \times \mathbf{B}^*$ является *радиальным*; для потока *углового* момента это не дает никакого вклада. Поэтому необходимо осуществить асимптотическое разложение $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ до следующего более высокого порядка. Используя радиальное и тангенциальное разложение решений Хансена и асимптотические формулы для сферических функций Бесселя, находим для плотности потока углового момента выражение

$$\mathcal{J} \sim (k\mu_0/2r^2) \sum_{l'm'lm} \operatorname{Re}\{\dots\}, \quad (7.6.28)$$

где

$$\begin{aligned} \{\dots\} = & m_{lm} m_{l'm'}^* [l'(l'+1)]^{\frac{1}{2}} i^{l'-l} Y_{l'm'}^* Y_{lm} \\ & + n_{lm} m_{l'm'}^* [l'(l'+1)]^{\frac{1}{2}} i^{l'-l} Y_{l'm'}^* \mathbf{x} \times \mathbf{Y}_{lm} \\ & - n_{lm} m_{l'm'}^* [l(l+1)]^{\frac{1}{2}} i^{l'-l} Y_{lm} \mathbf{x} \times \mathbf{Y}_{l'm'}^* \\ & + n_{lm} n_{l'm'}^* [l(l+1)]^{\frac{1}{2}} i^{l'-l} Y_{lm} Y_{l'm'}^* \end{aligned} \quad (7.6.29)$$

Угловой момент (относительно заданной оси), испускаемый за единицу времени, получается из написанного выражения путем интегрирования соответствующей компоненты вектора $\mathcal{J}$ по сфере большого радиуса. Для третьей компоненты находим

$$d\mathcal{J}_3/dt = (k\mu_0/2) \sum_{lm} m(|m_{lm}|^2 + |n_{lm}|^2). \quad (7.6.30)$$

Чтобы интерпретировать этот результат, рассмотрим чисто мультипольную компоненту, скажем m_{lm} , и сравним излучаемый угловой момент (третью компоненту) с излучаемой мощностью P , заданной выражением (7.6.26). Получим

$$\frac{1}{P} \frac{d\mathcal{J}_3}{dt} = \frac{m}{\omega}. \quad (7.6.31)$$

¹⁾ Множитель $(\mu_0/\varepsilon_0)^{1/2}$, который появляется в единицах МКС, имеет размерность сопротивления и приближительное значение $120\pi \approx 377$. Мультипольные моменты имеют размерность $es = (\text{заряд}) \times (\text{скорость})$, так что получаемый результат имеет требуемую размерность.

Этот результат можно интерпретировать так, что, если мощность (для чистого монополя) излучается в единицах энергии $\hbar\omega$ (фотоны), то угловой момент также передается в единицах $m\hbar$. Именно таким способом уравнения Максвелла, которые, не содержат постоянной Планка, тем не менее совместимы с квантовой механикой фотонов. (Согласие неизбежно теряется для порядка $\hbar^2$; см. примечание 2.)

Замечания. а) Плотность потока углового момента для монохроматических фотонных полей оказалась источником многих ошибок, недоразумений и даже парадокса. Никаких трудностей не возникает, если вычисления проводить, как выше, с помощью мультипольных полей. Но если используются плоские волны точной спиральности, то необходимо проявлять особую внимательность, чтобы правильно провести интегрирования по поверхности и избежать ошибочного результата (нулевого потока углового момента). (Тщательное рассмотрение с многочисленными ссылками на литературу провели Яух и Рорлих [11].)

б) Необходимо отметить, что мультипольные поля заданного значения полного углового момента и типа (электрическое или магнитное) не имеют (как для E , так и для B) определенного значения (орбитального) углового момента l . Действительно, разделить полный угловой момент фотонного поля на «орбитальную» и «спиновую» части невозможно (это противоречило бы калибровочной инвариантности); самое лучшее, что можно сделать, — это определить оператор спиральности $S \cdot \hat{P}$, который является наблюдаемым [12]).

к. Векторный аналог разложения Рэлея. Для применений мультипольного излучения к угловым корреляциям (разд. 8) важно получить векторный аналог разложения Рэлея скалярных плоских волн по сферическим волнам. Это легко осуществить непосредственно из диадичной функции Грина (приведенной в (7.6.17)) путем взятия предела, когда точка источника x' стремится в бесконечность.

Вместо этого можно взять формулу Рэлея для плоской волны

$$e^{ik \cdot x} = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}(\hat{x}) Y_{lm}^*(\hat{k}), \quad (7.6.32)$$

и воспользоваться коэффициентами Вигнера для связывания в базисные функции спина 1 (см. разд. 11 гл. 6).

В любом случае для поляризованной по кругу плоской волны, распространяющейся в направлении $\mathbf{k}$, получается следующий результат:

$$e^{ik \cdot x} \hat{\xi}'_p = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_m i^{l-1} [2\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} D_{mp}^l(\hat{k}) [{}^{(st)}N_{lm}(x) - ip {}^{(st)}M_{lm}(x)], \quad (7.6.33)$$

где $p = +1$ и -1 для правой и левой круговой поляризации соответственно, а $\hat{\xi}'_p$ обозначает сферический базисный вектор, определенный при помощи системы отсчета $(\hat{e}'_1, \hat{e}'_2, \hat{e}'_3)$, третья ось которой параллельна вектору $\mathbf{k}$. В последней формуле $D^l(\hat{k})$ обозначает матрицу вращения, определяемую как $\mathcal{D}(R(\hat{k})) = D^l(\alpha\beta 0)$, где $R(\hat{k})$ — ортогональная матрица, поворачивающая третью ось $\hat{e}_3 = \text{col}(0, 0, 1)$ до направления $\hat{k} = \text{col}(\cos \alpha \sin \beta, \sin \alpha \sin \beta, \cos \beta) = \mathbf{k}/k$, т. е. $\hat{k} = R(\hat{k})\hat{e}_3$. (См. определение сферических векторов $\hat{\xi}'_p$ (6.60) гл. 6 и связи между $\mathcal{D}(R)$ и $D(U)$ (6.188).)

л. Иллюстративный пример. Чтобы продемонстрировать применение метода углового момента, рассмотрим вновь кратко старую задачу о рассеянии электромагнитных волн идеально проводящей сферой. Падающие плоские волны будем считать поляризованными по кругу. Поставим целью вычислить силу, действующую на сферу в единицу времени.

Падающая электромагнитная волна, которую мы считаем распространяющейся вдоль третьей оси, имеет следующий электрический вектор:

$$\mathbf{E}_{\text{inc}} = E_0 \sum_l [2\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} i^{l-1} [{}^{(\text{st})}\mathbf{N}_{lp} - ip {}^{(\text{st})}\mathbf{M}_{lp}]. \quad (7.6.34)$$

Полный вектор $\mathbf{E}$ состоит из падающего поля (7.6.34) плюс уходящие рассеянные волны; последние определяются из уравнения Максвелла с использованием того граничного условия, что для идеального проводника тангенциальное электрическое поле на поверхности сферы обращается в нуль.

Удобная формулировка для полного вектора $\mathbf{E}$ использует сдвиги фаз α_l и β_l для рассеянных уходящих волн:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{total}} &= E_0 \sum_l i^{l-1} [2\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} \{ \cdots \}, \\ \{ \cdots \} &\equiv {}^{(\text{st})}\mathbf{N}_{lp} + ie^{i\beta_l} \sin \beta_l {}^{(\text{out})}\mathbf{N}_{ln} - ip {}^{(\text{st})}\mathbf{M}_{lp} + e^{i\alpha_l} \sin \alpha_l {}^{(\text{out})}\mathbf{M}_{lp}. \end{aligned} \quad (7.6.35)$$

Используя граничное условие, получаем следующие сдвиги фаз:

$$\tan \alpha_l = j_l(ka)/n_l(ka), \quad (7.6.36)$$

$$\tan \beta_l = \left[\frac{(d/dr)(rj_l)}{(d/dr)(rn_l)} \right]_{r=a}. \quad (7.6.37)$$

Эти формулы полностью определяют рассеянную волну. Из (7.6.26) находим рассеянную мощность

$$P_{\text{scatt}} = (\pi E_0^2/k^2) \sqrt{\epsilon_0/\mu_0} \sum_l (2l+1) [\sin^2 \alpha_l + \sin^2 \beta_l]. \quad (7.6.38)$$

Падающий поток энергии дается выражением $\frac{1}{2} E_0^2 \sqrt{\epsilon_0/\mu_0}$. Отношение рассеянной мощности к падающему потоку определяет *сечение* σ , т.е. площадь потока, которую эффективно удаляет рассеяние. Для сечения σ находим

$$\sigma = (2\pi/k^2) \sum_l (2l+1) (\sin^2 \alpha_l + \sin^2 \beta_l). \quad (7.6.39)$$

При $\lambda \gg a$ выражения для сдвигов фаз α_l и β_l принимают предельные формы

$$\begin{aligned} \alpha_l &\simeq -(2l+1) \frac{(ka)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}, \\ \beta_l &\simeq \frac{l+1}{l} (2l+1) \frac{(ka)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}. \end{aligned} \quad (7.6.40)$$

В этом пределе сечение принимает приближенное значение

$$\sigma \simeq \frac{10}{3} (ka)^4 (\pi a^2). \quad (7.6.41)$$

Этот результат находится в согласии с тем общим результатом, что в длинноволновом пределе получается рэлеевское рассеяние $\sigma \sim (\lambda)^4$.

Вернемся теперь к задаче определения силы, действующей на сферу. Она может быть получена из максвелловского тензора напряженности, вычисленного для поверхности сферы. Можно также вычислить тензор напряженности для сферы в бесконечности, поскольку в области между двумя сферами объемные силы сокращаются.

Тензор напряженности имеет вид

$$T_{ij} = E_i D_j + H_i B_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}), \quad (7.6.42)$$

так что сила, приходящаяся на сферическую поверхность $r^2 d\omega$, равна

$$d\mathbf{F} = (r^2 d\omega) \{ \epsilon_0 \mathbf{E}(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{E}) + \mu_0 \mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{H}) - \frac{1}{2} (\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) \hat{\mathbf{x}} \}, \quad (7.6.43)$$

где $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/r$.

При $r \rightarrow \infty$ члены наименьшего порядка как по $\mathbf{E}$, так и по $\mathbf{H}$, являются *тангенциальными*, так что эффективная сила есть

$$d\mathbf{F} \simeq (r^2 d\omega) \left(-\frac{1}{2} \right) (\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) \hat{\mathbf{x}}. \quad (7.6.44)$$

Можно сделать дальнейшее упрощение: ввиду симметрии, принять, что не обращается в нуль только третья компонента полной силы.

Таким образом, третья компонента результирующей силы определяется выражением

$$F_3 = \left(-\frac{1}{2} \right) \int r^2 d\omega \cos \theta [\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2]. \quad (7.6.45)$$

Вычисление интеграла весьма упрощается, если воспользоваться методами теории углового момента (см. разд. 13 гл. 6) для векторных сферических гармоник. Конечный результат приводится к замечательно простому виду

$$F_3 = (\pi \epsilon_0 E_0^2 k^{-2}) \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ \frac{2l+1}{l(l+1)} \sin^2(\alpha_l - \beta_l) + \frac{l(l+2)}{l+1} [\sin^2(\beta_l - \beta_{l+1}) + \sin^2(\alpha_l - \alpha_{l+1})] \right\}. \quad (7.6.46)$$

В длинноволновом пределе находим

$$F_3 \simeq (7\pi/3) \epsilon_0 E_0^2 k^4 a^6 = \left(\frac{1}{2c} E_0^2 \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \right) \left(\frac{10\pi}{3} k^4 a^6 \right) \left(\frac{7}{5} \right) \\ = (\text{падающий поток импульса}) \times (\text{сечение}) \times \frac{7}{5}. \quad (7.6.47)$$

Множитель $\frac{7}{5}$ показывает, что полная сила несколько больше, чем сила, получаемая исходя из полного поглощения потока импульса, падающего на площадку с размером, соответствующим сечению.

Задача о силе, с которой плоская электромагнитная волна действует на идеально проводящую сферу, известна давно, причем член низшего порядка (приведенный выше результат) был первоначально получен Шварцшильдом в 1901 г., а

более полное рассмотрение провел Дебай в 1909 г. Продолжим обсуждение этой задачи, чтобы продемонстрировать применение методов теории углового момента, причем воспользуемся способом, который не приводится в литературе по этой задаче.

Если разделить силу F_3 на произведение плотности падающей энергии на площадь сечения сферы πa^2 , то можно получить безразмерную величину. Обозначая эту величину Γ , находим

$$\Gamma \equiv F_3 / (\frac{1}{2} \varepsilon_0 E_0^2) (\pi a^2), \quad (7.6.48)$$

$$\Gamma = 2(ka)^{-2} \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ \frac{2l+1}{l(l+1)} \sin^2(\alpha_l - \beta_l) + \frac{l(l+2)}{l+1} [\sin^2(\alpha_l - \alpha_{l+1}) + \sin^2(\beta_l - \beta_{l+1})] \right\}. \quad (7.6.49)$$

В дальнейшем будем считать, что $z = ka$.

Рассмотрим слагаемое $\sin^2(\alpha_l - \beta_l)$. Используя определение сдвигов фаз α_l, β_l (выражения (7.6.36) и (7.6.37)), а также свойства сферических функций Бесселя, получаем более простой результат:

$$\sin^2(\alpha_l - \beta_l) = [z^2(j_l^2 + n_l^2)]^{-1} \{ [(zj_l)']^2 + [(zn_l)']^2 \}^{-1}, \quad (7.6.50)$$

где штрих обозначает дифференцирование по z .

Простота этого результата обусловлена тем фактом, что здесь величины имеют более непосредственное физическое значение. Член $[z^2(j_l^2 + n_l^2)]^{-1} \equiv A_l^{-1}$ определяет *проницаемость* барьера углового момента. Величинам этого типа в квантовой механике уделяется много внимания.

Вторая величина $B_l \equiv [(zn_l)']^2 + [(zj_l)']^2$ не является непосредственно *проницаемостью* барьера, но тесно связана с ней, как показывает следующее соотношение:

$$B_l = \left[1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right] A_l + \frac{1}{2} A_l''. \quad (7.6.51)$$

Остается исследовать остальные члены в выражении для Γ . Можно показать, что

$$\sin^2(\alpha_l - \alpha_{l+1}) = A_l^{-1} A_{l+1}^{-1}, \quad (7.6.52)$$

$$\sin^2(\beta_l - \beta_{l+1}) = \left[1 - \frac{(l+1)^2}{z^2} \right]^2 B_l^{-1} B_{l+1}^{-1}. \quad (7.6.52)$$

После подстановки этих более физических величин формула для Γ принимает более простой вид. Получаем следующий результат:

$$\Gamma = 2z^{-2} \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ \frac{2l+1}{l(l+1)} A_l^{-1} B_l^{-1} + \frac{l(l+2)}{l+1} A_l^{-1} A_{l+1}^{-1} + \frac{l(l+2)}{l+1} \left[1 - \left(\frac{l+1}{z} \right)^2 \right]^2 B_l^{-1} B_{l+1}^{-1} \right\}. \quad (7.6.53)$$

Величины A_l (обратные проникаемости) являются *полиномами* по z^{-2} . Можно показать, что они имеют вид

$$A_l(z) = {}_3F_0\left(\frac{1}{2}, l+1, -l; -z^{-2}\right). \quad (7.6.54)$$

Обобщенная гипергеометрическая функция ${}_3F_0$ в этом выражении определяется как ряд

$${}_3F_0(a, b, c; x) = 1 + \frac{abc}{(1)}x + \frac{a(a+1)b(b+1)c(c+1)}{(1)(2)}x^2 + \dots$$

Для общих значений a, b, c этот ряд не сходится, но если один из параметров a, b, c есть *отрицательное целое число* (как в нашем случае), то ряд обрывается, и функция сводится к полиному.

Используя эти данные, непосредственно получаем разложение в ряд для Γ по переменной z :

$$\Gamma = \frac{14}{3}z^4 \left(1 - \frac{1}{21}z^2 + \dots\right). \quad (7.6.55)$$

В действительности ряд сходится *очень медленно* и *неприменим* для вычислений.

Из сказанного, по-видимому, следует, что мультипольное разложение хорошо применимо для длинноволнового предела, но плохо применимо вне этого предела. На первый взгляд может даже показаться безнадежным рассматривать мультипольное разложение для *коротковолнового* предела. Мы покажем теперь, что при надлежащей интерпретации мультипольное разложение на самом деле работает даже здесь. Для обсуждения этого вопроса необходимо прежде понять некоторые факты относительно формул для проникаемости.

Если в исходном ряде использовать сами величины A_l и B_l то, как легко убедиться, этот мультипольный ряд сходится значительно лучше. (Полезным критерием является то, что нам требуются значения l , включая значение $l \approx z$. Так, для $z = 1$ использование только значения $l = 1$ дает для Γ ответ с точностью, гораздо лучшей чем 1%.)

Для больших z и $l \ll z$ очевидно, что $A_l \rightarrow 1$; это согласуется с физической интуицией, которая подсказывает, что барьер в этом пределе становится неэффективным. Но критической областью является область, где $l \approx z$ и $z \rightarrow \infty$. Это область перехода, и проникаемость быстро убывает. Для $l \gg z$ проникаемость экспоненциально падает к нулю. Таким образом, *мультипольный ряд всегда сходится* и эффективно сводится к обрезанию в окрестности $l \approx z$.

Для $z \rightarrow \infty, l < z$ и $l = z$, мы можем получить асимптотическую формулу

$$A_l(z) \sim (1 - l^2/z^2)^{-\frac{1}{2}}. \quad (7.6.56)$$

Этот результат приводит к асимптотической формуле для B_l

$$B_l \sim (1 - l^2/z^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (7.6.57)$$

Рассмотрим теперь выражение для Γ . Сумма охватывает множество значений l вплоть до $l \approx z$ при $z \rightarrow \infty$. В таких условиях сумма переходит в интеграл, и после введения асимптотических формул для A_l и B_l мы находим

$$\Gamma \sim \frac{2}{z^2} \int_0^{l \approx z} dl [2l^{-1} + 2l(1 - l^2/z^2)]. \quad (7.6.58)$$

Ясно, что первый член мал по сравнению с вторым. Если ввести переменную $l/z \equiv u$, то получим

$$\Gamma \sim 4 \int_0^1 u du (1 - u^2) = 1. \quad (7.6.59)$$

Таким образом, для больших z Γ становится равным единице в коротковолновом пределе, причем этот результат мы получили, используя мультипольный ряд.

Такой результат можно получить и более элементарным способом, и это в самом деле легко осуществимо, поскольку коротковолновой предел означает справедливость *лучевой оптики*. Направленная вдоль третьей оси сила, обусловленная лучами, которые падают на кольцо под углом θ , равна

$$dF_3 = (\frac{1}{2}\epsilon_0 E_0^2)(2\pi a^2 \sin \theta d\theta \cos \theta)(2 \cos^2 \theta)$$

= (давление падающего света) (проецируемая площадь) (коэффициент отражения).

Таким образом, находим

$$F_3 = (\frac{1}{2}\epsilon_0 E_0^2)(4\pi a^2) \int_0^{\pi/2} \cos^3 \theta \sin \theta d\theta$$

$$= (\frac{1}{2}\epsilon_0 E_0^2)\pi a^2;$$

т.е.

$$\Gamma = \frac{F_3}{\frac{1}{2}\epsilon_0 E_0^2(\pi a^2)} = 1.$$

Резюмируем: на основе мультипольного разложения безразмерного параметра силы Γ мы получили *правильное предельное поведение, как в длинноволновом, так и в коротковолновом пределах*. (Поведение в окрестности максимума (задача Дебая) также может быть получено при помощи мультипольного разложения.)

Но наша цель носит иллюстративный характер: мультипольное разложение есть аппарат, применимый для всех длин волн; он оказывается практически применимым, если надлежащим образом учитывается *проницаемость* (см. примечание 3).

м. Матрица плотности для измерений фотонных угловых корреляций. Угловое распределение электромагнитного потока, излучаемого источником заряда-тока произвольной плотности, может быть вычислено на основе выражений для мультипольных полей E и B (7.6.23) и (7.6.24) с использованием вектора Пойнтинга, как отмечалось в нашем обсуждении излучаемой мощности. Что-

бы дать интерпретацию этого результата в квантовомеханических приложениях, необходимо существенно изменить точку зрения. Прежде всего источники рассматриваются как средние (амплитуды вероятности), соответствующие атомному, ядерному или адронному переходу. Это дает интерпретацию магнитного и электрического мультипольных моментов m_{lm} и n_{lm} соответственно, как параметров, характеризующих важные физические свойства источников квантов. (Как обсуждается в работе [29], симметрия обращения времени в квантовой механике налагает важные фазовые условия на мультипольные моменты.)

Более существенное изменение в подходе касается фотонной интерпретации электромагнитного потока. Угловое распределение излучаемого потока при (θ, ϕ) определяется как вероятность наблюдать фотон с определенным 4-импульсом, но обладающий случайной поляризацией, если одновременно не осуществляется определение спина (т. е. измерение поляризации фотона; см. ниже). Важно подчеркнуть, что мультипольность фотона не измеряется непосредственно; другими словами, характеристики углового момента (l, m) не являются локальными свойствами, но требуют интегрирования по поверхности, охватывающей источники. Источники квантов в действительности испускают фотоны в (конечном числе) мультипольных состояний, но асимптотически фотоны детектируются как плосковолновые состояния.

Из этого описания процесса измерения можно заключить, что искомая информация зависит не только от параметров мультипольного момента, но и от (матричного) преобразования между мультипольными состояниями и наблюдаемыми (максимальное измерение) плосковолновыми состояниями спиральности. Это преобразование между двумя системами базисов (мультипольный базис и плосковолновой базис) сводится в точности к векторному аналогу разложения Рэйли и является структурой, полностью определяемой соотношениями, основанными на методах теории углового момента.

Имея в виду эти представления, перейдем теперь к более детальному обсуждению.

Рассмотрим прежде всего измерения поляризации спина. Как подробно обсуждалось в разд. 7, мы определяем систему координат — тетраду, основанную на 4-векторе импульса фотона. По отношению к этой тетраде, наиболее общее чистое состояние (когерентное состояние) для спина выражается как линейная комбинация двух (базис спиральности) состояний: $\hat{\xi}_{+1} = | + 1 \rangle$ и $\hat{\xi}_{-1} = | - 1 \rangle$. Эта ситуация формально эквивалентна ситуации для спиновых состояний частицы со спином $\frac{1}{2}$ ¹⁾ и приводит к поляризационной матрице плотности:

$$\rho_{\text{pol}} = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 + \sigma \cdot \mathbf{w}), \quad (7.6.60)$$

где $\mathbb{1}_2 = \sigma_0$ обозначает единичную (2×2) -матрицу. Вектор²⁾ $\mathbf{w}$ определяет стоксовы параметры фотона [13], величина $0 \leq w \leq 1$ определяет степень поля-

¹⁾ Заметим, что физический угловой момент дается тем не менее в единицах $\hbar$ (а не $\frac{1}{2} \hbar$).

²⁾ Вектор поляризации в этом контексте обычно обозначают через $\mathbf{P}$. Мы используем необычный символ $\mathbf{w}$ по двум причинам: чтобы избежать смешивания с оператором импульса $\mathbf{P}$ и (что более важно) по аналогии с 4-вектором $\mathbf{W}$, используемым для обозначения релятивистского векторного оператора поляризации (поэтому логично числовой поляризационный вектор обозначать через $\mathbf{w}$).

ризации, а направление (θ, ϕ) (сфера Пуанкаре, см. [14]) определяет тип поляризации: $\theta = 0$ соответствует левой круговой¹⁾, а $\theta = \pi$ — правой круговой поляризациям; $\theta = \pi/2$ соответствует линейной поляризации (ϕ — азимут); эллиптическая поляризация является истинно чистым состоянием.

(Интересно, что эти параметры предвосхищали квантовую механику почти на 75 лет и затем были введены вновь сравнительно недавно [15, 16, 16a].)

Обратимся теперь к матрице преобразования²⁾. Используя тот факт, что поляризационные (чистые) состояния спина $1/2$ транзитивны относительно вращений, мы можем описать истинный спиновый вектор состояния посредством (двухпараметрического) вращения:

$$\hat{\xi}(\hat{w}) \equiv \sum_{\mu} D_{\mu\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\hat{w}) \hat{\xi}_{2\mu},$$

где $\hat{w} = \mathbf{w}/w$ и $D^{\frac{1}{2}}(\hat{w}) = D^{\frac{1}{2}}(\phi\theta\phi)$ для $\hat{w} = (\cos\phi \sin\theta, \sin\phi \sin\theta, \cos\theta)$. Используя это спиновое состояние в аналоге разложения Рэлея (7.6.33), получаем

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} D_{\mu\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\hat{w}) e^{ikx_3} \hat{\xi}_{2\mu} \\ = \sum_{l\mu} i^{l-1} [2\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} D_{\mu\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\hat{w}) [N_{l,2\mu}(\mathbf{x}) + i(-2\mu)M_{l,2\mu}(\mathbf{x})]. \end{aligned} \quad (7.6.61)$$

Этот результат привязан к системе отсчета, в которой третья ось ориентирована вдоль направления распространения фотона. При вращении системы координат направление спина и направление распространения вращаются жестко связанными, так что в общей системе отсчета находим

$$\begin{aligned} \left[\sum_{\mu} D_{\mu\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\hat{w}) e^{ikx_3} \right]_{\text{rotated}} = \sum_{l\mu} i^{l-1} [2\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} D_{\mu\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\hat{w}) D_{m,2\mu}^l(\hat{k}) \\ \times [N_{lm}(\mathbf{x}) + i(-2\mu)M_{lm}(\mathbf{x})]. \end{aligned} \quad (7.6.62)$$

(Определение специальной матрицы вращения $D^l(R)$ см. в (7.6.33).)

Электромагнитные мультиполи, появляющиеся в (7.6.62), являются потенциалами (стоячей волны), нормированными равномерно для каждой (lm) -компоненты на $(2\pi\hbar k)^{-1}$ квант/с. Полная нормировка менее существенна, чем тот факт, что различные мультиполи нормированы равномерно, так что $\{N_{lm}, M_{lm}\}$ соответствуют базисным состояниям для максимального измерения. Чтобы дать формулировку матрицы плотности, соответствующей состоянию (7.6.62), перепишем этот результат в виде

$$|\hat{w}, \hat{k}\rangle = \sum_{\pi lm} A_{\pi lm}(\hat{w}, \hat{k}) |\pi lm\rangle, \quad (7.6.63)$$

¹⁾ Направление поляризации обычно определяют так: «на фотон» смотрят против направления его движения.

²⁾ В этом обсуждении существенно используются понятия разд. 7, касающиеся матрицы плотности.

где

$$\langle x | \pi l m \rangle \equiv \begin{cases} N_{lm}(x) & \text{для электр. } \pi, \\ M_{lm}(x) & \text{для магн. } \pi, \end{cases} \quad (7.6.64)$$

$$A_{\pi lm}(\hat{w}, \hat{k}) = i^{l-1} [2\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} \sum_{\mu} D_{\mu \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}(\hat{w}) D_{m, 2\mu}^l(\hat{k}) \times \begin{cases} 1 & \text{для электр. } \pi, \\ -2i\mu & \text{для магн. } \pi. \end{cases} \quad (7.6.65)$$

Для матрицы плотности излучения находим

$$\rho_{\text{rad}} = |\hat{w}, \hat{k}\rangle \langle \hat{w}, \hat{k}|.$$

Используя коэффициенты преобразования $A_{\pi lm}(\hat{w}, \hat{k})$ из (7.6.65), получаем

$$\langle \pi' l' m' | \rho_{\text{rad}} | \pi l m \rangle = A_{\pi' l' m'}^*(\hat{w}, \hat{k}) A_{\pi l m}(\hat{w}, \hat{k}). \quad (7.6.66)$$

Используя коэффициенты Вигнера (которые будут подробнее рассмотрены в разд. 7), находим тензорные параметры излучения в виде

$$R_{\pi' l'; \pi l}^{k, k}(\hat{w}, \hat{k}) = \sum_{mm'} \langle \pi' l' m' | \rho_{\text{rad}} | \pi l m \rangle C_{mm'k}^{ll'k}. \quad (7.6.67)$$

Тензорные параметры удобно разделить на три члена, соответствующие трем членам в матрице плотности поляризации фотонов. Получаем: независимый от поляризации член (см. примечание 4)

$$R_{\pi' l'; \pi l; \text{unpol}}^{k, k}(\hat{w}, \hat{k}) = (-)^{k+l'+1} [(2l+1)(2l'+1)]^{\frac{1}{2}} \times C_{1, -1, 0}^{ll'k} D_{k, 0}^k(\hat{k}), \quad (7.6.68)$$

где k ограничено четными целочисленными значениями, когда четность сохраняется;

член «круговой» поляризации

$$R_{\pi' l'; \pi l; 1}^{k, k}(\hat{w}, \hat{k}) = (-1)^{k+l'+1} w \cos \theta [(2l+1)(2l'+1)]^{\frac{1}{2}} \times C_{1, -1, 0}^{ll'k} D_{k, 0}^k(\hat{k}), \quad (7.6.69)$$

где k ограничено нечетными целочисленными значениями, когда четность сохраняется (w и θ — стоксовы параметры);

член «линейной» поляризации

$$R_{\pi' l'; \pi l; 2}^{k, k}(\hat{w}, \hat{k}) = \pm \frac{1}{2} (-1)^{k+l'+1} w \sin \theta [(2l+1)(2l'+1)]^{\frac{1}{2}} \times C_{112}^{ll'k} [e^{i\phi} D_{k, 2}^k(\hat{k}) + e^{-i\phi} D_{k, -2}^k(\hat{k})], \quad (7.6.70)$$

где k снова ограничено четными целочисленными значениями при сохранении четности и инвариантности относительно обращения времени (w , θ , ϕ — прежним стоксовы параметры). Знак ($\pm$) определяется четностью мультиполя.

Замечания. а) Эти результаты на самом деле не такие сложные, какими могут показаться на первый взгляд. Ясно, что коэффициенты Вигнера, входящие в соотношения (7.6.68) — (7.6.70), просто выражают сохранение углового момента и тот факт, что фотон с необходимостью имеет спин ± 1 вдоль направления его движения.

б) Поляризационные члены линейно зависят от степени поляризации. Тот факт, что k нечетно в равенстве (7.6.69), показывает, что компоненты круговой поляризации (наподобие спиральности) обращаются при отражении, в противоположность компонентам линейной поляризации (7.6.70), которые не обращаются (k четно). Но компоненты линейной поляризации изменяют знак, когда изменяется четность излучения (это выражает тот факт, что относительно двойственности стоксов параметр ϕ переходит в $\phi + \pi$).

в) Эти результаты для тензорных параметров излучения широко используются в ядерной спектроскопии, включающей угловые корреляции гамма-лучей; исчерпывающее обсуждение дано в работе [166].

н. *Примечания.* 1. Насколько нам известно, Май [17] впервые в 1908 г. определил полный набор мультипольных решений для уравнений Максвелла в пустоте. Но лишь успехи технологии привели к новому открытию и широкому использованию мультипольных волн, а именно открытие Колмзном в 1943 г. детекторов гамма-лучей (на основе NaI). Эти детекторы впервые сделали возможными измерения угловых корреляций ядерных гамма-лучевых каскадов (см. разд. 8 этой главы); затем метод мультипольных полей развивался как естественный аппарат для таких исследований угловых корреляций. См., например, работы [18 — 22]. В нашем обсуждении мы следуем неопубликованным лекциям, прочитанным в Йельском университете в 1952 г. Книга Джэксона [23] содержит особенно удачное изложение мультипольного излучения. Корбен и Швингер [24], насколько нам известно, впервые определили векторные сферические гармоники через коэффициенты Вигнера. Альтернативная формулировка электромагнетизма на языке мультипольных дебаевских потенциалов была дана в работах Грея [25] и других авторов.

2. Классический электромагнитный мультиполь (L, M) , осциллирующий с круговой частотой ω , излучает угловой момент, а также энергию; как это обсуждалось в разд. и, отношение $\hbar M / \hbar \omega$ не зависит от постоянной Планка и согласуется с квантовой интерпретацией. Но если вычислить *квадрат* излучаемого углового момента и сравнить его с квадратом излучаемой энергии, то мы получим результат M^2 / ω^2 , а не ожидаемое (квантовое) значение $L(L + 1) / \omega^2$, как полагается для «частицы» в (L, M) -состоянии. Эту загадку разъяснили Моретт-де Витт и Йенсен [26], показавшие (с помощью квантованных электромагнитных полей), что правильное квантовое значение для отношения квадратов есть

$$\{N^2 M^2 + N[L(L + 1) - M^2]\} / \omega^2,$$

где N — число квантов в мультипольной моде (L, M) . Это решение загадки показывает, что для $N = 1$ (один квант) действительно получается ожидаемый одночастичный квантовомеханический ответ $L(L + 1) / \omega^2$, но для больших чисел квантов (классический полевой предел $N \gg 1$) получается классическое значение M^2 / ω^2 . Кроме того, видно, что для N квантов когерентно складываются их третьи компоненты углового момента (что даст $N^2 M^2$ в отношении квадратов), но принцип неопределенности требует, чтобы перпендикулярные компоненты (первая и вторая) угловых моментов складывались *случайно*, добавляя в отношение множитель, пропорциональный N .

3. Другой подход к коротковолновому пределу развивал Зоммерфельд [27] с использованием аналитического продолжения в область комплексных угловых моментов. Эти методы особенно важны как для ядерных реакций с тяжелыми ионами, так и в физике высоких энергий («полюса Редже»); они обсуждаются более подробно в работе [29].

4. Следует специально отметить, что использование формализма матрицы плотности сильно облегчает рассмотрение «неполяризованных» электромагнитных волн, но на этом пути маскируется проблема исключительной теоретической важности. Каждое решение уравнений Максвелла, которое распространяется в пространстве как плоская волна, *обязательно* полностью поляризовано в поперечном направлении; каждая аддитивная суперпозиция двух полностью поляризованных решений дает другое полностью поляризованное решение. Неполяризованная волна *не может быть* решением уравнений Максвелла! Таким образом, понятие неполяризованной волны выходит *за пределы* максвелловской электродинамики и требует квантового рассмотрения (неявно вводимого через формализм матрицы плотности) [28]. (Йенсен указал, что Френель в 1821 г. уже отмечал, что существование неполяризованных волн представляет серьезную проблему для классической оптики.)

Литература

1. Ferretti B. in: Old and New Problems in Elementary Particles (G. Puppi, ed.), pp. 108 — 119. Academic Press, New York, 1968.
Распространение сигналов и частиц.
2. Cunningham E., Proc. London Math. Soc., Series 2, 8, 77 (1910).
Принцип относительности в электродинамике и его обобщения.
3. Bateman H., Proc. London Math. Soc., Series 2, 7, 70 (1909); see also Electrical and Optical Wave-Motion, Dover, New York, 1955.
Конформные преобразования четырехмерного пространства и их приложение к геометрической оптике.
4. Brodsky S. J. in: Precision Measurements and Experimental Constants (D. N. Langenberg and B. N. Taylor, eds.), pp. 297 — 307. U.S. National Bureau of Standards Special Publication 343, Washington, 1971.
Квантовая теория электродинамики, ее отношение к прецизионным низкоэнергетическим экспериментам.
5. van Dam H., Gravitational Theory, Lectures at the Univ. of Nijmegen, Nijmegen, The Netherlands, 1975.
Гравитационная теория.
6. Morse P. M., Vibration and Sound, McGraw-Hill, New York, 1948. [Имеется перевод: Морз Ф. Колебания и звук. — М.-Л.: Гостехиздат, 1949.]
7. Morse P. M., Feshbach H., Methods of Theoretical Physics, Vol. 1, pp. 621ff, McGraw-Hill, New York, 1953. [Имеется перевод: Морз Ф., Фешбах Г. Методы теоретической физики, т. 1. — М.: ИЛ, 1958.]
8. Hansen W. W., Phys. Rev., 47, 139 (1935).
Новый тип разложения в задачах на излучение.
9. Casimir H. B. G. in: Old and New Problems in Elementary Particles (G. Puppi, ed.), pp. 73 — 79. Academic Press, New York, 1968.
О сверхэффективных антеннах.

- 9a. *Bosco B., Sacchi M. T.*, Ann. Phys. (N. Y.), Oct., 1981.
О проблеме обращения в классической электродинамике и теореме Казимира.
10. *Bouwkamp C. J., de Bruijn N. G.*, Phillips Research Reports, 1, 135 (1946).
Проблемы оптимума токового распределения антенны.
11. *Jauch J. M., Rohrlich F.*, The Theory of Photons and Electrons, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1955.
Теория фотонов и электронов.
12. *Beth R. A.*, Phys. Rev., 50, 115 (1936).
Механическое детектирование и измерение углового момента света.
13. *Stokes G. G.*, Trans. Cambridge Phil. Soc., 9, 399 (1852).
О слиянии и разложении потоков поляризованного света от различных источников. Этот формализм был также использован С. Чандрасекаром в его изящной монографии «Излучательный перенос» (Оксфорд, 1950).
14. *Poincaré H.*, Theorie Mathematique de la Lumière, Vol. 2, p. 92., G. Carré, Paris, 1892.
Математическая теория света.
15. *Mueller H.*, Memorandum on the Polarization Optics of the Photoelastic Shutter. Report 2, OSRD Project OEMsr-576-15, 1943.
Меморандум о поляризационной оптике фотоупругого затвора.
16. *Jones R. C.*, J. Opt. Soc. Amer., 37, 107 (1947).
Новое исчисление для рассмотрения оптических систем, V. Более общая формулировка и описание другого исчисления.
- 16a. *McMaster W. M.*, Rev. Mod. Phys., 33, 8 (1961).
Матричное представление поляризации.
- 16b. *Hamilton W. D. (ed)*, The Electromagnetic Interaction in Nuclear Spectroscopy, North-Holland, Amsterdam, 1975.
Электромагнитное взаимодействие в ядерной спектроскопии.
17. *Mie G.*, Ann. Physik, 25, 377 (1908).
К вопросу об оптике мутных сред, в особенности коллоидных металлорастворов.
18. *Franz W.*, Z. Physik, 127, 363 (1950).
Мультипольное излучение как задача на собственные значения.
19. *Blatt J. M., Wiesskopf V. F.*, Theoretical Nuclear Physics, New York, 1952. [Имеется перевод: *Бламм Дж., Вайскопф В.* Теоретическая ядерная физика. — М.: ИЛ, 1954.]
20. *Rose M. E., Biedenharn L. C.*, Rev. Mod. Phys., 25, 729 (1953).
Угловая корреляция ядерных излучений.
21. *Rose M. E.*, Multipole Fields, Wiley, New York, 1955. [Имеется перевод: *Роуз М.* Поля мультиполей. — М.: ИЛ, 1957.]
22. *French J.B., Shimamoto Y.*, Phys. Rev., 91, 898 (1953).
Теория мультипольного излучения.
23. *Jackson J. D.*, Classical Electrodynamics, Wiley, New York, 1962.
Классическая электродинамика.
24. *Corben H. C., Schwinger J.*, Phys. Rev., 58, 953 (1940).
Электромагнитные свойства мезотронов; см. Приложение.
25. *Gray C. G.*, Amer. J. Phys., 46, 169 (1978).
Мультипольные разложения полей при помощи потенциалов Дебая.
26. *Morette-de Witt C., Jensen J.H. D.*, Z. Naturforsch., 8a, 267 (1953).
О моменте импульса мультипольного излучения.
27. *Sommerfeld A.*, Partial Differential Equations in Physics, Academic Press, New York, 1949.
Дифференциальные уравнения в частных производных в физике.
28. *Hepp H., Jensen H.*, Sitzber. Heidelberg. Acad. Wiss. Math.-Naturw. Kl. 4 Abh., 89 (1971).
Классическая полевая теория поляризованного катодного излучения и ее квантование.

29. Biedenharn L. C., Louck J. D., The Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

7. Метод углового момента в формулировке квантовой механики на языке матрицы плотности

а. Предварительные сведения. Кроме обычной формулировки квантовой механики в терминах векторов гильбертова пространства существует другая формулировка на языке матрицы плотности [1]. Вместо представления физического состояния ψ при помощи вектора гильбертова пространства $|\psi\rangle$, теперь состояние представляется посредством оператора ρ_ψ , называемого «матрицей плотности состояния ψ », который задается в виде

$$\rho_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|/\langle\psi|\psi\rangle. \quad (7.7.1)$$

По построению оператор ρ_ψ является *идемпотентом*:

$$\rho_\psi \rho_\psi = \rho_\psi^2 = \rho_\psi. \quad (7.7.2)$$

Чтобы вновь получить стандартную формулировку квантовой механики, учитываем тот факт, что *амплитуда вероятности* измерить оператор A в состоянии ψ , т.е. $\langle\psi|A|\psi\rangle$, может быть записана в виде

$$\text{Амплитуда вероятности} \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle = \text{tr}(A\rho_\psi). \quad (7.7.3)$$

Более абстрактно можно ввести ортонормированный базис в гильбертовом пространстве, индексированный при помощи счетного множества $\{i = 1, 2, 3, \dots\}$, и считать ассоциированные ортогональные идемпотенты e_i полным набором коммутирующих операторов, собственные значения которых равны 1 или 0.

Вероятность того, что система, приготовленная в состоянии ψ , при измерении окажется в состоянии η , выражается в виде

$$\text{Вероятность} = \text{tr}(\rho_\psi \rho_\eta), \quad (7.7.4)$$

что после введения базиса (т.е. $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle$, $\psi_i \in \mathbb{C}$) дает

$$\text{tr}(\rho_\psi \rho_\eta) = \left| \sum_i \psi_i^* \eta_i \right|^2. \quad (7.7.5)$$

Замечание. Равенство (7.7.5) выражает *фундаментальное содержание квантовой механики*, поскольку оно демонстрирует «(неклассическую) интерференцию вероятностей» в противоположность классической формулировке вероятности, в рамках которой вместо (7.7.5) имеем

$$\begin{aligned} \text{Классическая вероятность} &= \sum_i (\text{вероятность найти } \psi \text{ в состоянии } i) \times \\ &\quad \times (\text{вероятность найти } \eta \text{ в состоянии } i) = \\ &= \sum_i |\psi_i|^2 |\eta_i|^2 = \sum_i |\psi_i^* \eta_i|^2. \end{aligned} \quad (7.7.6)$$

Этот аспект квантовой механики особо подчеркнул Фейнман [2]; тот факт, что равенство (7.7.5) есть единственный способ обобщения соотношения (7.7.6), является содержанием фундаментальной работы Йордана и фон Ноймана [3].

Введение понятия матрицы плотности мотивируется желанием иметь естественный способ описания квантовых систем, для которых имеется информация, меньшая, чем максимальная. (Неполяризованный свет, например, является некогерентной суперпозицией двух независимых поляризаций равной вероятности. В гильбертовом пространстве не существует вектора, который соответствовал бы этой системе.)

Матрицы плотности легко вписываются в эту ситуацию: определяется общая матрица плотности в виде

$$\rho = \sum_i p_i e_i \quad (7.7.7)$$

где $0 \leq p_i \leq 1$ и $\sum p_i = 1$. Здесь e_i образуют базис ортогональных идемпотентов: $e_i e_j = \delta_{ij} e_j$, $\text{tr } e_i = 1$, $\sum e_i = \mathbb{1}$.

Условие, что общая матрица плотности должна соответствовать *чистому состоянию*, т.е. вектору в гильбертовом пространстве, есть условие того, чтобы она была идемпотентом; в противном случае матрица плотности представляет *смешанное* (или некогерентное) *состояние*.

(С математической точки зрения понятие матрицы плотности эквивалентно понятию положительного линейного функционала. С этой точки зрения чистые состояния являются экстремальными точками выпуклой оболочки.)

Формулировка посредством матрицы плотности обладает следующим преимуществом. Она ясно показывает, что квантовая механика в действительности имеет дело не с векторами в гильбертовом пространстве, а с «лучами». Иначе говоря, как видно из (7.7.1), величина ρ_ψ инвариантна относительно умножения вектора $|\psi\rangle$ на ненулевую постоянную. Это наблюдение служит отправной точкой геометрического подхода к квантовой механике, в котором она трактуется как *проективная геометрия* [4].

Формулировка посредством матрицы плотности имеет тот недостаток, что в ней не выявляется то обстоятельство, что векторы гильбертова пространства образуют линейное многообразие.

Переход от формулировки квантовой механики в терминах гильбертова пространства к формулировке на языке матрицы плотности задается по существу равенством (7.7.1). Интересен вопрос об обратном переходе: имея идемпотент ρ , как можно получить соответствующий вектор $|\psi\rangle$? Ответ¹⁾ состоит в том, что

¹⁾ Продолжая эти рассуждения, можно заключить, что *формулировка на языке матрицы плотности на самом деле является более общей, чем формулировка в гильбертовом пространстве*, а не эквивалентна последней. Если алгебраическая структура, наложенная на операторы, неассоциативна и не вложима в ассоциативную алгебру, то идеалов (и, следовательно, волновых функций) может не существовать. Это имеет место для алгебры Йордана эрмитовых матриц 3×3 над числами Кэли (M_3^8) [5]. Этот пример в настоящее время представляет большой интерес как возможная модель для кварка [6, 7].

29. Biedenharn L. C., Louck J. D., The Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

7. Метод углового момента в формулировке квантовой механики на языке матрицы плотности

а. Предварительные сведения. Кроме обычной формулировки квантовой механики в терминах векторов гильбертова пространства существует другая формулировка на языке матрицы плотности [1]. Вместо представления физического состояния ψ при помощи вектора гильбертова пространства $|\psi\rangle$, теперь состояние представляется посредством оператора ρ_ψ , называемого «матрицей плотности состояния ψ », который задается в виде

$$\rho_\psi \equiv |\psi\rangle\langle\psi|/\langle\psi|\psi\rangle. \quad (7.7.1)$$

По построению оператор ρ_ψ является идемпотентом:

$$\rho_\psi \rho_\psi = \rho_\psi^2 = \rho_\psi. \quad (7.7.2)$$

Чтобы вновь получить стандартную формулировку квантовой механики, учитываем тот факт, что амплитуда вероятности измерить оператор A в состоянии ψ , т.е. $\langle\psi|A|\psi\rangle$, может быть записана в виде

$$\text{Амплитуда вероятности} \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle = \text{tr}(A\rho_\psi). \quad (7.7.3)$$

Более абстрактно можно ввести ортонормированный базис в гильбертовом пространстве, индексированный при помощи счетного множества $\{i = 1, 2, 3, \dots\}$, и считать ассоциированные ортогональные идемпотенты e_i полным набором коммутирующих операторов, собственные значения которых равны 1 или 0.

Вероятность того, что система, приготовленная в состоянии ψ , при измерении окажется в состоянии η , выражается в виде

$$\text{Вероятность} = \text{tr}(\rho_\psi \rho_\eta), \quad (7.7.4)$$

что после введения базиса (т.е. $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle$, $\psi_i \in \mathbb{C}$) дает

$$\text{tr}(\rho_\psi \rho_\eta) = \left| \sum_i \psi_i^* \eta_i \right|^2. \quad (7.7.5)$$

Замечание. Равенство (7.7.5) выражает фундаментальное содержание квантовой механики, поскольку оно демонстрирует «(неклассическую) интерференцию вероятностей» в противоположность классической формулировке вероятности, в рамках которой вместо (7.7.5) имеем

$$\begin{aligned} \text{Классическая вероятность} &= \sum_i (\text{вероятность найти } \psi \text{ в состоянии } i) \times \\ &\quad \times (\text{вероятность найти } \eta \text{ в состоянии } i) = \\ &= \sum_i |\psi_i|^2 |\eta_i|^2 = \sum_i |\psi_i^* \eta_i|^2. \end{aligned} \quad (7.7.6)$$

Этот аспект квантовой механики особо подчеркнул Фейнман [2]; тот факт, что равенство (7.7.5) есть единственный способ обобщения соотношения (7.7.6), является содержанием фундаментальной работы Йордана и фон Ноймана [3].

Введение понятия матрицы плотности мотивируется желанием иметь естественный способ описания квантовых систем, для которых имеется информация, меньшая, чем максимальная. (Неполяризованный свет, например, является некогерентной суперпозицией двух независимых поляризаций равной вероятности. В гильбертовом пространстве не существует вектора, который соответствовал бы этой системе.)

Матрицы плотности легко вписываются в эту ситуацию: определяется общая матрица плотности в виде

$$\rho \doteq \sum_i p_i e_i \quad (7.7.7)$$

где $0 \leq p_i \leq 1$ и $\sum p_i = 1$. Здесь e_i образуют базис ортогональных идемпотентов: $e_i e_j = \delta_{ij} e_j$, $\text{tr } e_i = 1$, $\sum e_i = \mathbb{I}$.

Условие, что общая матрица плотности должна соответствовать *чистому состоянию*, т.е. вектору в гильбертовом пространстве, есть условие того, чтобы она была идемпотентом; в противном случае матрица плотности представляет *смешанное* (или некогерентное) *состояние*.

(С математической точки зрения понятие матрицы плотности эквивалентно понятию положительного линейного функционала. С этой точки зрения чистые состояния являются экстремальными точками выпуклой оболочки.)

Формулировка посредством матрицы плотности обладает следующим преимуществом. Она ясно показывает, что квантовая механика в действительности имеет дело не с векторами в гильбертовом пространстве, а с «лучами». Иначе говоря, как видно из (7.7.1), величина ρ_ψ инвариантна относительно умножения вектора $|\psi\rangle$ на ненулевую постоянную. Это наблюдение служит отправной точкой геометрического подхода к квантовой механике, в котором она трактуется как *проективная геометрия* [4].

Формулировка посредством матрицы плотности имеет тот недостаток, что в ней не выявляется то обстоятельство, что векторы гильбертова пространства образуют линейное многообразие.

Переход от формулировки квантовой механики в терминах гильбертова пространства к формулировке на языке матрицы плотности задается по существу равенством (7.7.1). Интересен вопрос об обратном переходе: имея идемпотент ρ , как можно получить соответствующий вектор $|\psi\rangle$? Ответ¹⁾ состоит в том, что

¹⁾ Продолжая эти рассуждения, можно заключить, что *формулировка на языке матрицы плотности на самом деле является более общей, чем формулировка в гильбертовом пространстве*, а не эквивалентна последней. Если алгебраическая структура, наложенная на операторы, неассоциативна и не вложима в ассоциативную алгебру, то идеалов (и, следовательно, волновых функций) может не существовать. Это имеет место для алгебры Йордана эрмитовых матриц 3×3 над числами Кэли (M_3^8) [5]. Этот пример в настоящее время представляет большой интерес как возможная модель для кварка [6, 7].

кет-вектор $|\psi\rangle$ соответствует *правому идеалу*, порождаемому идемпотентом ρ , а левый идеал соответствует бра-вектору $\langle\psi|$.

Завершим эти предварительные замечания тем, что приведем уравнение Шредингера в том виде, который оно принимает в формулировке посредством матрицы плотности. Воспользовавшись соотношением (7.7.1) и линейностью, находим

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho] \equiv H\rho - \rho H. \quad (7.7.8)$$

(Заметим, что знак здесь *противоположен* знаку в уравнении движения Гейзенберга для операторов¹⁾.)

б. Статистические тензоры. Применение метода углового момента к понятию матрицы плотности основано на том факте, что угловой момент соответствует точной симметрии, а следовательно, вектор $|\psi\rangle$, так же как и ρ_ψ , должен допускать разложение по базису, связанному с угловым моментом. Такое разложение действительно всегда справедливо, но то обстоятельство, что угловой момент отвечает симметрии, означает, что для состояний в блоке с заданным угловым моментом $(-j \leq m \leq j)$ имеется общая (когерентная) временная зависимость. Из использования базиса $\{ |(\alpha)jm\rangle \}$ (гл. 3) для векторов $|\psi\rangle$ следует, что матрица плотности имеет вид

$$\rho_\psi = \{ \langle (\alpha')j'm' | \rho | (\alpha)jm \rangle \}. \quad (7.7.9)$$

и мы распространяем эту форму посредством линейности (7.7.7) на все ρ (смешанные состояния).

Далее, мы используем тот факт, что операторы Вигнера составляют ортонормированный операторный базис для всех отображений между подпространствами углового момента, входящими в описание ρ_ψ в базисе углового момента (см. разд. 21 и примечание 12 гл. 3). Здесь удобно ввести операторы, определяемые согласно

$$T_{\kappa}^{k, \lambda} \equiv (2k+1)^{\frac{1}{2}} D^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} k+\lambda & & \\ & 2k & \\ & & k+\kappa \end{pmatrix}, \quad (7.7.10)$$

где D — оператор размерности, который определяется на состоянии общего углового момента посредством $D|jm\rangle = (2j+1)|jm\rangle$. (В результате этой незначительной модификации оператора Вигнера размерностные множители удаляются из выражения для следа (3.462) гл. 3.) Таким образом, имеем

$$\text{tr}(T_{\kappa'}^{k', \lambda'} T_{\kappa}^{k, \lambda}) = \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{k' k}. \quad (7.7.11)$$

Соответственно мы получаем разложение оператора общей матрицы плотности (см. примечание 12 гл. 3)²⁾

¹⁾ Чтобы проверить согласованность, рассмотрим независимый от времени оператор ρ^v (шредингеровское представление). Тогда из уравнения (7.7.8) среднее $\langle \rho^v \rangle = \text{tr}(\rho \rho^v)$ имеет временную зависимость, задаваемую посредством $i\hbar(d/dt)\langle \rho^v \rangle = \text{tr}([H, \rho] \rho^v) = \text{tr}(\rho [\rho^v, H])$, что согласуется с равенством $i\hbar(d\rho^v/dt) = [\rho^v, H]$ в гейзенберговском представлении.

²⁾ Мы используем одно обозначение ρ как для матрицы плотности, так и для оператора, матричные элементы которого определяют матрицу плотности.

$$\rho(\alpha', \alpha) = \sum_{k, k'} q_k^{k, \alpha'}(\alpha', \alpha) T_k^{k, \alpha},$$

$$q_k^{k, \alpha'}(\alpha', \alpha, j) = \text{tr}(\rho(\alpha', \alpha) T_k^{k, \alpha \dagger}). \quad (7.7.12)$$

Параметры разложения $q_k^{k, \alpha'}(\alpha', \alpha, j)$ в (7.7.12), которые являются по существу редуцированными матричными элементами (см. соотношение (3.460) гл. 3), называются тензорными параметрами или иногда статистическими тензорами [8].

Этот подход наиболее полезен в случае, когда имеется лишь несколько угловых моментов. Проиллюстрируем это на примерах с одним угловым моментом.

Пример 1. Ориентация частицы со спином $1/2$ (система покоя)¹⁾.

Описание спина дается посредством двух состояний $|1/2, 1/2\rangle$ и $|1/2, -1/2\rangle$ (дополнительных параметров (α) в формуле (7.7.9) не требуется). В этом случае имеется четыре оператора Вигнера, отображающих $\mathcal{H}_{1/2}$ в себя: тождественный оператор и три оператора J_i собственно углового момента. Оператор матрицы плотности представляется эрмитовой матрицей 2×2 на базисе $\{|(1/2)m\rangle : m = \pm 1/2\}$. Таким образом, наиболее общей матричной формой оператора (7.7.9) является

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w}), \quad (7.7.13)$$

где $\mathbb{1}_2 = \sigma_0$ обозначает единичную матрицу 2×2 , а $\mathbf{w} = (w_1, w_2, w_3)$, $w_i = \text{tr}(\rho \sigma_i)$ обозначает поляризацию. Используя правило Дирака

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}),$$

можно вычислить произведение ρ^2 , что дает

$$\rho^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{1 + \mathbf{w} \cdot \mathbf{w}}{2} \right) \mathbb{1}_2 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w} \right]. \quad (7.7.14)$$

Поскольку $\text{tr}(\rho - \rho^2)$ с необходимостью неотрицателен, мы видим, что система находится в чистом состоянии $\rho^2 = \rho$ тогда и только тогда, когда $\mathbf{w} \cdot \mathbf{w} = 1$. Для неполяризованного состояния имеем $\mathbf{w} = 0$. Таким образом, совокупность всех состояний поляризации частицы со спином $1/2$ (в ее системе покоя) может быть представлена геометрически точками на поверхности и внутри единичной сферы в трехмерном пространстве (сферы Пуанкаре). Ортогональные чистые состояния являются диаметрально противоположными точками поверхности. Вращательная симметрия, из которой мы исходили, выражается в том, что множество состояний поляризации сферически-симметрично и все состояния имеют одинаковую энергию. Заметим, что хотя частица является спинором (кет-векторы при вращении на 2π меняют знак на противоположный), это свойство теряется в операторе ρ , состоящем только из (псевдо)векторного оператора $\mathbf{J} = (1/2)\boldsymbol{\sigma}$ и скалярного (единичного) оператора.

Физический смысл вектора $\mathbf{w}$ вытекает из соотношения (7.7.13): вектор поляризации для чистого состояния есть то пространственное направление, вдоль которого угловой момент имеет проекцию $+1/2$.

¹⁾ Более общий (релятивистский) случай обсуждается в разд. г.

Представление матрицы плотности в виде (7.7.13) приводит к простой трактовке ларморовской прецессии частицы со спином $1/2$ в однородном магнитном поле $\mathbf{B}$ (наличие поля *разрушает вращательную симметрию*; остаточная симметрия соответствует подгруппе $SO(2)$, состоящей из вращений вокруг направления магнитного поля). Магнитный момент $\mathbf{M}$ определяется квантовомеханически как оператор

$$\mathbf{M} = g\mu\mathbf{J} = \frac{1}{2}g\mu\boldsymbol{\sigma}, \quad (7.7.15)$$

где g — гиромагнитное отношение (безразмерная постоянная), а μ — соответствующий размерный множитель $eh/2mc$ (e и m — заряд и масса системы). Следовательно, гамильтониан H системы задается в виде

$$H = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} = -\frac{1}{2}g\mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (7.7.16)$$

Уравнение Шредингера (7.7.8) для этого гамильтониана дает уравнение движения для матрицы плотности

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = i\hbar \left(\frac{1}{2} \frac{d\mathbf{w}}{dt} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) = [H, \rho] = -\frac{i}{2}g\mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{w}, \quad (7.7.17)$$

и, таким образом, мы получаем из квантовомеханической формулировки в точности *классическое уравнение движения* для поляризации¹⁾:

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} = \gamma \mathbf{w} \times \mathbf{B}, \quad (7.7.18)$$

где $\gamma = g\mu/\hbar$ не зависит от $\hbar$.

Движение вектора поляризации $\mathbf{w}$ есть равномерная прецессия вокруг направления магнитного поля $\mathbf{B}$, при которой $\mathbf{w} \cdot \mathbf{B}$ постоянно. Введем новую систему отсчета, вращающуюся с угловой скоростью ω . Если $\partial/\partial t$ обозначает дифференцирование относительно этой вращающейся системы, то мы имеем

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{w}.$$

Следовательно, уравнение (7.7.18) переходит в

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \gamma \mathbf{w} \times (\mathbf{B} + \gamma^{-1}\boldsymbol{\omega}) \equiv \mathbf{w} \times \mathbf{B}_{\text{eff}}. \quad (7.7.18')$$

Здесь $\mathbf{B}_{\text{eff}}$ — эффективное магнитное поле во вращающейся системе отсчета. Выбирая для $\boldsymbol{\omega}$ частное значение²⁾ $\boldsymbol{\omega} = -\gamma\mathbf{B}$, находим, что $\mathbf{w}$ является *константой* в этой частной вращающейся системе. Эта процедура справедлива как квантовомеханически, так и классически и применима для частицы с общим спином j .

Использование вращающихся систем отсчета весьма полезно при рассмотрении экспериментов с молекулярными пучками (магнитный резонанс) и экспери-

¹⁾ Рассмотрение прецессии спина обычными методами квантовой механики весьма сложно [9]. В работе по ядерной индукции [10] Блох указал, что равенство (7.7.18) можно получить и без решения уравнения Шредингера, поскольку квантовомеханическое главное значение любой величины с течением времени в точности следует классическому уравнению движения (теорема Эренфеста). (См. также [11].)

²⁾ Здесь $\boldsymbol{\omega} = -\gamma\mathbf{B}$ — ларморовская частота.

ментов по ядерной индукции. Надлежащим выбором вращающейся системы отсчета можно более общие (экспериментально важные) конфигурации магнитного поля эффективно свести к статике (см. [11]). (Движение магнитного момента в меняющемся со временем магнитном поле обсуждается в разд. 3.)

Пример 2. Частица со спином j (система покоя).

Для частицы спина j базисными состояниями являются состояния углового момента $\{|jm\rangle: m = j, j-1, \dots, -j\}$, на которые натягивается пространство $\mathcal{H}_j$ (в соотношении (7.7.9) α не появляется). В этом случае имеется $(2j+1)^2$ операторов, отображающих $\mathcal{H}_j$ в себя, и в качестве последних можно выбрать операторы Вигнера $T_k^{k,0}$ ($k = 0, 1, \dots, 2j$; $\kappa = k, k-1, \dots, -k$), имеющие параметр сдвига $\Delta = 0$. Таким образом, обозначая через $T_k^{k,0}$ $(2j+1) \times (2j+1)$ -матрицу с элементами $\langle jm' | T_k^{k,0} | jm \rangle = \left(\frac{2k+1}{2j+1} \right)^{1/2} C_{mkm'}^{jkj}$, находим, что наиболее

общий вид матрицы плотности есть

$$\rho = \sum_{k=0}^j \sum_{\kappa} q_{\kappa}^k T_{\kappa}^{k,0}, \quad q_{\kappa}^k = \text{tr}(\rho T_{\kappa}^{k,0\dagger}). \quad (7.7.19)$$

Параметры q_{κ}^k называются *мультипольными тензорными параметрами*. Поскольку ρ эрмитово и имеет единичный след, имеется соответственно $(2j+1)^2 - 1$ свободных параметров. Ввиду того что $T_0^0 = (2j+1)^{-1/2} \times$ (единичная матрица) и T_{μ}^k ($k \neq 0$) являются бесследовыми, используя $\text{tr} \rho = 1$, находим $q_0^0 = (2j+1)^{-1/2}$.

Чтобы достичь физического понимания этой структуры, рассмотрим произвольный гамильтониан, действующий на пространстве $\mathcal{H}_j$; пусть H — представляющая этот гамильтониан эрмитова матрица. Такой гамильтониан не обязательно должен быть вращательно инвариантным, а тензорные параметры q_{κ}^k (для $k \neq 0$) должны теперь быть функциями времени.

Уравнение Шредингера (7.7.8) после введения в него выражения (7.7.19) для ρ превращается в совокупность линейных уравнений по параметрам q_{κ}^k . Имеем

$$i\hbar \frac{dq_{\kappa}^k}{dt} = \sum_{\kappa' \kappa''} \text{tr}(T_{\kappa'}^{k\dagger} [H, T_{\kappa''}^{k,0}]) q_{\kappa''}^{k,0} = \sum_{\kappa' \kappa''} \text{tr}(H [T_{\kappa'}^{k,0}, T_{\kappa''}^{k\dagger}]) q_{\kappa''}^{k,0}. \quad (7.7.20)$$

Чтобы сделать эту структуру более прозрачной, запишем ее в матричной форме, определив $\mathbf{q} = \text{col}(q_0^0, q_{+1}^1, q_0^1, q_{-1}^1, \dots)$. Тогда уравнение Шредингера (7.7.20) принимает вид

$$i\hbar \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \Omega \mathbf{q}. \quad (7.7.21)$$

где Ω — эрмитова матрица с строками и столбцами, нумеруемыми посредством пар $(k\kappa; k'\kappa')$. Более конкретно имеем

$$\Omega_{k\kappa; k'\kappa'} = \text{tr}(H [T_{\kappa}^{k,0}, T_{\kappa'}^{k'\dagger}]). \quad (7.7.22)$$

Для дальнейшего рассмотрения структуры заметим, что матрицы Вигнера $T_{\kappa}^{k,0}$ обладают определенными алгебраическими свойствами. Действительно, про-

изведение в (7.7.22) с помощью свойства симметрии $T_{\kappa}^{k\ddagger} = (-1)^{\kappa} T_{-\kappa}^k$ и свойства произведения (см. соотношение (3.350) гл. 3) приводится к сумме

$$T_{\kappa}^k T_{\kappa'}^{k'} = \sum_{k''\kappa''} (-1)^{2j+k''} [(2k+1)(2k'+1)]^{\frac{1}{2}} C_{\kappa\kappa'\kappa''}^{kk'k''} \left\{ \begin{matrix} k & k' & k'' \\ j & j & j \end{matrix} \right\} T_{\kappa''}^{k''} \quad (7.7.23)$$

Поэтому коммутатор имеет вид

$$[T_{\kappa'}^k, T_{\kappa}^k] = \sum_{k''\kappa''} (k'\kappa'; k\kappa)^{k''\kappa''} T_{\kappa''}^{k''}, \quad (7.7.24)$$

где *структурные константы* определяются следующим образом:

$$(k'\kappa'; k\kappa)^{k''\kappa''} \equiv (-1)^{2j+k''} [(-1)^{k+k'-k''} - 1] \times [(2k+1)(2k'+1)]^{\frac{1}{2}} C_{\kappa\kappa'\kappa''}^{kk'k''} \left\{ \begin{matrix} k & k' & k'' \\ j & j & j \end{matrix} \right\}. \quad (7.7.25)$$

(Это те же структурные константы, которые обозначены через $A_{\kappa'\kappa\kappa''}^{k'kk''}$ в разд. 5, см. формулу (7.5.185).)

Структурные константы (7.7.25), если их нормировать обычным образом, являются в точности структурными константами $[(2j+1)^2 - 1]$ генераторов $\{T_{\nu}^k\}$ группы Ли $SU(2j+1)$. Общее движение в пространстве тензорных параметров q , индуцированное общим гамильтонианом, является соответственно унитарным «вращением» (см. [12]).

Матрицу Ω , индуцирующую это преобразование, можно теперь представить через генераторы $\{T_{\kappa}^k\}$ с помощью структурных констант (7.7.25):

$$\Omega_{k\kappa, k'\kappa'} = \sum_{k''\kappa''} (-1)^{\kappa} (k'\kappa'; k, -\kappa)^{k''\kappa''} \text{tr}(H T_{\kappa''}^{k''}). \quad (7.7.26)$$

Таким образом, генераторы, входящие в Ω , зависят от разложения H по операторному базису $\{T_{\kappa}^k\}$.

Интересно заметить, что свойства симметрии коэффициентов Вигнера $C_{\kappa\kappa'\kappa''}^{kk'k''}$, появляющихся в (7.7.25), самым непосредственным образом показывают, что подмножество генераторов $\{T_{\kappa}^k; k \text{ нечетное}\}$ замыкается и образует подгруппу. Для целочисленного j это дает подгруппу вращения $SO(2j+1)$; для полупелочисленного j это дает симплектическую подгруппу $Sp(2j)$. Таким способом при помощи функций углового момента достигается единообразное представление генераторов и структурных констант унитарных, ортогональных и симплектических групп Ли [12, 13].

Этот общий подход к квантовой механике частиц, обладающих угловым моментом j , оказывается весьма полезным при построении моделей в атомной и ядерной спектроскопии, как обсуждается в разд. 5 и 9.

Гамильтониан взаимодействия для однородного магнитного поля сильно упрощает приведенный выше общий результат. Для этого частного случая гамильтониан принимает вид

$$H = -g\mu J \cdot B, \quad (7.7.27)$$

где, как и выше, g и μ — гиромагнитное отношение и соответствующий магнетон. Поскольку оператор J классифицирует тензорные операторы $T_{\kappa}^{k,\Delta}$ как мульт-

типольные операторы, он оставляет индекс k без изменения. Соответственно коммутатор $[H, T_k^*]$ в соотношении (7.7.20) также оставляет этот индекс инвариантным. Следовательно, для векторного мультипольного момента для спина j , $q_k^{(1)} = \{q_k^1\}$, выполняется то же уравнение движения (7.7.17), что и для частного случая $j = 1/2$, как было установлено выше.

в. Геометрическое описание матриц плотности для чистых состояний спина j . Геометрическое описание может быть очень полезным для развития интуитивного понимания множества чистых состояний (система покоя) частицы спина j .

Для множества чистых состояний при $j = 1/2$ геометрическую картину легко найти (в этом состоит содержание рассмотренного выше примера 1), но мы поступим более формально и воспользуемся способом, который поддается обобщению. Чистые состояния для спина $1/2$ описываются двухкомпонентными кет-векторами; из этого следует, что чистые состояния характеризуются двумя комплексными числами. Но матрица плотности (7.7.1) инвариантна по отношению к умножению кет-вектора на произвольное *ненулевое* комплексное число; это редуцирует пространство $\mathbb{C}^2$ (пространство пар комплексных чисел) к *проективному пространству* $\mathbb{C}P^1$. Стандартной моделью этого пространства является сферическая поверхность S^2 — риманова сфера.

Следовательно, этим способом мы получаем известный результат: *чистые состояния для $j = 1/2$ могут быть охарактеризованы точками сферы S^2 .*

Обобщим теперь этот результат. Для чистых состояний спина j кет-векторы имеют $(2j + 1)$ компонент; поэтому соответствующим пространством является $\mathbb{C}^{2j+1}$. Инвариантность матрицы плотности относительно умножения кет-векторов на ненулевое комплексное число определяет отношение эквивалентности на кет-векторах: кет-вектор $(a_1, a_2, \dots, a_{2j+1})$ эквивалентен кет-вектору $(b_1, b_2, \dots, b_{2j+1})$, если $a_i = \lambda b_i$, где λ — ненулевое комплексное число. Получаемое пространство неэквивалентных чистых состояний есть множество точек проективного пространства, обозначаемых через $\hat{\mathbb{C}}^{2j+1}$.

Майорана [14] дал геометрическую реализацию пространства $\hat{\mathbb{C}}^{2j+1}$ как «созвездия» $2j$ точек на сфере S^2 . (Точки в «созвездии» не обязательно все должны быть различными.)

Доказательство. Наиболее компактное доказательство (см. [14]) сводится к наблюдению, что угловой момент j всегда может быть записан как полностью симметричная композиция $2j$ кинематически независимых угловых моментов спина $1/2$, каждый из которых характеризуется точкой сферы S^2 .

Более информативный вариант этого доказательства (фактически эквивалентный¹⁾) был дан в работе Бакри [15]. Рассмотрим набор P_{2j} ненулевых однородных полиномов степени $2j$ от двух комплексных переменных. Каждому полиному из P_{2j} мы можем сопоставить элемент из $\mathbb{C}^{2j+1}$ при помощи биективного отображения:

$$(a_1, a_2, \dots, a_{2j+1}) \leftrightarrow a_1 x^{2j} + a_2 x^{2j-1} y + \dots + a_{2j+1} y^{2j}.$$

¹⁾ На самом деле Майорана [14] указал в точности это алгебраическое доказательство.

Согласно фундаментальной теореме алгебры, полиномы P_{2j} допускают факторизацию на произведение $2j$ однородных линейных множителей. Таким образом, каждый элемент из P_{2j} мы можем записать как произведение $2j$ элементов из P_1 . Однако эта факторизация неединственна: 1) мы можем переставлять множители и 2) мы можем умножить любые два множителя на λ и λ^{-1} соответственно. Чтобы устранить первую из этих возможностей, мы рассматриваем только полностью симметричные факторизации, чтобы устранить вторую — вводим то же отношение эквивалентности на P_{2j} , что и приведенное к $\hat{\mathbb{C}}^{2j+1}$, и рассмотрим проективное пространство $\hat{P}_{2j}$. Тогда из теоремы о корнях полиномов следует, что $\hat{P}_{2j}$ изоморфно полностью симметризованному произведению $(P_1)^{2j}$. Из отображения $\hat{\mathbb{C}}^{2j+1} \rightarrow \hat{P}_{2j}$ устанавливаем результат Майораны. ■

Имея эту геометрическую модель для чистых состояний, мы можем исследовать вопрос о том, каким образом пространственные вращения действуют на матрицы плотности чистого состояния. С этой целью рассмотрим модельный пример действия группы $(SO(3) \text{ а не } SU(2))$, как мы видели из примера 1), на многообразии¹⁾ (созвездия на S^2). Для удобства мы будем пользоваться некоторыми понятиями и терминологией этого более общего подхода.

Первым полезным понятием является понятие *стационарной группы* (называемой также группой изотропии или в физике «малой группой»). Стационарная группа G_m есть та подгруппа группы G , которая оставляет заданную точку m многообразия инвариантной.

Орбита есть множество точек многообразия, которые переводятся одна в другую под действием преобразований из группы. Можно показать, что для любых двух точек m и m' заданной орбиты соответствующие стационарные подгруппы взаимно сопряжены: $G_{m'} = g^{-1}G_m g$ для некоторого элемента g .

Наконец, введем понятие *слоя* (страта). Слой определяется как объединение точек, стационарные подгруппы которых сопряжены. Слой с необходимостью является объединением орбит; любые две точки орбиты имеют сопряженные стационарные подгруппы, но точки с сопряженными стационарными подгруппами не обязательно должны лежать на одной и той же орбите.

Чтобы проиллюстрировать эти понятия, рассмотрим в качестве примера матрицы плотности чистого состояния для $j = 1$; геометрической моделью является пара точек на поверхности единичной сферы в трехмерном пространстве. Для пары точек наиболее общей конфигурацией является пара точек, разделенных дугой длины Ω (с $0 \leq \Omega \leq \pi$) на поверхности сферы. Имеются следующие три слоя.

1. Для $\Omega = 0$ две точки соединяются. Стационарной подгруппой этого «созвездия» является $SO(2)$ — группа вращений вокруг оси, проходящей через двойную точку. Слой состоит из одной орбиты (изоморфной однородному пространству $SO(3)/SO(2)$) — поверхности сферы (поскольку двойную точку можно перевести в любую точку на поверхности некоторым вращением). Этот слой двумерен.

¹⁾ Изучения действия групп на многообразия приобретает всевозрастающее значение в физике. Полезное и ясное введение для физиков можно найти в работе [16] и в цитируемой там литературе.

2. Для $\Omega = \pi$ две точки являются диаметрально противоположными (антиподальными). Стационарная подгруппа теперь несколько больше — это группа $SO(2) \times Z_2$, состоящая из вращений вокруг оси, проходящей через эти две точки, и инволюции (вращающей на π вокруг оси, перпендикулярной диаметру, определяемому этими двумя точками). Слой также представляет собой одну орбиту (изоморфную $SO(3)/SO(2) \times Z_2$), которая состоит из *половины* поверхности сферы (антиподальные точки отождествляются). Этой слой также двумерен.

3. Для $0 < \Omega < \pi$ мы получаем общий слой. Стационарной подгруппой является Z_2 , порождаемая вращением на угол π , которое дает взаимную замену двух точек; Ω параметризует непрерывное множество орбит, принадлежащих этому слою; каждая орбита является трехмерной $[SO(3)/Z_2]$. Этот слой соответственно четырехмерен.

Для полноты заметим, что чистые состояния для $j = 1/2$ образуют один слой одной двумерной орбиты $[SO(3)/SO(2)]$.

Интересно рассмотреть слой, к которому принадлежат три базисных состояния для $j = 1$. Состоянию $j = 1, m = 1$ сопоставляется симметричное произведение $|1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle$. Ясно, что это состояние принадлежит слою (1), так же как состояние $j = 1, m = -1$ на той же орбите (эти два состояния часто называют «поляризованными по кругу»). Состояние $j = 1, m = 0$, как можно видеть, принадлежит слою (2). (Это состояние называют «продольно поляризованным».)

Замечания. а) Тот факт, что чистые состояния для $m = \pm 1$ и для $m = 0$ лежат на различных орбитах (а также и в различных слоях), весьма примечателен. В частности, он показывает, что в общем случае вращения, которое преобразовывало бы любые два чистых состояния (каждое из которых характеризуется заданным значением m) одно в другое, *не существует*. (Ошибочное обратное утверждение делается в некоторых учебниках по квантовой механике.) *Вращательная неэквивалентность* совокупности чистых состояний для $j = 1$ представляется в известном смысле удивительной, поскольку три направления $\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3$ эквивалентны, а « z -направление» (сферическая гармоника Y_{10}) соответствует чистому состоянию (в слое (2)).

Для частного случая $j = 1/2$ все чистые состояния действительно эквивалентны относительно вращения (имеется только одна орбита). Из этого частного случая легко видеть, откуда возникает недоразумение, поскольку чистое состояние для $j = 1/2$ находится в соответствии с направлением (единичный вектор w в равенстве (7.7.13)), соответствующим тому направлению, вдоль которого чистое состояние имеет значение $m = 1/2$. Интересно заметить (см. [12]), что имеется аналог этого утверждения для $j = 1/2$, который *обобщается на все j* : для *любого чистого состояния существует такое вращение, что вращаемый вектор состояния не имеет компоненты с точно определенным значением m* . (Для $j = 1/2$ это утверждение эквивалентно предыдущему определению чистого состояния.) Вейлевское каноническое обозначение векторов состояния в $SU(2j+1)$ фактически представляет собой систематическое использование этого свойства.

б) Тензорные параметры для матрицы плотности чистого состояния со спином j определены в (7.7.19); все эти параметры имели сдвиг Δ , равный нулю, и их логично называть «мультипольными моментами матрицы плотности». По-

сколько имеется $2j$ мультиполей ($k = 1, 2, \dots, 2j$, опуская единичный оператор в силу условия на след), то число параметров равно $2j(2j + 2)$; для чистого состояния только $4j$ параметров могут быть независимыми. Вследствие теоремы Вигнера — Эккарта любое измерение, производимое над этой системой посредством произвольного (наблюдаемого) тензорного оператора, пропорционально измерению соответствующего мультипольного оператора (оператора Вигнера). Для векторных операторов неудивительно, что достаточно одного множителя пропорциональности (например, гиромагнитного отношения для магнитных дипольных операторов). Но удивительно то, что, например, для квадрупольных операторов достаточно *одного* множителя пропорциональности; из классического подхода известно, что собственная (вращательно инвариантная) классификация квадрупольных операторов содержит *два* параметра, а не один. Чем объясняется это различие?

Ответ сводится к тому, что исходное предположение о том, что состояние является чистым (с точным значением j) означает, согласно принципу неопределенностей, что чистые состояния «цилиндрически симметричны» (относительно оси углового момента, если это можно определить в классическом подходе). Вайскопфу принадлежит афоризм, касающийся этой ситуации: «футбольный мяч может быть в чистом состоянии с точным j , но если это так, вы не сможете увидеть шнуровку».

в) Обсуждение геометрического описания мы ограничили чистыми состояниями преимущественно потому, что приемлемые общие результаты неизвестны. Для случая $j = \frac{1}{2}$ общая матрица плотности геометрически описывается одним вектором w ; из равенства $\|w\| = 1$ следует чистое состояние, а $\|w\| = 0$ означает неполяризованное состояние. Общий случай (спина j) соответствует многообразию с $[(2j + 1)^2 - 1]$ измерениями, и (как указано в примере 2) наиболее общими операторами, действующими на систему, являются генераторы группы $SU(2j + 1)$.

Поляризационная область такой общей структуры лишь недавно стала представлять физический интерес, частично в связи с необходимостью критической оценки справедливости измерений поляризации в физике элементарных частиц [17].

г. *Матрица плотности для релятивистской массивной частицы со спином j .* Принципиальное различие между релятивистской и нерелятивистской областями (симметрия относительно группы Пуанкаре либо галилеева симметрия) заключается в кинематической трактовке спина. Для частицы с ненулевой массой релятивистское описание выделяет специальную систему отсчета — систему покоя, в которой описание спиновых свойств точно такое же (гильбертово пространство размерности $(2j + 1)$), как в нерелятивистском случае. Следовательно, предыдущее обсуждение матрицы плотности для массивной частицы спина j справедливо как в релятивистской, так и в нерелятивистской области.

Необходимо, однако, рассматривать спиновую матрицу плотности для массивной ($m \neq 0$) частицы в произвольной системе отсчета, а не в одной только системе покоя. Это обусловлено не просто стремлением к общности, но вполне практической причиной: необходимо иметь возможность рассматривать двухча-

стичные реакции. Для двухчастичных реакций составная система, образуемая в реакции, описывается как «частица», которая (в ее системе покоя, определяемой из соотношения $P_{\text{total}} = 0$) характеризуется (пуанкаре-симметрия) массой и спином. Чтобы применить закон сохранения углового момента к этой составной системе, необходимо уметь описывать угловые моменты (и, следовательно, спин) налетающей (а также появляющейся в результате реакции) частицы в самой общей системе отсчета (системе отсчета для каждой частицы, движущейся относительно системы покоя составной системы). Соответственно кинематические аспекты спина, которые учитываются пуанкаре-симметрией, имеют решающее значение при рассмотрении реакций.

Рассмотрим частицу массы m и спина j . Эти две (пуанкаре-инвариантные) характеристики являются собственными значениями двух инвариантных операторов, которые мы теперь опишем. Первым инвариантом является

$$P_\mu P^\mu = P \cdot P \rightarrow m^2, \quad (7.7.28)$$

где P_μ — операторы 4-импульса, генерируемые подгруппой трансляции. Вторым инвариант

$$W_\mu W^\mu = W \cdot W \rightarrow m^2 j(j+1), \quad (7.7.29)$$

где

$$W_\alpha \equiv e_{\alpha\beta\gamma\delta} P^\beta M^{\gamma\delta}, \quad (7.7.30)$$

$M^{\gamma\delta}$ — генераторы подгруппы Лоренца.

Четыре-векторный оператор W_μ ввел Паули (см. [18]); его часто называют оператором Паули — Любанского. Имеется и другое, более описательное название для W_μ , а именно *поляризационный оператор*; смысл такого названия будет ясен из дальнейшего.

Операторы P_μ и W_μ коммутируют и удовлетворяют операторному условию $P \cdot W = 0$. Операторы P_μ и W_μ одновременно наблюдаемы, однако наблюдаемость компонент W_μ (в отличие от P_μ) ограничена, поскольку компоненты W_μ не коммутируют:

$$[W_\alpha, W_\beta] = ie_{\alpha\beta\gamma\delta} P^\gamma W^\delta. \quad (7.7.31)$$

Было бы желательно получить надлежащий аналог (3-векторного) оператора спина S , существующего в системе покоя и имеющего собственное значение $S^2 \rightarrow j(j+1)$. Это можно осуществить, если ввести для состояния частицы с фиксированной энергией-импульсом $P_\mu \rightarrow p_\mu$ ортонормированную *тетраду* $\{n_\mu^{(\alpha)}(p)\}$. Эта тетрада состоит из четырех ортонормальных 4-векторов (которые являются функциями числового¹⁾ 4-вектора p_μ), удовлетворяющих условиям

$$n^{(\alpha)} \cdot n^{(\beta)} = g^{\alpha\beta}, \quad (7.7.32)$$

$$e^{\lambda\mu\nu\rho} n_\lambda^{(\alpha)} n_\mu^{(\beta)} n_\nu^{(\gamma)} n_\rho^{(\delta)} = -e^{\alpha\beta\gamma\delta}. \quad (7.7.33)$$

¹⁾ Важно помнить, что тетрада состоит из числовых векторов, а не из операторов; использование таких конструкций допустимо только на специальном подмножестве векторов, имеющих фиксированные значения p_μ в качестве собственных значений операторов 4-импульса P_μ .

Второе соотношение выражает условие, что тетрада должна быть правосторонней (ориентированной).

Определим теперь 4-векторные поляризационные операторы по отношению к тетрадным координатам, т.е.

$$W^{(\alpha)} = n^{(\alpha)}(p) \cdot W. \quad (7.7.34)$$

Эти тетрадные компоненты $W^{(\alpha)}(p)$ удовлетворяют соотношениям

$$W \cdot W = \sum_{\alpha\beta} W^\alpha W^\beta g_{\alpha\beta} \rightarrow m^2 j(j+1). \quad (7.7.35)$$

Учитывая тот факт, что мы рассматриваем массивную частицу, можно выбрать один тетрадный вектор таким, чтобы он был кратным числовому 4-вектору импульса, т.е.

$$n_\mu^{(0)} = m^{-1} p_\mu. \quad (7.7.36)$$

В результате имеем $W^{(0)} = 0$. Удобно ввести другие обозначения для трех исчезающих компонент W_μ :

$$S^{(i)} \equiv -n^{(i)} \cdot W/m. \quad (7.7.37)$$

Тогда из коммутационных соотношений для поляризационного оператора W следует, что тетрадные компоненты $S^{(i)}$ являются искомыми операторами спина, т.е.

$$[S^{(i)}, S^{(j)}] = ie_{ijk} S^{(k)}. \quad (7.7.38)$$

При помощи этих тетрадных спиновых операторов $\{S^{(i)}\}$ можно теперь получить совокупность «тетрадных мультипольных операторов», $T^k(p)$, для $k = 0, 1, \dots, 2j$. Это следует из того, что различные произведения $S^{(i_1)} \dots S^{(i_r)}$ являются приводимыми с помощью коэффициентов Рака к мультипольным операторам. Соответственно структура спиновой матрицы плотности (как обсуждалось в предыдущих разделах) может быть теперь перенесена посредством тетрадного формализма на общий случай (см. замечание ниже).

Подробное обсуждение поляризации в релятивистской области дано в обширной работе Донсела и др. [17], к которой мы и отсылаем читателя за дальнейшими подробностями.

Замечание. Для уравнения Дирака имеется особый метод, связанный с существованием дифференциального уравнения первого порядка Дирака $(\gamma \cdot P + m)\psi = 0$. Определяют (числовой) поляризационный 4-вектор S_μ (см. [18a]), такой, что $S \cdot p = 0$, $S \cdot S = -1$ (здесь $P_\mu \rightarrow p_\mu$ и $p \cdot p = m^2$). Тогда 4×4 -матрица плотности (в пространстве γ -матриц) дается (идемпотентным) оператором ρ :

$$\rho = (4m)^{-1} (\gamma \cdot p + m)(1 - \gamma_5 \gamma \cdot S). \quad (7.7.39)$$

(Заметим, что $\gamma_5 \gamma \cdot S$ коммутирует с $\gamma \cdot p$).

Это представляет собой распространение метода, введенного Казимиром для облегчения вычислений, связанных с уравнением Дирака, при помощи следов. Этот вопрос уже стал стандартным в учебниках; см., например, [19 — 21].

д. *Частный случай безмассовых частиц.* Для безмассовых частиц система покоя отсутствует, и использованная выше специальная тетрада (предполагающая $W^{(0)} = 0$) неприемлема. Но тетрадный формализм по-прежнему работает. Для светоподобного 4-вектора импульса p_μ ($p \cdot p = 0$, $p \neq 0$) мы берем тетраду

$\mathbf{p} \cdot \mathbf{n}^{(0)} = E = \mathbf{p} \cdot \mathbf{n}^{(3)}$. Из равенства $\mathbf{P} \cdot \mathbf{W} = 0$ следует, что $W^0 + W^{(3)} = 0$, так что тетрадная компонента $W^{(0)}$ поляризационного вектора может быть исключена.

Остальные три тетрадные компоненты $W^{(i)}$, $i = 1, 2, 3$, генерируют евклидову группу $E(2)$: $W^{(1)}$ и $W^{(2)}$ порождают трансляции, а $W^{(3)}$ — вращения. Собственное значение инвариантного оператора $\mathbf{W} \cdot \mathbf{W}$ определяет два случая: а) $\mathbf{W} \cdot \mathbf{W}$ — ненулевое отрицательное число и б) $\mathbf{W} \cdot \mathbf{W} = 0$. Первый случай (случай «бесконечного» спина), по-видимому, физически не реализуется [22].

Во втором случае $\mathbf{W} \cdot \mathbf{W} = 0$ имеются три инвариантных условия на собственные значения (подпространства): $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P} \cdot \mathbf{W} = \mathbf{W}^2 = 0$, из которых вытекает, что $\mathbf{W} = \lambda \mathbf{P}$. Поскольку поляризация $\mathbf{W}$ есть псевдовектор, а импульс $\mathbf{P}$ — вектор, то это отождествляет спиральность λ с псевдоскаляром. Если оператор пространственного отражения является симметрией, то возникает два значения $\pm \lambda$. Таким образом, для фотонов и гравитонов находим ± 1 и ± 2 соответственно. Для нейтрино и антинейтрино находим $-\frac{1}{2}$ и $+\frac{1}{2}$ соответственно, поскольку четность не является симметрией; эти частицы всегда поляризованы на 100%. (Мы рассмотрели поляризационные свойства фотонов в связи с общей формулировкой на языке матрицы плотности, применимой к электромагнитному излучению (в разд. 6).

Имеется обширная литература по угловым распределениям (и явлениям поляризации) в связи со слабыми взаимодействиями (нейтрино и т.п.), обсуждать которые здесь мы не имеем возможности [23].

е. Связывание статистических тензоров. Важное приложение метода углового момента к матрице плотности выражается, как обсуждалось выше, в приведении матрицы плотности посредством характеристических операторов структуры углового момента. Это привело к понятию статистического тензора. Второе важное применение метода углового момента заключается в связывании тензорных операторов (а следовательно, и статистических тензоров), чтобы выполнялось общее сохранение углового момента связанных систем.

Чтобы понять этот аспект связывания, рассмотрим две различные системы 1 и 2, которые связываются в третью систему. Следовательно, имеем (см. разд. 12 гл. 3)

$$|(\alpha_1)j_1m_1\rangle \otimes |(\alpha_2)j_2m_2\rangle \xrightarrow{\text{вигнеровское связывание}} |(\alpha_1\alpha_2j_1j_2)jm\rangle. \quad (7.7.40)$$

Здесь (α) обозначает, как обычно, совокупность квантовых чисел, отличных от j, m, j, m .

Предположим, что нам заданы два набора статистических тензоров (обобщенных мультипольных моментов), характеризующих системы 1 и 2. Что можно заключить о статистических тензорах связанной системы? Таким образом, известны коэффициенты $(\alpha'_i j'_i | \rho_i | \alpha_j j_j)_{\kappa_i}^{k_i}$ в разложении

$$\langle (\alpha'_i)j'_i m'_i | \rho_i | (\alpha_j)j_j m_j \rangle = \sum_{\kappa_i, \kappa_j} (\alpha'_i j'_i | \rho_i | \alpha_j j_j)_{\kappa_i}^{k_i} C_{m'_i m_j \kappa_j}^{j'_i j_j \kappa_i}, \quad (7.7.41)$$

и мы хотим найти коэффициенты в разложении матрицы плотности тензорного произведения:

$$\begin{aligned} \langle (\alpha'_1 \alpha'_2 j'_1 j'_2) j' m' | \rho_1 \otimes \rho_2 | (\alpha_1 \alpha_2 j_1 j_2) j m \rangle \\ = \sum_{\kappa_1, \kappa_2} (\alpha'_1 \alpha'_2 j'_1 j'_2 j' | \rho_1 \otimes \rho_2 | \alpha_1 \alpha_2 j_1 j_2 j)_{\kappa}^k C_{m' m \kappa}^{j'_1 j'_2 j_1 j_2 j} \end{aligned} \quad (7.7.42)$$

Следуя методу, использованному при выводе соотношения (3.248) в гл. 3, находим

$$\begin{aligned}
 & (\alpha'_1 \alpha'_2 j'_1 j'_2 j' | \rho_1 \otimes \rho_2 | \alpha_1 \alpha_2 j_1 j_2 j)_k \\
 &= \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ \kappa_1 \kappa_2}} [(2j+1)(2k+1)(2j'_1+1)(2j'_2+1)]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \\ j'_1 & j'_2 & j' \end{matrix} \right\} \\
 & \times (\alpha'_1 j'_1 | \rho_1 | \alpha_1 j_1)_{\kappa_1}^{k_1} (\alpha'_2 j'_2 | \rho_2 | \alpha_2 j_2)_{\kappa_2}^{k_2} C_{\kappa_1 \kappa_2 k}^{k_1 k_2 k}. \quad (7.7.43)
 \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что последняя формула имеет следующую структуру:

а) Компоненты $(k_1 \kappa_1)$ и $(k_2 \kappa_2)$ статистических тензоров для матриц плотности ρ_1 и ρ_2 систем 1 и 2 являются *вигнеровски связанными* (что дает величины k, κ), которые ввиду баланса индексов являются параметрами в левой части);

б) *Универсальной функцией углового момента*, которая осуществляет связывание остальных квантовых чисел углового момента, является $9j$ -символ, или, что то же самое, X -коэффициент Фано и Рака [24], которые впервые подчеркивали этот аспект задачи.

Результат, выраженный формулой (7.7.43), есть наиболее сложный результат, необходимый в любом приложении теории. Либо самой формулы (7.7.43) оказывается достаточно для желаемого приложения, а если нет, то достаточно последовательности связываний¹⁾ (с применением равенства (7.7.43) для осуществления каждого шага). С этой точки зрения введение высших $3nj$ -коэффициентов представляется излишним и полезно только при весьма специальных обстоятельствах.

В разд. 8 формула (7.7.43) применяется для рассмотрения угловых корреляций.

ж. Некоторые примеры, иллюстрирующие формулу связывания. Для лучшего понимания физического смысла столь сложного результата, как формула (7.7.43), рассмотрим теперь несколько упрощенных случаев.

1. Для начала предположим, что для системы 1 матрица плотности ρ_1 содержит *минимальную* информацию (заметим, что в (7.7.43) системы 1 и 2 играют совершенно эквивалентные роли). Такое состояние минимальной информации является полностью случайным и имеет значения статистических тензоров

$$(\alpha'_1 j'_1 | \rho_1 | \alpha_1 j_1)_{\kappa_1}^{k_1} = \delta_{k_1 0} \delta_{\kappa_1 0} \delta_{\alpha'_1 \alpha_1} \delta_{j'_1 j_1} \frac{1}{\sqrt{2j_1 + 1}}. \quad (7.7.44)$$

Поскольку в последнем выражении k_1 ограничено числом 0, соответствующий $9j$ -символ приводится к $6j$ -символу (функции Рака) с помощью результатов, приведенных в гл. 3, т.е. (3.325):

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ 0 & k_2 & k \\ j_1 & j'_2 & j' \end{matrix} \right\} = (-1)^{j_1 + j_2 + j' + k} \delta_{k_2 k} [(2k+1)(2j_1+1)]^{-\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ k & j' & j'_2 \end{matrix} \right\}. \quad (7.7.45)$$

¹⁾ Связывание одной и той же системы с собой приводит к аналогичным результатам (см. обсуждение в разд. 17 гл. 3).

Следовательно, для связанных статистических тензоров получаем результат

$$\begin{aligned}
 & (\alpha'_1 \alpha'_2 j'_1 j'_2 j' | \rho_1 \otimes \rho_2 | \alpha_1 \alpha_2 j_1 j_2 j)_k^k \\
 &= \delta_{\alpha_1 \alpha_1'} \delta_{j_1 j_1'} (-1)^{j_1 + j_2 + j' + k} \left[\frac{(2j + 1)(2j'_2 + 1)}{(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 & \times (\alpha'_2 j'_2 | \rho_2 | \alpha_2 j_2)_k^k \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ k & j' & j'_2 \end{matrix} \right\}. \quad (7.7.46)
 \end{aligned}$$

Вспоминая, что $6j$ -коэффициенты представляют собой вещественные числа величиной от 0 до 1, мы видим, что статистические тензоры для связанной системы *уменьшились* (если они изменились) по сравнению с соответствующими значениями для системы 2.

Для выражения этой интерпретации $6j$ -коэффициенты иногда называют *деполяризационными множителями*. Связывание системы с угловой информацией с системой, не имеющей информации (случайной системой), частично деполяризует составную систему. Наиболее широкое применение такие понятия находят при изучении возмущенных угловых корреляций, когда посторонние влияния (например, внутрикристаллические поля в микрокристаллических системах) стремятся ослабить корреляцию. Этот предмет, имеющий многочисленные отвлечения, является одним из наиболее важных современных приложений формализма углового момента (см. [25] и цитированную там обширную литературу).

2. В качестве другого примера, иллюстрирующего значение формулы связывания, рассмотрим энергию электромагнитного взаимодействия ядра и окружающего его электронного облака, образующих единую атомную систему. Вследствие большого различия характерных размеров ядерной и электронной систем (10^{-13} см в сравнении с 10^{-8} см), эти две системы мы можем аппроксимировать как физически неперекрывающиеся.

Чтобы применить формулу связывания, ядерную систему рассматривают как систему 1 с точным угловым моментом I , а электронную систему — как систему 2 с угловым моментом J ; связанная система имеет угловой момент F , где $I + J = F$.

Поскольку гамильтониан взаимодействия является вращательно инвариантным, только статистический тензор $k = \kappa = 0$ может входить в связывание этих двух систем. Вследствие равенства (7.7.45) (с использованием симметрии $9j$ -символа) это сводится к $6j$ -символу. Благодаря упрощающему физическому предположению о неперекрывании этих систем две совокупности статистических тензоров разлагаются в произведение связанных мультипольных моментов.

Рассмотрим энергию взаимодействия статических электрических квадруполь. Электромагнитные мультиполи обсуждались нами в предыдущем разделе; здесь же для иллюстративных целей достаточно просто взять в качестве квадрупольного момента электронов (нерегулярного в начале) редуцированный матричный элемент $e_e \langle J \| r^{-3} P_2(\cos\theta) \| J \rangle$, а в качестве ядерного момента (регулярного в начале) $e_{\text{ядр}} \langle I \| r^2 P_2(\cos\theta) \| I \rangle$; при этом используется предположение непере-

крывания, причем электрон находится строго вне ядра. Здесь $-e_{el}$ — полный электронный заряд и e_{nuc} — полный ядерный заряд.

Из формулы связывания для энергии электрического квадрупольного взаимодействия получаем следующий результат:

$$E_{interaction} = -e_{el}e_{nuc} \langle J || r^{-3} P_2 || J \rangle \langle I || r^2 P_2 || I \rangle [5(2F+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} F & I & J \\ 2 & J & I \end{Bmatrix}. \quad (7.7.47)$$

6j-коэффициент, входящий в эту формулу, имеет явный вид

$$\begin{Bmatrix} F & I & J \\ 2 & J & I \end{Bmatrix} = (-)^{I+J+F} \left[\frac{(2I-2)!(2J-2)!}{(2I+3)!(2J+3)!} \right]^{\frac{1}{2}} [6A(A+1) - 8I(I+1)J(J+1)]$$

$$A \equiv F(F+1) - I(I+1) - J(J+1). \quad (7.7.48)$$

Этот результат интересен тем, что входящий в формулу множитель A имеет смысл, вытекающий из его пропорциональности коэффициенту Рака, а именно коэффициенту $\begin{Bmatrix} F & I & J \\ 1 & J & I \end{Bmatrix}$, который в классическом пределе соответствует величине $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}}$ (косинусу угла между $\mathbf{I}$ и $\mathbf{J}$). Соответственно коэффициент Рака $\begin{Bmatrix} F & I & J \\ 2 & J & I \end{Bmatrix}$ является квантовым аналогом классического коэффициента Лежандра $P_2(\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}})$ (см. (5.98) в гл. 5).

Теперь понятен смысл энергии взаимодействия, заданной при помощи формулы связывания: она является просто квантовомеханической формой энергии взаимодействия двух классических *цилиндрически симметричных* квадруполь, классическая энергия которых изменяется как $P_2(\cos\theta)$, где θ — угол между двумя осями симметрии.

Это взаимодействие квадруполь играет важную роль в спектроскопии [26]; разности энергий в отличие от магнитного дипольного сверхтонкого взаимодействия не являются постоянными и, следовательно, отклоняются от более ранних эмпирических спектральных правил (первоначально указывавших на существование ядерных квадрупольных моментов).

«Квантовые функции Лежандра» $\begin{Bmatrix} F & I & J \\ L & J & I \end{Bmatrix}$, которые входят в общие (статистические) мультипольные взаимодействия в спектроскопии, приведены в табл. 7 приложения таблиц.

3. *Формула Майораны.* Поведение произвольного магнитного момента в зависящем от времени магнитном поле было установлено квантовомеханически (как качественно, так и количественно) в известной работе¹⁾ Майораны [14]. Эти результаты имели фундаментальное значение для экспериментов Раби с атомными пучками; в недавнем юбилейном сборнике, посвященном Раби, Швингер [28] обсуждает формулу Майораны в своей весьма информативной и привлекательной ретроспективной статье²⁾.

¹⁾ Аналогичные результаты независимо были получены Гюттингером [27].

²⁾ История формулы Майораны обсуждалась также Рамсеем [29].

Суть майорановской формулировки в интерпретации Швингера заключается в сведении задачи о произвольном спине j к задаче о суперпозиции $2j$ систем спина $\frac{1}{2}$. Движение суперпозиционной системы спинов оказывается эквивалентным движению одной системы спина $\frac{1}{2}$.

Чтобы сделать последнее утверждение более очевидным, заметим, что уравнение Шредингера для системы с магнитным моментом $\mathbf{M} = g\mu\mathbf{J}$ в магнитном поле $\mathbf{B}(t)$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = -g\mu\mathbf{J} \cdot \mathbf{B}(t)\psi(t). \quad (7.7.49)$$

Собственный вектор $\psi(t)$ можно считать результатом действия унитарного оператора на начальный собственный вектор $\psi(0)$:

$$\psi(t) = U(t)\psi(0). \quad (7.7.50)$$

Поскольку $\mathbf{J}$ может быть представлен в виде суммы $2j$ кинематически независимых систем со спином $\frac{1}{2}$, т.е.

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{2j} \boldsymbol{\sigma}_k, \quad (7.7.51)$$

мы получаем уравнение движения оператора $U(t)$ в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = \left[\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{2j} (-g\mu) \boldsymbol{\sigma}_k \cdot \mathbf{B}(t) \right] U(t). \quad (7.7.52)$$

Таким образом, уравнение движения факторизуется, поэтому $U(t)$ можно представить как произведение

$$U(t) = \prod_{k=1}^{2j} U_k(t), \quad (7.7.53)$$

откуда следует, что каждый $U_k(t)$ удовлетворяет одному и тому же уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_k(t) = -\frac{1}{2}g\mu\boldsymbol{\sigma}_k \cdot \mathbf{B}(t)U_k(t). \quad (7.7.54)$$

Исходная задача свелась таким образом к задаче о системе со спином $\frac{1}{2}$ и гиромагнитным отношением g в переменном магнитном поле $\mathbf{B}(t)$.

Теперь можно сделать вывод, что для этой задачи спина $\frac{1}{2}$ чистое влияние магнитного поля состоит в индуцировании вращения на угол $\beta(t)$ от исходного направления спина до конечного направления спина. Следовательно, для желаемой системы со спином $\frac{1}{2}$ вероятность $W(m, m', t)$ наблюдать в момент времени t проекцию m' для системы, имевшей первоначально (при $t = 0$) проекцию m , дается формулой

$$W(m, m', t) = |d_{m'm}^j(\beta(t))|^2, \quad (7.7.55)$$

где $d_{m'm}^j(\beta)$ — матричный элемент вращения из разд. 5 гл. 3.

Майорана привел явное вычисление матричного элемента вращения $d_{m'm}^j(\beta)$, появляющегося в (7.7.55), и связал угол $\beta(t)$ с углом вращения системы спина $\frac{1}{2}$ в зависящем от времени магнитном поле. «Формула Майораны» есть в точности формула (7.7.55) с подстановкой вместо $d_{m'm}^j(\beta)$ выражения (3.65); нет необходимости воспроизводить здесь результат.

Подход Майораны к этой задаче основывался на том замечании, что любое состояние (спина j) может быть представлено посредством $2j$ точек на единичной сфере. (Этот аспект обсуждался нами в разд. в выше.) Швингер рассказыва-

ет, что именно его попытка понять это «загадочное» замечание привела его к этой интерпретации системы спина j как суперпозиции $2j$ систем спина $\frac{1}{2}$ (1937 г., не опубликовано), а позднее (в 1951 г.) к реинтерпретации на языке формализма «вторичного квантования» (опубликовано в работе [30]).

Поэтому можно считать, что бозонное исчисление в теории углового момента восходит к формуле Майораны. Более раннее и более общее приложение метода вторичного квантования (как фермионного, так и бозонного) к общей унитарной группе в работе Йордана [31], по-видимому, не играло никакой роли в этом развитии.

В приложении к работе [28] Швингер дал другую важную интерпретацию формулы Майораны. Чтобы получить результат Швингера, применим вигнеровский закон произведения (3.189) к правой части равенства (7.7.55). Результат (в обозначениях Швингера) имеет следующий вид:

$$p(m, m'; \beta) = |D_{m'm}^j(\alpha\beta\gamma)|^2 = (2j+1)^{-1} \sum_{l=0}^{2j} (2l+1) P_l(j, m) P_l(\cos \beta) P_l(j, m'), \quad (7.7.56)$$

где $P_l(\cos \beta)$ — обычная функция Лежандра, а $P_l(j, m)$ обозначает матричный элемент единичного тензорного оператора:

$$P_l(j, m) \equiv \langle jm | \begin{pmatrix} l & & \\ & 2l & \\ & & 0 \end{pmatrix} | jm \rangle. \quad (7.7.57)$$

(Как обсуждалось в разд. 8 гл. 5, $P_l(j, m)$ являются квантовыми операторными аналогами функции Лежандра.) С другой стороны, приведенная выше формула для вероятности может быть связана с трансформационными свойствами операторов Вигнера $\langle 2l : 0 \rangle$.

Меклер [32] при обсуждении формулы Майораны заметил, что $P_l(j, m)$ являются полиномами Чебышева дискретной переменной [33]. Такая интерпретация следует из того факта, что коэффициенты Вигнера связаны с обобщенными гипергеометрическими функциями, как рассмотрено в работе [37]. Приложения формулы Майораны к магнитному резонансу впервые были сделаны Раби [34] (см. также [35, 36]).

Литература

1. von Neumann J., *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press, Princeton, N. J., 1955. [Имеется перевод: фон Нейман И. Математические основы квантовой механики. — М.: Наука, 1964.]
2. Feynman R. P., *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367 (1948).
Пространственно-временной подход к нерелятивистской квантовой механике.
3. Jordan P., von Neumann J., *Ann. of Math.*, **36**, 719 (1935).
О внутренних произведений в линейных метрических пространствах.
4. Jauch J. M., *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1968.
Основа квантовой механики.
5. Jordan P., von Neumann J., Wigner E., *Ann. of Math.*, **35**, 29 (1935).
Об алгебраическом обобщении квантовомеханического формализма.

6. Gürsey F. in: John Hopkins University Workshop on Current Problems in High Energy Particle Theory (G. Domokos and S. Kövesi-Domokos, eds.), pp. 15 — 42, Baltimore, Md., 1974.
Цветные кварки и октонноны.
7. Horwitz L. P., Biedenharn L. C., Helv. Phys. Acta, **38**, 385 (1965).
Внутренние правила суперотбора в алгебраическом гильбертовом пространстве.
8. Fano U., Rev. Mod. Phys., **29**, 74 (1957).
Описание состояний в квантовой механике при помощи матрицы плотности и операторных методов.
9. Bloch F., Rabi I. I., Rev. Mod. Phys., **17**, 237 (1945).
Атомы в переменных магнитных полях.
10. Bloch F., Phys. Rev., **70**, 460 (1946).
Ядерная индукция.
11. Rabi I. I., Ramsey N. F., Schwinger J., Rev. Mod. Phys., **26**, 167 (1954).
Использование вращающихся координат в проблемах магнитного резонанса.
12. Biedenharn L. C., Ann. Phys. (N. Y.), **4**, 104 (1958).
Замечание о статистических тензорах в квантовой механике.
13. Racah G., Ergeb. Exakt. Naturw., **37**, 28 (1965).
Теория групп и спектроскопия.
14. Majorana E., Nuovo Cimento [8], **9**, 43 (1932).
Ориентация атома в переменном магнитном поле.
15. Bacry H., J. Math. Phys., **15**, 1686 (1974).
Орбиты группы вращений на спиновых состояниях.
16. Michel L. in: Statistical Mechanics and Field Theory (R. Sen and C. Weil, eds.), pp. 133 — 150, Wiley-Halstead, New York, 1972.
Нелинейное групповое действие. Гладкое действие компактных групп Ли на многообразиях.
17. Doncel M. G., Michel L., Minnaert P., Nucl. Phys., **B38**, 477 (1972).
Строгие спиновые тесты из обычных сильных распадов.
18. Lubanski J. K., Physica, **9**, 310 (1942).
К теории элементарных частиц произвольного спина.
- 18a. Fradkin D. M., Good R. H., Jr., Rev. Mod. Phys., **33**, 343 (1961).
Операторы поляризации электрона.
19. Bjorken J. D., Drell S. D., Relativistic Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York, 1964. [Имеется перевод: Бьеркен Дж. Д., Дрелл С. Д. Релятивистская квантовая теория, т. I. Релятивистская квантовая механика. — М.: Наука, 1978.]
20. Sakurai J. J., Advanced Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1967.
Современная квантовая механика.
21. Merzbacher E., Quantum Mechanics, Wiley, New York, 1961.
Квантовая механика.
22. Wigner E. P., Z. Physik, **124**, 665 (1948).
Релятивистские волновые уравнения.
23. Schopper H. F., Weak Interactions and Nuclear Beta Decay, North-Holland, Amsterdam, 1966.
Слабые взаимодействия и бета-распад ядра.
24. Fano U., Racah G., Irreducible Tensorial Sets, Academic Press, New York, 1959.
Неприводимые тензорные множества.
25. Steffen R. M., Alder K. in: The Electromagnetic Interaction in Nuclear Spectroscopy (W. D. Hamilton, ed.), North-Holland, Amsterdam, 1975.
Внеядерные возмущения угловых распределений и корреляций, гл. 13.

26. *Kopferman H.*, Nuclear Moments, Academic Press, New York, 1958. [Имеется перевод: *Конферман Г.*, Ядерные моменты. — М.: ИЛ, 1960.]
27. *Güttinger P.*, Z. Physik, **73**, 743 (1932).
Ориентации атомов в переменном магнитном поле.
28. *Schwinger J.*, Trans. N. Y. Acad. Sci. II, **38**, 170 (1977).
Формула Майораны.
29. *Ramsey N. F.*, Molecular Beams, Oxford Univ. Press, London, 1956. [Имеется перевод: *Рамзей Н. Ф.*, Молекулярные пучки. — М.: ИЛ, 1960.]
30. *Biedenharn L. C.*, van Dam H. (eds), The Quantum Theory of Angular Momentum, Academic Press, New York, 1965.
Квантовая теория углового момента.
31. *Jordan P.*, Z. Physik, **94**, 531 (1935).
Связь симметрической и линейной групп и проблема многих тел.
32. *Meckler A.*, Phys. Rev., **111**, 1447 (1958).
Формула Майораны.
33. *Erdélyi A. et al.*, Higher Transcendental Functions, Vol. II, Chapter X, p. 223. McGraw-Hill, New York, 1953. [Имеется перевод: *Бейтмен Ф., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции, т.2. — М.: Наука, (1974).]
34. *Rabi I. I.*, Phys. Rev., **51**, 652 (1937).
Пространственное квантование в циркулярном магнитном поле.
35. *Abragam A., Bleaney B.*, Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions, Clarendon, Oxford, 1970.
Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов.
36. *Gilmore R.*, Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications, Wiley, New York, 1974.
Группы Ли, алгебры Ли и некоторые их применения.
37. *Biedenharn L. C.*, *Louck J. D.*, The Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

8. Угловые корреляции и угловые распределения в реакциях

а. Природа процесса угловой корреляции. Для интуитивного понимания природы процесса угловой корреляции полезно рассмотреть схематический пример, иллюстрирующий основные понятия. Рассмотрим нерелятивистскую ядерную реакцию столкновения двух (неразличимых) бесспиновых частиц, которые образуют резонансное составное состояние углового момента l , распадающееся в конечное состояние из пары других бесспиновых частиц.

Реакция описывается в системе отсчета, в которой полный импульс равен нулю (см. разд. 2). Как это свойственно квантовой механике, действительное вычисление касается не поведения отдельных частиц, а среднего поведения статистического ансамбля. В данном примере приготавливают плосковолновые пучки налетающих частиц с импульсом k_p , а затем в результате измерения идентифицируют типы частиц и конечный импульс k_f выходящего пучка частиц-продуктов реакции.

Из вращательной инвариантности сразу следует, что физическое измерение (поток выходящих частиц) может быть функцией только одного (инвариантным

образом определенного) угла: $\cos \theta = \hat{k}_i \cdot \hat{k}_f$. Соответственно, дифференциальную вероятность¹⁾ реакции $dW/d\Omega$ мы можем представить в виде ряда Лежандра:

$$dW(\theta)/d\Omega = (4\pi)^{-1} \sum_v (2v+1) B_v P_v(\cos \theta),$$

$$\cos \theta \equiv \hat{k}_i \cdot \hat{k}_f. \quad (7.8.1)$$

Теперь мы приходим к самому сложному моменту проблемы — к вопросу об «информации об угловом моменте», содержащейся в задаче. Какая это информация? Мы имеем два вида информации: 1) динамическая информация связана с тем фактом, что реакция протекает через состояние с определенным угловым моментом величины l , и 2) кинематическая угловая информация, предполагаемая измерением начального и конечного направлений движения $\hat{k}_i$ и $\hat{k}_f$.

Из соотношения неопределенности для углового момента²⁾ мы можем заключить, что информация первого вида дает (кинематическое) указание на то, что угол χ , сопряженный величине $(L^2)^{1/2}$, является случайным (равномерно распределен). Из измерения, соответствующего второму виду информации, можно заключить, что орбитальный угловой момент падающих (или выходящих) частиц перпендикулярен направлению движения. (Следовательно, проекция углового момента m равна нулю для оси z , взятой вдоль направления движения частицы.)

Эта информация, — хотя и кажущаяся довольно незначительной, даже тривиальной, — оказывается достаточной, чтобы дать единственное угловое распределение, как будет сейчас показано.

Для простоты возьмем сначала $l \gg 1$, так что можно пользоваться полуклассическим подходом. Из сохранения углового момента следует, что угловой момент L составной (резонансной) системы равен орбитальному угловому моменту, вносимому налетающим пучком; таким образом, направление углового момента L есть равномерно распределенный перпендикуляр к направлению $\hat{k}_f$.

После своего образования составная система затем распадается, испуская частицы равномерно во всех направлениях $\hat{k}_f$, перпендикулярных вектору L . Это следует из соотношения неопределенности в применении к информации первого вида, упомянутого выше.

Делаем заключение: направление $\hat{k}_f$ равномерно распределено по сфере, т.е. выбирая $\hat{k}_i$ в качестве оси, мы находим, что θ и ϕ равномерно распределены³⁾.

Соответственно вероятности в телесном угле (нормированная на единицу) равна

$$\frac{dW(\theta)}{d\Omega} = (2\pi^2)^{-1} (\sin \theta)^{-1}. \quad (7.8.2)$$

¹⁾ Дифференциальная вероятность реакции есть поток выходящих частиц внутри телесного угла $d\Omega$ в точке (θ, ϕ) , нормированный на единицу по телесному углу 4π . В равенстве (7.8.1) такая нормировка означает $B_0 = 1$.

²⁾ Этот вопрос подробно рассматривается в работе [17].

³⁾ Согласно этому выводу, угол θ меняется от 0 до π . Дополнительная область гарантирует, что действительно появляется симметрия относительно $\theta = \pi/2$ (как этого требует четность).

26. *Kopferman H.*, Nuclear Moments, Academic Press, New York, 1958. [Имеется перевод: *Копферман Г.*, Ядерные моменты. — М.: ИЛ, 1960.]
27. *Güttinger P.*, Z. Physik, **73**, 743 (1932).
Ориентации атомов в переменном магнитном поле.
28. *Schwinger J.*, Trans. N. Y. Acad. Sci. II, **38**, 170 (1977).
Формула Майораны.
29. *Ramsey N. F.*, Molecular Beams, Oxford Univ. Press, London, 1956. [Имеется перевод: *Рамзей Н. Ф.*, Молекулярные пучки. — М.: ИЛ, 1960.]
30. *Biedenharn L. C.*, van Dam H. (eds), The Quantum Theory of Angular Momentum, Academic Press, New York, 1965.
Квантовая теория углового момента.
31. *Jordan P.*, Z. Physik, **94**, 531 (1935).
Связь симметрической и линейной групп и проблема многих тел.
32. *Meckler A.*, Phys. Rev., **111**, 1447 (1958).
Формула Майораны.
33. *Erdélyi A. et al.*, Higher Transcendental Functions, Vol. II, Chapter X, p. 223. McGraw-Hill, New York, 1953. [Имеется перевод: *Бейтмен Ф., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции, т. 2. — М.: Наука, (1974).]
34. *Rabi I. I.*, Phys. Rev., **51**, 652 (1937).
Пространственное квантование в циркулярном магнитном поле.
35. *Abragam A., Bleaney B.*, Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions, Clarendon, Oxford, 1970.
Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов.
36. *Gilmore R.*, Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications, Wiley, New York, 1974.
Группы Ли, алгебры Ли и некоторые их применения.
37. *Biedenharn L. C., Louck J. D.*, The Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

8. Угловые корреляции и угловые распределения в реакциях

а. Природа процесса угловой корреляции. Для интуитивного понимания природы процесса угловой корреляции полезно рассмотреть схематический пример, иллюстрирующий основные понятия. Рассмотрим нерелятивистскую ядерную реакцию столкновения двух (неразличимых) *бесспиновых* частиц, которые образуют резонансное составное состояние углового момента l , распадающееся в конечное состояние из пары других бесспиновых частиц.

Реакция описывается в системе отсчета, в которой полный импульс равен нулю (см. разд. 2). Как это свойственно квантовой механике, действительное вычисление касается не поведения отдельных частиц, а среднего поведения статистического ансамбля. В данном примере приготавливают плосковолновые пучки налетающих частиц с импульсом k_x , а затем в результате измерения идентифицируют типы частиц и конечный импульс k_y выходящего пучка частиц-продуктов реакции.

Из вращательной инвариантности сразу следует, что физическое измерение (поток выходящих частиц) может быть функцией только одного (инвариантным

образом определенного) угла: $\cos \theta = k_i \cdot k_f$. Соответственно, дифференциальную вероятность¹⁾ реакции $dW/d\Omega$ мы можем представить в виде ряда Лежандра:

$$dW(\theta)/d\Omega = (4\pi)^{-1} \sum_v (2v+1) B_v P_v(\cos \theta),$$

$$\cos \theta \equiv k_i \cdot k_f. \quad (7.8.1)$$

Теперь мы приходим к самому сложному моменту проблемы — к вопросу об «информации об угловом моменте», содержащейся в задаче. Какая это информация? Мы имеем два вида информации: 1) динамическая информация связана с тем фактом, что реакция протекает через состояние с определенным угловым моментом величины l , и 2) кинематическая угловая информация, предполагаемая измерением начального и конечного направлений движения k_i и k_f .

Из соотношения неопределенности для углового момента²⁾ мы можем заключить, что информация первого вида дает (кинематическое) указание на то, что угол χ , сопряженный величине $(L^2)^{1/2}$, является случайным (равномерно распределен). Из измерения, соответствующего второму виду информации, можно заключить, что орбитальный угловой момент падающих (или выходящих) частиц перпендикулярен направлению движения. (Следовательно, проекция углового момента m равна нулю для оси z , взятой вдоль направления движения частицы.)

Эта информация, — хотя и кажущаяся довольно незначительной, даже тривиальной, — оказывается достаточной, чтобы дать единственное угловое распределение, как будет сейчас показано.

Для простоты возьмем сначала $i \geq 1$, так что можно пользоваться полуклассическим подходом. Из сохранения углового момента следует, что угловой момент L составной (резонансной) системы равен орбитальному угловому моменту, вносимому налетающим пучком; таким образом, направление углового момента L есть равномерно распределенный перпендикуляр к направлению k_f .

После своего образования составная система затем распадается, испуская частицы равномерно во всех направлениях k_f , перпендикулярных вектору L . Это следует из соотношения неопределенности в применении к информации первого вида, упомянутого выше.

Делаем заключение: направление k_f равномерно распределено по сфере, т.е. выбрав k_i в качестве оси, мы находим, что θ и ϕ равномерно распределены³⁾.

Соответственно вероятность в телесном угле (нормированная на единицу) равна

$$\frac{dW(\theta)}{d\Omega} = (2\pi^2)^{-1} (\sin \theta)^{-1}. \quad (7.8.2)$$

¹⁾ Дифференциальная вероятность реакции есть поток выходящих частиц внутри телесного угла $d\Omega$ в точке (θ, ϕ) , нормированный на единицу по телесному углу 4π . В равестве (7.8.1) такая нормировка означает $B_0 = 1$.

²⁾ Этот вопрос подробно рассматривается в работе [17].

³⁾ Согласно этому выводу, угол θ меняется от 0 до π . Дополнительная область гарантирует, что действительно появляется симметрия относительно $\theta = \pi/2$ (как этого требует четность).

Этот результат (насколько нам известно, впервые полученный Кристи [1]) интересен сам по себе, поскольку он дает предельную форму для углового распределения в ядерной реакции, проходящей через резонанс с большим угловым моментом, включающий частицы малого собственного спина (такие угловые распределения наблюдались в реакциях с тяжелыми ионами).

Отметим характерные черты: имеется сильный пик для направления вперед с шириной, типичной для большого углового момента, а также симметрия относительно $\theta = 90^\circ$, обусловленная точной четностью (участвует один орбитальный угловой момент).

Рассмотрим теперь тот же пример, но с более общей точки зрения. Любая корреляция, в которой измеряются только два направления движения, должна выражаться рядом Лежандра от инвариантно определенного угла θ (см. (7.8.1)).

Коэффициент B_ν в равенстве (7.8.1) следует интерпретировать как среднее значение, а именно значение величины $P_\nu(\hat{k}_i \cdot \hat{k}_f)$, усредненной по всем возможным конфигурациям системы, т.е.

$$B_\nu \equiv [P_\nu(\hat{k}_i \cdot \hat{k}_f)]_{\text{av}}. \quad (7.8.3)$$

Если воспользоваться теперь теоремой сложения для полиномов Лежандра (см. формулу (6.137) гл. 6), то формально можно ввести угловой момент L как ось z . Вспоминая, что сопряженный угол χ является случайным, находим

$$\begin{aligned} [P_\nu(\hat{k}_i \cdot \hat{k}_f)]_{\text{av}} &= P_\nu(\hat{k}_i \cdot \hat{L}) P_\nu(\hat{k}_f \cdot \hat{L}) \\ &= [P_\nu(\cos \pi/2)]^2, \end{aligned} \quad (7.8.4)$$

где на последнем шаге мы использовали информацию второго вида. В итоге имеем

$$dW(\theta)/d\Omega = (4\pi)^{-1} \sum_{\nu} (2\nu + 1) [P_\nu(0)]^2 P_\nu(\cos \theta). \quad (7.8.5)$$

Ясно, что этот результат совпадает с выражением в виде ряда Лежандра (7.8.2), но главное в данном выводе то, что основываясь на теореме сложения, мы предполагаем общим методом.

Воспользуемся этой процедурой, чтобы исключить требование $l \gg 1$. Обсуждение в гл. 5 (см. соотношение (5.94)) классического предела коэффициентов Вигнера напоминает нам, что «функции собственного угла» для угла между квантованным вектором (угловой момент) и (неквантованным) направлением есть в точности коэффициенты Вигнера:

$$C_{m0m}^{l\nu l} \sim P_\nu(\hat{l} \cdot \hat{k}), \quad (7.8.6)$$

где $m/l \sim l \cdot \hat{k}$, причем $\hat{l}$ — единичный вектор в направлении вектора L . Поскольку вектор L перпендикулярен $\hat{k}$, значение m , которое следует использовать, равно нулю: $P_\nu(\hat{k} \cdot \hat{l}) \sim C_{000}^{l\nu l}$.

Ограничение четными целыми числами ν , которое возникает в классическом случае (формула (7.8.5)) вследствие обращения в нуль величин $P_\nu(0)$ для нечетных целых чисел, получается также и здесь для коэффициентов Вигнера, которые подобным же образом обращаются в нуль при нечетных ν .

Такое предельное соотношение предполагает (а более точное вычисление подтверждает это), что квантовомеханическая форма углового распределения имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{dW(\theta)}{d\Omega} &= \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{2l} (2v+1)(C_{000}^{lv})^2 P_v(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{2l} (2l+1)(C_{000}^{lv})^2 P_v(\cos \theta). \end{aligned} \quad (7.8.7)$$

Полученный результат уже проявляет ряд существенных черт, которые типичны для общего углового распределения направление — направление. Только в одном отношении этот результат является весьма специальным — в ограничении *бесспиновыми* падающей и уходящей частицами.

Но избавиться от этого ограничения не так просто, как может показаться. Фактически мы подошли к критической черте, разделяющей релятивистский и нерелятивистский режимы. В релятивистской области (группа Пуанкаре) измерения спина элементарной частицы кинематически связаны с движением самой частицы [2]; это обсуждалось в разд. 7, г. Такое положение дел находится в резком контрасте с нерелятивистской ситуацией, где наблюдаемые спина не зависят от состояния движения.

Для простоты на некоторое время сосредоточимся на *нерелятивистском режиме* (группа Галилея). Спины (s_1, s_2) пары налетающих частиц без потери общности могут рассматриваться каждый в *фиксированной* системе отсчета (отожествляемой с системой центра масс). Суммарный спин $s_i \equiv s_1 + s_2$ принято называть *спином канала* для канала налета (канал обозначает конкретную пару частиц).

Соответственно угловой момент J резонансного состояния является суммой спина канала s_i и орбитального углового момента l_i относительного движения налетающей пары:

$$J = l_i + s_i \quad (7.8.8)$$

Аналогичное соотношение имеет место для конечного (выходящего) канала с орбитальным угловым моментом l_f и спином канала s_f .

Решающим моментом теперь является следующее: *если не производится наблюдение ни одного спина, то мы считаем, что спины каналов следует рассматривать ориентированными случайно и равномерно*. Это имеет решающее значение, поскольку из формулы (7.8.3) коэффициент B_v находится в виде

$$B_v = [P_v(\hat{k}_i \cdot \hat{k}_f)]_{av}, \quad (7.8.9)$$

и мы можем, как и выше, применить теорему сложения для усреднения по углу χ (сопряженному к J); таким образом, получаем

$$B_v = [P_v(\hat{k}_i \cdot \hat{J})]_{av} \times [P_v(\hat{k}_f \cdot \hat{J})]_{av}. \quad (7.8.10)$$

Два усреднения, которые требуются в последнем выражении, можно теперь осуществить, если учесть случайную ориентацию спинов начального и конечного каналов.

Воспользовавшись теоремой сложения для каждого из сомножителей предыдущего выражения, находим

$$B_v = [P_v(\hat{k}_i \cdot \hat{l}_i)P_v(\hat{l}_i \cdot \hat{J})] \times [P_v(\hat{k}_f \cdot \hat{l}_f)P_v(\hat{l}_f \cdot \hat{J})]. \quad (7.8.11)$$

Числовой коэффициент B , полностью определяется этой процедурой, поскольку равенство (7.8.8) дает для аргумента $\hat{l}_i \cdot \hat{J}$ выражение

$$\hat{l}_i \cdot \hat{J} = (J^2 + l_i^2 - s_i^2)/(2\sqrt{J^2 l_i^2}), \quad (7.8.12)$$

а $\hat{l}_p$, как и выше, перпендикулярно $\hat{k}_p$ (Аналогичный результат имеет место для $\hat{l}_p$, $\hat{k}_p$ и $\hat{J}$.)

Для получения квантовомеханического описания формулы (7.8.11) для B , напомним (см. соотношение (5.98) в гл. 5), что аналог функции Лежандра для угла между двумя квантованными угловыми моментами дается коэффициентом Рака:

$$P_v(\hat{l}_i \cdot \hat{J}) \sim (-)^v [(2l_i + 1)(2J + 1)]^{\frac{1}{2}} W(l_i v s_i J; l_i J). \quad (7.8.13)$$

Используя этот результат и соотношение (7.8.6), чтобы переписать B , получаем теперь из (7.8.1) следующую формулу для углового распределения:

$$\frac{dW(\theta)}{d\Omega} = (-1)^{s_i - s_f} (4\pi)^{-1} \sum_v A_v (\text{начальн.}) A_v (\text{конечн.}) (\text{final}) P_v(\cos \theta),$$

$$A_v (\text{начальн.}) \equiv (2J + 1)^{\frac{1}{2}} (2l_i + 1) C_{000}^{l_i l_i v} W(l_i l_i J J; v s_i),$$

$$A_v (\text{конечн.}) \equiv (2J + 1)^{\frac{1}{2}} (2l_f + 1) C_{000}^{l_f l_f v} W(l_f l_f J J; v s_f). \quad (7.8.14)$$

Последний результат представляет собой общую нерелятивистскую квантовомеханическую формулу для углового распределения $dW(\theta)/d\Omega$ реакции, включающей составное состояние углового момента J с ненаблюдаемыми спинами каналов s_i и s_f и конкретизированными орбитальными угловыми моментами l_i и l_f (Ниже мы дадим краткое доказательство, что этот результат на самом деле справедлив и релятивистски в системе отсчета, в которой составная система имеет нулевой полный импульс.)

Обсудим теперь основные черты, характеризующие этот результат.

1. Коэффициенты для ряда Лежандра факторизуются на две части, каждая из которых определяется угловым моментом, ассоциированным с измерением заданного направления движения. Это свойство факторизации является общей чертой корреляций направление — направление, протекающих через промежуточное состояние с фиксированной величиной углового момента, если даже входящие в реакцию орбитальные угловые моменты не имеют единственное значение. Первичным источником этого свойства, как уже указывалось, является соотношение неопределенности для углового момента.

2. Информация относительно процесса корреляции обусловлена двумя фактами: орбитальный угловой момент l перпендикулярен направлению движения $\mathbf{k}$, а сохранение углового момента фиксирует «угол» (см. (7.8.12)) между l и J в сумме $J = l + s$.

3. Симметрия относительно 90° обусловлена тем, что коэффициент Вигнера, вводимый этой перпендикулярностью, обращается в нуль для нечетных ν , т.е. $C_{000}^{l l v} = 0$, если ν нечетно. Эта симметрия является общей чертой, отражающей то свойство, что промежуточное состояние имеет точную четность.

4. Вопрос о том, являются ли индивидуальные процессы процессами испускания или поглощения, а также о последовательности излучений во времени, не существен. Это есть общая черта корреляции направление — направление с ядерными состояниями точного углового момента.

5. Фиксация конкретных угловых моментов s_i, s_f, l_i, l_f и J является динамической, и, таким образом, теория угловой корреляции не делает здесь никаких утверждений, кроме сохранения величины углового момента.

Важным следствием квантования, которое фактически весьма повышает значение корреляционного процесса как экспериментального инструмента, является то, что в ряде Лежандра индекс ν принимает только конечное число значений. Для ν теперь имеется верхний предел, определяемый правилами треугольника в определении коэффициентов Рака. Таким образом, имеем

$$\nu_{\max} \leq \text{minimum} (2J, 2l_i, 2l_f). \quad (7.8.15)$$

Кроме того, сохранение четности, выражаемое свойствами коэффициента Вигнера $C_{000}^{l_i l_f J}$ ограничивает ν четными значениями.

6. Каскады. Полуклассическая конструкция, использованная при выводе соотношений (7.8.7) и (7.8.14), дает вполне прямой способ для построения более сложных корреляций. Рассмотрим, например, корреляцию, когда промежуточное состояние с угловым моментом J испускает ненаблюдаемое излучение с фиксированным угловым моментом l' , переходя в состояние с J' , которое затем испускает наблюдаемое излучение¹⁾ в направлении $\hat{k}_f$. Для краткости обозначаем этот процесс последовательностью квантовых чисел $j_i(l) J(l') J'(l_f) j_f$. Замечаем теперь, что кроме случайно ориентированных векторов предыдущего вычисления мы имеем дополнительный случайно ориентированный вектор l' .

Применение к $[P_\nu(\hat{k}_i \cdot \hat{k}_f)]_{av}$, как и выше, теоремы сложения требует теперь дополнительного шага из-за треугольника угловых моментов ($JJ'l'$). Таким образом, мы должны ввести множитель

$$[P_\nu(\hat{k}_f \cdot \hat{J})]_{av} = P_\nu(\hat{J} \cdot \hat{J}') [P_\nu(\hat{k}_f \cdot \hat{J}')]_{av} \quad (7.8.16)$$

в соотношение (7.8.10). Поэтому дополнительное, но ненаблюдаемое, излучение вводит в классический результат другой коэффициент Лежандра. Таким образом, для квантового аналога мы просто вставляем в формулу (7.8.14) дополнительный множитель.

$$[P_\nu(\hat{J} \cdot \hat{J}')]_{QM} \equiv (-)^{\nu} [(2J+1)(2J'+1)]^{\frac{1}{2}} W(J\nu l' J'; JJ'). \quad (7.8.17)$$

(В этом вычислении находят физическое приложение понятия, введенные в разд. 7, ж, где обсуждалась частичная деполяризация составной системы случайной подсистемой.)

Из этого элементарного вывода каскадной корреляции можно видеть, насколько прямыми и экономными являются в действительности эти полуклассические методы (начало которым положил Рак). Они оперируют только наблюдаемыми и не вводят громоздкий формализм всех возможных наблюдений (как это с необходимостью делает «максимальная» техника сумм по магнитным квантовым числам). Конечно, приведенные выше выкладки были довольно эвристическими, но их можно без существенного изменения сделать более строгими.

¹⁾ Мы пренебрегаем здесь эффектами отдачи, так что система центра инерции фиксирована на протяжении всего процесса.

в. *Растянутые угловые моменты.* Если мы предположим, что в каскаде не наблюдаемое излучение углового момента L_1 соединяет два состояния угловых моментов j_1, j_2 и эти три угловых момента связаны либо равенством $j_1 = L_1 + j_2$, либо равенством $j_2 = L_1 + j_1$ (иначе говоря, треугольник угловых моментов является «растянутым»), то видим, что в классическом вычислении дополнительный коэффициент Лежандра, вводимый этим излучением, в точности равен единице. Таким образом, в этом специальном случае ненаблюдаемое излучение не оказывает какого-либо влияния на корреляцию.

С другой стороны, квантовый результат не обнаруживает такой же простоты. Причина в том, что квантовый эквивалент функции Лежандра, вводимой ненаблюдаемым излучением, для случая растянутых угловых моментов не становится равным единице (или хотя бы независимым от ν). Тогда ясно, что заданное ненаблюдаемое излучение с растянутыми угловыми моментами в общем случае действительно влияет на корреляцию в квантовом результате. (Этот результат снова обусловлен тем фактом, что направление углового момента не является наблюдаемой; треугольник, образованный «растянутыми угловыми моментами», не может иметь нулевую площадь.)

Но существует один специальный случай, когда даже квантовый результат упрощается. Это относится к ситуации, когда все угловые моменты в данном каскаде параллельны, что мы определяем как $j_n = L_n + j_{n+1}$ (случай $j_{n+1} = L_n + j_n$ эквивалентен данному, так как он соответствует той же корреляции в обратном порядке). Для такой ситуации, как показывают явные выражения для коэффициентов Рака, корреляция в каждом случае становится такой же, как двойная корреляция для простейшего случая, а излучения имеют такие же угловые моменты, как и те два, которые наблюдаются в каскаде; иначе говоря, мы имеем схему $j_i(L_i) L_f(L_f) 0 \rightarrow j_i = L_i + L_f$.

г. *Процессы с более сложными корреляциями.* Рассмотрим сначала тройные корреляции. Выберем в качестве нашего прототипа тройную корреляцию трех бесспиновых частиц, проходящую через точные состояния определенного углового момента, корреляционный процесс, обозначаемый как $j_i(l_i) J(l_j) J'(l_2) j_f$. Основная информация для корреляции та же, что и для более простой корреляции направление — направление: $\hat{l} \cdot \hat{k}$ равно нулю в каждом случае и j_i и j_f случайно ориентированы.

Для этого элементарного случая существует классическая корреляция, но функции, необходимые для классического описания, недостаточно известны. Это сразу становится ясным если задать вопрос: «Какие угловые функции дают надлежащее описание для трех векторов?» Для двух векторов очевидно, что должны входить функции Лежандра $P_\nu(\hat{k}_1 \cdot \hat{k}_2)$, поскольку они являются ортогональными функциями одного полярного угла, определяемого независимо от любой системы отсчета. Для трех векторов имеются три инвариантным образом определенных угла, и соответствующие ортонормированные угловые функции вряд ли вообще выглядят классическими. Подходящие функции обсуждались в разд. 17 гл. 6. Это вращательно инвариантные функции, определенные в виде

$$P_{\nu_0 \nu_1 \nu_2}(\hat{k}_0 \hat{k}_1 \hat{k}_2) \equiv (4\pi)^{\frac{3}{2}} (2\nu_0 + 1)^{-\frac{1}{2}} (2\nu_1 + 1)^{-\frac{1}{2}} (2\nu_2 + 1)^{-1} (i)^{\nu_0 + \nu_1 - \nu_2}$$

$$\begin{aligned} & \times \sum_{\alpha\beta\gamma} (-)^{\gamma} C_{\alpha\beta\gamma}^{v_0 v_1 v_2} Y_{v_0\alpha}(\hat{k}_0) Y_{v_1\beta}(\hat{k}_1) Y_{v_2-\gamma}(\hat{k}_2) \\ & = (-1)^{v_0-v_1} (i)^{v_0+v_1-v_2} I_{(v_0 v_1 v_2)}(\hat{k}_0, \hat{k}_1, \hat{k}_2). \end{aligned} \quad (7.8.18)$$

(Несмотря на появление в этой формуле коэффициентов Вигнера, это тем не менее классический результат, так как коэффициенты Вигнера встречаются здесь в контексте *общей векторной алгебры*. Например, функция P_{111} есть инвариантная, антисимметричная комбинация трех векторов $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{C}$ (с точностью до общей константы). Аналогично остальные функции представляют собой инварианты различных порядков (более подробно это обсуждается в разд. 17 гл. 6).

Функции $P_{v_0 v_1 v_2}$, определенные формулой (7.8.18), обладают следующими свойствами симметрии:

$$\begin{aligned} P_{v_0 v_1 v_2}(\hat{k}_0 \hat{k}_1 \hat{k}_2) & = (-1)^{v_0+v_1+v_2} P_{v_1 v_0 v_2}(\hat{k}_1 \hat{k}_0 \hat{k}_2) \\ & = (-1)^{v_0+v_1+v_2} P_{v_0 v_2 v_1}(\hat{k}_0 \hat{k}_2 \hat{k}_1). \end{aligned} \quad (7.8.19)$$

Все другие перестановки можно свести к произведениям этих двух. Таким образом, антисимметрия комбинации $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{C}$ согласуется с общим правилом (7.8.19).

Классическая тройная корреляция для реакции, определяемой угловыми моментами $j_i(l_0) J(l_1) J'(l_2)j_f$, должна выражаться в виде ряда от наших ортонормированных базисных функций:

$$\begin{aligned} W(\hat{k}_0 \hat{k}_1 \hat{k}_2) & = (4\pi)^{-3} \sum_{v_0 v_1 v_2} (2v_0+1)(2v_1+1)(2v_2+1) \\ & \times B_{v_0 v_1 v_2} P_{v_0 v_1 v_2}(\hat{k}_0 \hat{k}_1 \hat{k}_2). \end{aligned} \quad (7.8.20)$$

Это равенство является точным аналогом (7.8.1) для двойной корреляции; подобным же образом величину $B_{v_0 v_1 v_2}$ следует интерпретировать, как среднее значение функции $P_{v_0 v_1 v_2}$, вычисленное по всем возможным конфигурациям системы, совместимым с нашей информацией. Таким образом, имеем

$$B_{v_0 v_1 v_2} \equiv [P_{v_0 v_1 v_2}(\hat{k}_0 \hat{k}_1 \hat{k}_2)]_{av}. \quad (7.8.21)$$

Опуская несущественные подробности, рассмотрим сначала специальный случай, когда $j_i = j_f = 0$, а последовательностью угловых моментов является $0(l_0) J(l_1) J'(l_2)0$ с $J = l_0$ и $J' = l_2$.

Каждый из азимутальных углов при l_0, l_1, l_2 является *случайным*. Используя теорему сложения, выраженную равенствами (6.23) и (7.8.18), приходим к соотношению

$$\begin{aligned} B_{v_0 v_1 v_2} & = [P_{v_0 v_1 v_2}(\hat{k}_0 \hat{k}_1 \hat{k}_2)]_{av} \\ & = P_{v_0}(\hat{k}_0 \cdot \hat{l}_0) [P_{v_0 v_1 v_2}(\hat{l}_0 \hat{k}_1 \hat{k}_2)]_{av} \\ & = P_{v_0}(\hat{k}_0 \cdot \hat{l}_0) P_{v_1}(\hat{k}_1 \cdot \hat{l}_1) [P_{v_0 v_1 v_2}(\hat{l}_0 \hat{l}_1 \hat{k}_2)]_{av} \\ & = P_{v_0}(\hat{k}_0 \cdot \hat{l}_0) P_{v_1}(\hat{k}_1 \cdot \hat{l}_1) P_{v_2}(\hat{k}_2 \cdot \hat{l}_2) P_{v_0 v_1 v_2}(\hat{l}_0 \hat{l}_1 \hat{l}_2). \end{aligned} \quad (7.8.22)$$

Структура этого результата очевидна, поскольку мы последовательно считали $\hat{l}_0, \hat{l}_1$ и $\hat{l}_2$ осями для функции $P_{v_0 v_1 v_2}$ и усредняли по азимуту в каждом случае. Существенно новая черта — появление величины $P_{v_0 v_1 v_2}(\hat{l}_0 \hat{l}_1 \hat{l}_2)$, которая (это не-

обходимо отметить) является функцией трех векторов угловых моментов, образующих определенный треугольник с фиксированными сторонами и фиксированными углами. Поэтому три вектора лежат в одной плоскости и функция $P_{\nu_0\nu_1\nu_2}$ соответственно более проста, явный вид ее дается соотношением (7.8.18) и формулой (6.160) гл. 6. Более того, симметрия $P_{\nu_0\nu_1\nu_2}$ требует, чтобы в случаях, когда сумма $\nu_0 + \nu_1 + \nu_2$ равна нечетному целому числу, функция обращалась в нуль.

Остается лишь упомянуть теперь квантовомеханический аналог классической функции $P_{\nu_0\nu_1\nu_2}$, чтобы привести квантовомеханический результат для тройной корреляции. Эта функция (с точностью до множителя) есть вигнеровский $9j$ -коэффициент или, как это также известно, X -коэффициент Фано (см. примечание 7 в гл. 3):

$$P_{\nu_0\nu_1\nu_2}(\hat{J}_1\hat{J}') \sim i^{\nu_2-\nu_1-\nu_0} [(2J+1)(2J'+1)(2I_1+1)]^{\frac{1}{2}} X \begin{pmatrix} J_1 J' \\ J_1 J' \\ \nu_0 \nu_1 \nu_2 \end{pmatrix}. \quad (7.8.23)$$

Интересно заметить, что этот X -коэффициент (который специален в том смысле, что две его строки одинаковы) обращается в нуль в случае, когда сумма $\nu_0 + \nu_1 + \nu_2$ равна нечетному целому числу. Этот факт можно интерпретировать как квантовый аналог исчезновения величины $P_{\nu_0\nu_1\nu_2}(\hat{J}_1\hat{J}')$ для нечетных $\nu_0 + \nu_1 + \nu_2$, поскольку эти три угловых момента должны быть компланарными.

Формулу (7.8.23) нетрудно модифицировать, чтобы учесть начальные и конечные состояния с ненулевым, но ненаблюдаемым спином. Действительно сразу же видно, что требуемый результат в точности тот же, что и рассмотренный выше для общих начальных и конечных звеньев в корреляции направление — направление. В обоих случаях это упрощение обусловлено цилиндрическим усреднением вокруг $\hat{J}$ (или $\hat{J}'$).

В итоге для тройной корреляции трех бесспиновых излучений с последовательностью угловых моментов $j_i(l_0) J(l_1) J'(l_2)j_f$ получаем следующие выражения.

Классически:

$$\begin{aligned} W(\hat{k}_0\hat{k}_1\hat{k}_2) &= (4\pi)^{-3} \sum_{\nu_0\nu_1\nu_2} (2\nu_0+1)(2\nu_1+1)(2\nu_2+1) \\ &\times [P_{\nu_0}(\hat{k}_0 \cdot \hat{l}_0)P_{\nu_0}(\hat{l}_0 \cdot \hat{J})] \times [P_{\nu_1}(\hat{k}_1 \cdot \hat{l}_1)P_{\nu_0\nu_1\nu_2}(\hat{J}_1\hat{J}')] \\ &\times [P_{\nu_2}(\hat{k}_2 \cdot \hat{l}_2)P_{\nu_2}(\hat{l}_2 \cdot \hat{J}')] P_{\nu_0\nu_1\nu_2}(\hat{k}_0\hat{k}_1\hat{k}_2). \end{aligned} \quad (7.8.24)$$

Квантовомеханически:

$$\begin{aligned} W(\hat{k}_0\hat{k}_1\hat{k}_2) &= (4\pi)^{-3} (2I_1+1) (-)^{j_i-j_f-J+I_1+J'} \\ &\times \sum_{\nu_0\nu_1\nu_2} [(2\nu_0+1)(2\nu_1+1)(2\nu_2+1)]^{\frac{1}{2}} i^{\nu_2-\nu_1-\nu_0} \\ &\times \bar{Z}(l_0Jl_0J; j_i\nu_0) \bar{Z}(l_2J'l_2J'; j_f\nu_2) C_{000}^{l_1l_1\nu_1} X \begin{pmatrix} J_1 J' \\ J_1 J' \\ \nu_0 \nu_1 \nu_2 \end{pmatrix} \\ &\times P_{\nu_0\nu_1\nu_2}(\hat{k}_0\hat{k}_1\hat{k}_2). \end{aligned} \quad (7.8.25)$$

Коэффициенты $\bar{Z}$ определяются через универсальные функции углового момента в виде¹⁾

$$\bar{Z}(IJ'I'J';sv) = [(2I+1)(2I'+1)(2J+1)(2J'+1)]^{\frac{1}{2}} C_{000}^{II'v} W(IJ'I'J';sv). \quad (7.8.26)$$

Заметим, что эти коэффициенты являются квантовыми аналогами лежандровских членов, естественно возникающих в полуклассическом выводе формул (7.8.14). (Фазовый множитель под знаком суммы в (7.8.25) всегда равен ± 1 , так как $\nu_2 - \nu_1 - \nu_0$ всегда есть четное целое число.)

Поскольку основной нашей целью было дать иллюстрацию естественных оснований для интуитивного понимания $9j$ -символа, попытки различных возможных обобщений этого результата представляются здесь нецелесообразными.

Обратимся теперь к краткому обсуждению метода параметризации.

Эффективность процесса угловой корреляции как инструмента для спектроскопических исследований весьма усиливается тем обстоятельством, что замена, скажем, гамма-лучевого измерения альтернативным процессом измерения в корреляции может быть осуществлена параметрически, путем умножения каждого коэффициента Лежандра на соответствующий *параметр частицы* [3 — 5]. Этим способом в формулировку могут быть включены угловые корреляции внутренней конверсии [6] и корреляции кулоновского возбуждения [7, 8]. Это составляет важное обобщение корреляционной техники, но дальнейшее рассмотрение данного вопроса увело бы нас слишком далеко в сторону.

д. Релятивистский режим. Сложности, обусловленные релятивизмом (пуанкаре-симметрия), для двухчастичных процессов полностью ограничиваются спиновой кинематикой. Для двухчастичных процессов, которые определяются как реакции между парами частиц (и приводящие к парам частиц), понятие системы отсчета, характеризуемой исчезающим пространственным импульсом и точной энергией (как обсуждалось в разд. 2), может быть полностью обосновано. Следовательно, в этой системе отсчета составная система может быть охарактеризована квантовыми числами E , J и M , и пуанкаре-инвариантная матрица рассеяния разбивается на хорошо известные подматрицы S^J [9, 10].

Кинематические эффекты, осложняющие наблюдения спина, рассмотрены в разд. 7, г, д. Используя тот факт, что в выбранной системе отсчета полный импульс обращается в нуль: $\mathbf{P}_{\text{полн}} = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 = 0$, мы видим, что $\mathbf{P}_1 = -\mathbf{P}_2$, так что *тетрады, определенные для каждой из двух частиц* (как во входном, так и в выходном каналах), *согласуются по своим пространственным ориентациям*. Если обе частицы массивны, мы делаем заключение (см. разд. 7, г), что существуют *коммутирующие тетрадные поляризационные операторы* $S^{(i)}(1)$, $S^{(i)}(2)$ для пары (массивных) частиц 1 и 2, такие, что тетрадный оператор спина канала $S^{(i)} \equiv S^{(i)}(1) + S^{(i)}(2)$ точно так же существует и хорошо определен. Из этого следует, что спин канала является релятивистски хорошо определенным понятием. Более того, поскольку оператор L относительного орбитального углового

¹⁾ Таблицы этих коэффициентов приведены в приложении таблиц.

момента хорошо определен (для массивных частиц), кинематическое разложение с использованием тетрадного формализма $J^{(i)} = L^{(i)} + S^{(i)}$ также существует.

Эти замечания делают справедливым и для релятивистского режима описание матрицы рассеяния¹⁾ S^{Π} в схеме Вигнера-Эйзенбуда [11] для спина канала: $S^J \rightarrow \langle \alpha' l' s' | S^{\Pi} | \alpha s \rangle$, где α обозначает пару («альтернативы») массивных частиц, l — орбитальный угловой момент и s — спин канала. Соответственно, мы обосновали и результат для углового распределения реакции — приведенное ранее соотношение (7.8.14) в релятивистском режиме.

Используя подход Вигнера — Эйзенбуда к двухчастичным реакциям, можно получить исчерпывающее описание углового распределения ядерных реакций [12].

Дифференциальное сечение для реакции, в которой пара массивных частиц, обозначаемых индексом α_1 (ядро мишени и налетающая частица) и обладающих спином канала s_1 , вступают в реакцию и образуют другую пару массивных частиц α_2 со спином канала s_2 , дается формулой

$$d\sigma(\alpha_2 s_2; \alpha_1 s_1) = \frac{\lambda_{s_1}^2}{2s_1 + 1} \sum_v B_v(\alpha_2 s_2; \alpha_1 s_1) P_v(\cos \theta) d\Omega, \quad (7.8.27)$$

где

$$B_v(\alpha_2 s_2; \alpha_1 s_1) = \frac{1}{4} (-1)^{s_1 - s_2} \sum \bar{Z}(l_{1a} J_a l_{1b} J_b; s_1 v) \bar{Z}(l_{2a} J_a l_{2b} J_b; s_2 v) \times \text{Re} \{ (1 - S^{J_a l_{1a}})^*_{\alpha_2 s_2 l_{2a}; \alpha_1 s_1 l_{1a}} \times (1 - S^{J_b l_{1b}})_{\alpha_2 s_2 l_{2b}; \alpha_1 s_1 l_{1b}} \}, \quad (7.8.28)$$

здесь S^{Π} обозначает матрицу рассеяния, а суммирование ведется по $J_a, \Pi_a, J_b, \Pi_b, l_{1a}, l_{2a}, l_{1b}, l_{2b}$ (λ_s обозначает волновой вектор k^{-1} во входном канале).

Типичное слагаемое в выражении (7.8.28) представляется схемой угловых моментов

$$s_1 \begin{pmatrix} l_{1a} \\ l_{1b} \end{pmatrix} J_a \begin{pmatrix} l_{2a} \\ l_{2b} \end{pmatrix} s_2. \quad (7.8.29)$$

Для этого первого звена в реакции (индекс 1) мы имеем общий коэффициент $\bar{Z}(l_{1a} J_a l_{1b} J_b; s_1 v)$; аналогично второе звено вводит общий коэффициент $\bar{Z}$. Эти два звена дают вклад в корреляцию, взвешенный динамическим множителем

$$\text{Re} \{ (1 - S^{J_a l_{1a}})^*_{\alpha_2 s_2 l_{2a}; \alpha_1 s_1 l_{1a}} \times (1 - S^{J_b l_{1b}})_{\alpha_2 s_2 l_{2b}; \alpha_1 s_1 l_{1b}} \}. \quad (7.8.30)$$

Важной чертой корреляционного процесса для чистых состояний был тот факт, что отдельные звенья *факторизовались*. Насколько общим является это свойство? Формула (7.8.27) для углового распределения не выявляет действительную степень общности этого свойства, поскольку в такой записи звенья тесно связаны вместе через различные элементы матрицы S^{Π} . Но элементы матрицы S^{Π} не являются все независимыми в силу двух основных ограничений: уни-

¹⁾ Мы предполагаем, что четность выполняется, так что S -матрица имеет характеристики J и Π (четность).

тарности (сохранения потока) и симметрии (обратимости), предполагающей инвариантность относительно обращения времени. Вследствие этих условий матрицу рассеяния S^{Π} можно записать в виде

$$S^{J\Pi} = U_{J\Pi}^{-1} \exp(2i\Delta_{J\Pi}) U_{J\Pi}, \quad (7.8.31)$$

где $U_{J\Pi}$ вещественно и ортогонально, а $\Delta_{J\Pi}$ вещественно и диагонально. Таким образом, $(N \times N)$ -матрица $U_{J\Pi}$ определяет N вещественных собственных векторов U_k , где $k = 1, 2, \dots, N$. С помощью этих собственных векторов матрицу S^{Π} можно записать в спектральной форме, что приводит к формуле

$$B_i(x_2 s_2; x_1 s_1) = (-1)^{s_2 - s_1} \sum_{J_a \Pi_a} \sum_{J_b \Pi_b} \sum_{k_a=1}^N \sum_{k_b=1}^N \sin(\delta_{J_a \Pi_a k_a}) \sin(\delta_{J_b \Pi_b k_b}) \times \cos(\delta_{J_a \Pi_a k_a} - \delta_{J_b \Pi_b k_b}) \times T, \quad (7.8.32)$$

где T дается выражением

$$T = \left[\sum_{l_1 a l_1 b} \bar{Z}(l_1 a J_a l_1 b J_b; s_1 v) U(J_a \Pi_a k_a)_{x_1 s_1 l_1 a} U(J_b \Pi_b k_b)_{x_1 s_1 l_1 b} \right] \times \left[\sum_{l_2 a l_2 b} \bar{Z}(l_2 a J_a l_2 b J_b; s_2 v) U(J_a \Pi_a k_a)_{x_2 s_2 l_2 a} U(J_b \Pi_b k_b)_{x_2 s_2 l_2 b} \right]. \quad (7.8.33)$$

Полученная формула, хотя и весьма сложная на вид, в действительности более проста, чем выражение (7.8.28), поскольку она имеет меньше дополнительных условий на содержащиеся в ней слагаемые. (Остаются условия ортонормированности собственных векторов U_k .) Отметим следующие черты этого выражения.

1. Промежуточное состояние появляется билинейным образом, и каждое появление характеризуется тремя числами J , Π и k (последнее обозначает конкретный собственный вектор $N \times N$ -матрицы рассеяния).

2. Два звена в корреляции («входной» и «выходной») каналы в терминологии ядерных реакций) входят через коэффициент T , который факторизуется на две отдельные части, а все элементы коэффициента T являются строго *вещественными*. Для частного случая, когда промежуточное состояние является *точным* (т.е. имеет определенные значения J , Π и k), видно, что весь коэффициент B факторизуется.

Описанная формулировка для релятивистских двухчастичных реакций оказывается недостаточной в одном отношении. Это относится к реакциям, в которых проводят измерения поляризации. Как отмечалось независимо рядом авторов [13, 14], процедура спина канала для поляризации [15] представляется неоправданно сложной по сравнению с более естественной релятивистской процедурой, использующей спиральность. Такое рассмотрение имеет и то дополнительное преимущество, что как безмассовые, так и массивные частицы могут рассматриваться единообразно.

Тетрадное описание спина (тетрадное разложение оператора Паули — Любаньского, см. разд. 7, г, д) легко и естественно приспособляется

к спиральности. Ориентируя пространственный импульс вдоль третьего направления тетрады, можно определить оператор спиральности как тетрадный оператор $S^{(3)} - \lambda$ для каждой из частиц (массивной или безмассовой). Отсюда следует, что во входном канале проекцией углового момента является спиральность $\lambda_a - \lambda_b$, где a, b характеризуют пару движущихся в противоположных направлениях налетающих частиц. Составная система (угловой момент J) должна иметь такое же магнитное квантовое число $M = \lambda_a - \lambda_b$, если оно измеряется в той же системе отсчета. Аналогично выходной канал имеет спиральность $\lambda_c - \lambda_d$ (c, d обозначают вылетающие частицы), что должно согласоваться с составным угловым моментом, если измерение проводится в той же системе отсчета.

Поскольку две системы отсчета, определяемые входной и выходной тетрадами, отличаются вращением $R \rightarrow U$, мы можем заключить: *угловое распределение для реакции $a + b \rightarrow c + d$, проходящей через составное состояние J с точными спиральностями $\lambda_a, \lambda_b, \lambda_c, \lambda_d$, пропорционально матричному элементу вращения*

$$|D_{\lambda_a - \lambda_b, \lambda_c - \lambda_d}^J(U)|^2. \quad (7.8.34)$$

Эта изящная и простая формулировка релятивистской угловой корреляции вытекает непосредственно из фундаментальной работы Вигнера [16].

С помощью общей S -матричной формулировки этому результату можно придать более законченную форму, но мы не станем здесь этого делать.

Литература

1. Christy R. F., Proceedings of the University of Pittsburg Conference on Nuclear Structure, pp. 421ff., Dept. of Physics, Univ. of Pittsburg, Pittsburg, 1957.
Труды конференции Питтсбургского университета по структуре ядер.
2. Wigner E. P., Rev. Mod. Phys., 29, 255 (1957).
Релятивистская инвариантность и квантовые явления.
3. Lloyd S. P., Phys. Rev., 85, 904 (1952).
Угловая корреляция двух последовательных ядерных излучений. См. также: Gardner J. W., Proc. Phys. Soc., A62, 763 (1949); A64, 238; 1136 (1951).
Корреляция по направлениям между последовательными электронами внутренней конверсии. Интерференция в корреляции по направлениям электронов конверсии.
4. Racah G., Phys. Rev., 84, 910 (1951).
Корреляция по направлениям последовательных ядерных излучений.
5. Biedenharn L. C., Rose M. E., Rev. Mod. Phys., 25, 729 (1953).
Угловые корреляции ядерных излучений.
6. Hager R. S., Seltzer E. C., Nuclear Data, A4; 1; 397 (1968); A6, 1 (1969).
Таблицы внутренней конверсии. Часть I. Коэффициенты конверсии K^- , L^- , M -оболочек для Z от 30 до 103. Часть II. Параметры частиц в зависимости от направлений и поляризации для Z от 30 до 103. Часть III. Коэффициенты для анализа эффектов проникаемости во внутренней конверсии и ЕО внутренняя конверсия.
7. Adler K. et al., Rev. Mod. Phys., 28, 432 (1956).
Исследование ядерной структуры ири помощи электромагнитного возбуждения ускоренными нонами.
8. Biedenharn L. C., Brussaard P. J., Coulomb Excitation, Clarendon, Oxford, 1965.
Кулоновское возбуждение.
9. de Benedetti S., Nuclear Interactions, Wiley, New York, 1964. [Имеется перевод: Бенедетти С. Де. Ядерное взаимодействие. — М.: Атомиздат, 1968.]

10. Goldberger M. L., Watson K. M., Collision Theory, Wiley, New York, 1964. [Имеется перевод: Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. — М.: Мир, 1967.]
11. Wigner E. P., Eisenbud L., Phys. Rev., 72, 29 (1947).
Высшие угловые моменты и дальнедействующее взаимодействие в резонансных реакциях.
12. Blatt J. M., Biedenharn L. C., Rev. Mod. Phys., 24, 258 (1952).
Угловое распределение рассеяния и кросс-сечения реакций.
13. Чжон Гуань-чжао, Широков М. И. — ЖЭТФ, 1958, т. 34, с. 1230.
14. Jacob M., Wick G.-C., Ann. Phys. (N. Y.), 7, 404 (1959).
Об общей теории столкновений для частиц со спином.
15. Simon A., Welton T. A., Phys. Rev., 94, 943 (1954).
Поляризация от изолированных резонансов.
См. также Simonius M., Phys. Rev. Lett., 19, 279 (1967).
Определение амплитуд рассеяния из поляризационных экспериментов.
16. Wigner E. P., Ann. Math., 40, 149 (1939).
Об унитарных представлениях неоднородной группы Лоренца.
См. также Houtappel R. M. F., van Dam H., Wigner E. P., Rev. Mod. Phys., 37, 595 (1965).
Концептуальный базис и использование принципов геометрической инвариантности.
17. Biedenharn L. C., Louck J. D., Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

9. Некоторые приложения к структуре ядра

а. Качественное рассмотрение. Первоначально структура атомных ядер понималась как многочастичная задача в квантовой механике, включающая два типа частиц — нейтроны и протоны (нуклоны), число которых может меняться от $N = 1$ (водород) до $N \approx 300$ (уран и искусственные тяжелые ядра). Эта трудная задача стала еще более сложной, когда стало ясно, что сами нуклоны являются совсем не элементарными, а составными объектами, принадлежащими к большим семействам, называемым адронами, которые взаимодействуют путем обмена другими составными объектами — мезонами. Поэтому ядерная физика не может быть в принципе до конца понята без предварительного понимания *субъядерной физики* («физики элементарных частиц»). Очевидно, что проблема ядерных взаимодействий представляется задачей исключительной сложности.

В этих условиях единственным возможным подходом остается феноменологический подход, ставящий своей целью определить те понятия и степени свободы, которые применимы для описания характерных ядерных явлений. Можно ожидать (и это действительно так), что симметричные соображения и, в частности, формализм углового момента должны иметь первостепенное значение в таких исследованиях.

В действительности метод углового момента играет гораздо более важную, господствующую роль в исследовании структуры ядра, чем можно было ожи-

к спиральности. Ориентируя пространственный импульс вдоль третьего направления тетрады, можно определить оператор спиральности как тетрадный оператор $S^{(3)} - \lambda$ для каждой из частиц (массивной или безмассовой). Отсюда следует, что во входном канале проекцией углового момента является спиральность $\lambda_a - \lambda_b$, где a, b характеризуют пару движущихся в противоположных направлениях налетающих частиц. Составная система (угловой момент J) должна иметь такое же магнитное квантовое число $M = \lambda_a - \lambda_b$, если оно измеряется в той же системе отсчета. Аналогично выходной канал имеет спиральность $\lambda_c - \lambda_d$ (c, d обозначают вылетающие частицы), что должно согласоваться с составным угловым моментом, если измерение проводится в той же системе отсчета.

Поскольку две системы отсчета, определяемые входной и выходной тетрадами, отличаются вращением $R \rightarrow U$, мы можем заключить: *угловое распределение для реакции $a + b \rightarrow c + d$, проходящей через составное состояние J с точными спиральностями $\lambda_a \lambda_b \lambda_c \lambda_d$, пропорционально матричному элементу вращения*

$$|D_{\lambda_a - \lambda_b, \lambda_c - \lambda_d}^J(U)|^2. \quad (7.8.34)$$

Эта изящная и простая формулировка релятивистской угловой корреляции вытекает непосредственно из фундаментальной работы Вигнера [16].

С помощью общей S -матричной формулировки этому результату можно придать более законченную форму, но мы не станем здесь этого делать.

Литература

1. Christy R. F., Proceedings of the University of Pittsburg Conference on Nuclear Structure, pp. 421ff., Dept. of Physics, Univ. of Pittsburg, Pittsburg, 1957.
Труды конференции Питтсбургского университета по структуре ядер.
2. Wigner E. P., Rev. Mod. Phys., **29**, 255 (1957).
Релятивистская инвариантность и квантовые явления.
3. Lloyd S. P., Phys. Rev., **85**, 904 (1952).
Угловая корреляция двух последовательных ядерных излучений. См. также: Gardner J. W., Proc. Phys. Soc., **A62**, 763 (1949); **A64**, 238; 1136 (1951).
Корреляция по направлениям между последовательными электронами внутренней конверсии. Интерференция в корреляции по направлениям электронов конверсии.
4. Racah G., Phys. Rev., **84**, 910 (1951).
Корреляция по направлениям последовательных ядерных излучений.
5. Biedenharn L. C., Rose M. E., Rev. Mod. Phys., **25**, 729 (1953).
Угловые корреляции ядерных излучений.
6. Hager R. S., Seltzer E. C., Nuclear Data, **A4**, 1; 397 (1968); **A6**, 1 (1969).
Таблицы внутренней конверсии. Часть I. Коэффициенты конверсии K -, L -, M -оболочек для Z от 30 до 103. Часть II. Параметры частиц в зависимости от направлений и поляризации для Z от 30 до 103. Часть III. Коэффициенты для анализа эффектов проникаемости во внутренней конверсии и EO внутренняя конверсия.
7. Adler K. et al., Rev. Mod. Phys., **28**, 432 (1956).
Исследование ядерной структуры при помощи электромагнитного возбуждения уско-ренными ионами.
8. Biedenharn L. C., Brussaard P. J., Coulomb Excitation, Clarendon, Oxford, 1965.
Кулоновское возбуждение.
9. de Benedetti S., Nuclear Interactions, Wiley, New York, 1964. [Имеется перевод: Бенедетти С. Де. Ядерное взаимодействие. — М.: Атомиздат, 1968.]

10. Goldberger M. L., Watson K. M., Collision Theory, Wiley, New York, 1964. [Имеется перевод: Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. — М.: Мир, 1967.]
11. Wigner E. P., Eisenbud L., Phys. Rev., **72**, 29 (1947).
Высшие угловые моменты и дальнедействующее взаимодействие в резонансных реакциях.
12. Blatt J. M., Biedenharn L. C., Rev. Mod. Phys., **24**, 258 (1952).
Угловое распределение рассеяния и кросс-сечения реакций.
13. Чжон Гуань-чжао, Широков М. И. — ЖЭТФ, 1958, т. 34, с. 1230.
14. Jacob M., Wick G.-C., App. Phys. (N. Y.), **7**, 404 (1959).
Об общей теории столкновений для частиц со спином.
15. Simon A., Welton T. A., Phys. Rev., **94**, 943 (1954).
Поляризация от изолированных резонансов.
См. также Simonius M., Phys. Rev. Lett., **19**, 279 (1967).
Определение амплитуд рассеяния из поляризационных экспериментов.
16. Wigner E. P., Ann. Math., **40**, 149 (1939).
Об унитарных представлениях неоднородной группы Лоренца.
См. также Houtappel R. M. F., van Dam H., Wigner E. P., Rev. Mod. Phys., **37**, 595 (1965).
Концептуальный базис и использование принципов геометрической инвариантности.
17. Biedenharn L. C., Louck J. D., Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

9. Некоторые приложения к структуре ядра

а. Качественное рассмотрение. Первоначально структура атомных ядер понималась как многочастичная задача в квантовой механике, включающая два типа частиц — нейтроны и протоны (нуклоны), число которых может меняться от $N = 1$ (водород) до $N \approx 300$ (уран и искусственные тяжелые ядра). Эта трудная задача стала еще более сложной, когда стало ясно, что сами нуклоны являются совсем не элементарными, а составными объектами, принадлежащими к большому семейству, называемым адронами, которые взаимодействуют путем обмена другими составными объектами — мезонами. Поэтому ядерная физика не может быть в принципе до конца понята без предварительного понимания *субъядерной физики* («физики элементарных частиц»). Очевидно, что проблема ядерных взаимодействий представляется задачей исключительной сложности.

В этих условиях единственным возможным подходом остается феноменологический подход, ставящий своей целью определить те понятия и степени свободы, которые применимы для описания характерных ядерных явлений. Можно ожидать (и это действительно так), что симметричные соображения и, в частности, формализм углового момента должны иметь первостепенное значение в таких исследованиях.

В действительности метод углового момента играет гораздо более важную, господствующую роль в исследовании структуры ядра, чем можно было ожи-

дать априори; это является следствием справедливости оболочечной ядерной модели Майер и Йенсена, подтвержденной экспериментами. Движение отдельных нуклонов приближенно можно представить как движение независимых частиц в усредненном потенциале, поэтому орбиты характеризуются в основном параметрами углового момента. Из этого следует, что структура ядра качественно подобна в таком подходе атомной структуре; принцип построения обеих основан преимущественно на понятии углового момента. [В отличие от этого в субъядерной физике угловой момент сам по себе играет не столь значительную роль (хотя и важную при индексировании состояний), поскольку составляющие характеризуются в основном посредством негеометрических симметрий (изоспин, странность, гиперзаряд), а для этих симметрий аналог понятия орбитального углового момента отсутствует.]

От явлений, обусловленных независимыми частицами, отличаются те явления, в которых имеются коллективные степени свободы, основанные на кооперативных движениях многих нуклонов. Удивительно, что такие явления можно действительно рассматривать как совместимые, в определенном смысле, с оболочечной моделью, приписывая коллективные свойства несферическому искажению среднего потенциала. Метод углового момента снова играет существенную роль, поскольку это искажение является преимущественно квадрупольным и может быть охарактеризовано при помощи модели ядерного ротатора (ротаторы рассматриваются в разд. 10).

Дадим краткий обзор содержания этого раздела. Применимость метода углового момента к ядерной структуре мы проиллюстрируем сначала на примере *оболочечной модели*, а затем применим эту модель к описанию свойств короткодействующих взаимодействий. Из этого рассмотрения мы выделим понятие *парного взаимодействия* и покажем, как такое взаимодействие можно интерпретировать на языке теории углового момента (*квасизоспин*). Заметим для ясности, что нашей целью в данном разделе является не обзор физики ядерной структуры, а скорее концентрирование внимания на тех специальных разделах ядерной физики, в которые понятие и метод углового момента внесли наиболее существенный вклад.

6. Оболочечная модель ядра Майер и Йенсена. Как следствие лежащей в основе кинематической симметрии каждое стабильное атомное ядро обладает основным состоянием (квантовым состоянием минимальной энергии), которое характеризуется (точными) инвариантными значениями массы и спина. Приближенные квантовые числа четность и изоспин (см. ниже) завершают список основных (не зависящих от модели) характеристик. Вследствие связи с электромагнитным полем эти основные состояния обладают статическими электромагнитными мультипольными моментами (зарядом, магнитным дипольным моментом и т.п.), ограниченными (см. разд. 6) величиной собственного спина. Ясно, что теория углового момента является основой для понимания и определения этих характеристик.

Теория ядерной структуры стремится дать конструктивное описание ядерных систем (основного и возбужденных состояний) как составных, образован-

ных из взаимодействующих нейтронов и протонов. Ввиду сложной природы самих составляющих, это возможно лишь в ограниченной области энергий¹⁾.

Оболочечная модель ядра в принципе ограничена в еще большей степени в том смысле, что главная ее цель состоит в описании самых нижних состояний. В этой модели предполагается, что движение составляющих нуклонов по существу является движением независимых частиц в некотором среднем поле, а остаточное межчастичное взаимодействие образует малое возмущение. Вызывало и до сих пор вызывает удивление, что такая простая модель²⁾ может настолько успешно описывать экспериментальные данные.

Волновой функцией для системы независимых частиц является просто (тензорное) произведение функций $\prod_{\alpha=1}^N \phi_{\alpha}$, где $\{\phi_{\alpha}(x_{\alpha})\}$ — волновые функции отдельных частиц. Принцип запрета Паули требует, чтобы волновая функция для тождественных частиц (фермионов) была антисимметричной относительно перестановки любой пары частиц. Это требование для волновой функции можно выразить в виде

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \mathcal{A} \prod_{\alpha=1}^N \phi_{\alpha}(x_{\alpha}), \quad (7.9.1)$$

где $\mathcal{A}$ — антисимметризирующая операция. Это вносит *корреляции* в движение «независимых частиц», которые очень важны с точки зрения физики.

Для определения волновых функций отдельных частиц необходимо указать конкретный вид среднего потенциала, который приближенно считается постоянным по всему объему ядра. Легко получить решение для следующих двух моделей: а) потенциала прямоугольной ямы (для простоты с бесконечно высокими стенками при ядерном радиусе) и б) потенциала изотропного гармонического осциллятора (в трех измерениях). Энергетические уровни для таких потенциалов

¹⁾ Логически подобная ситуация имеет место и для структуры атома, в которой пренебрегается степенями свободы атомного ядра. Энергетический масштаб ~ 1 эВ для чисто электронных структур по сравнению с величиной $\sim 10^6$ эВ для ядерных эффектов, показывает, что такое разделение является весьма благоприятным. Для ядер мезонные эффекты соответствуют энергии ~ 100 МэВ, так что здесь разделение является не столь благоприятным.

²⁾ Оболочечная модель в принципе была предложена гораздо раньше Эдзассером [1] и Голдшмидтом [2] для описания самых первых экспериментальных данных. Скептицизм относительно приемлемости этой модели основывался на двух характеристиках известных в то время «оболочечно-модельных систем» (системы планет и системы электронов в атомах), которые с очевидностью отсутствуют в ядерных системах. Во-первых, в них отсутствует большое центральное тело, которое оказывает основное влияние на движение составляющих (в действительности именно относительно малые взаимодействия между планетами, а также между электронами в атоме, делают движение составляющих почти независимым друг от друга). Во-вторых, существование среднего потенциала может быть обосновано, если взаимодействие является дальнодействующим и имеет всюду один и тот же знак, что справедливо для системы планет и для электронов, но, конечно, не имеет места для ядерных сил. Лишь большое количество экспериментальных данных, которые можно было интерпретировать на основе оболочечной модели, вынудило принять модель Майера и Йенсена [3].

характеризуются квантовым числом орбитального углового момента l ; они изображены схематически на рис. 7.4

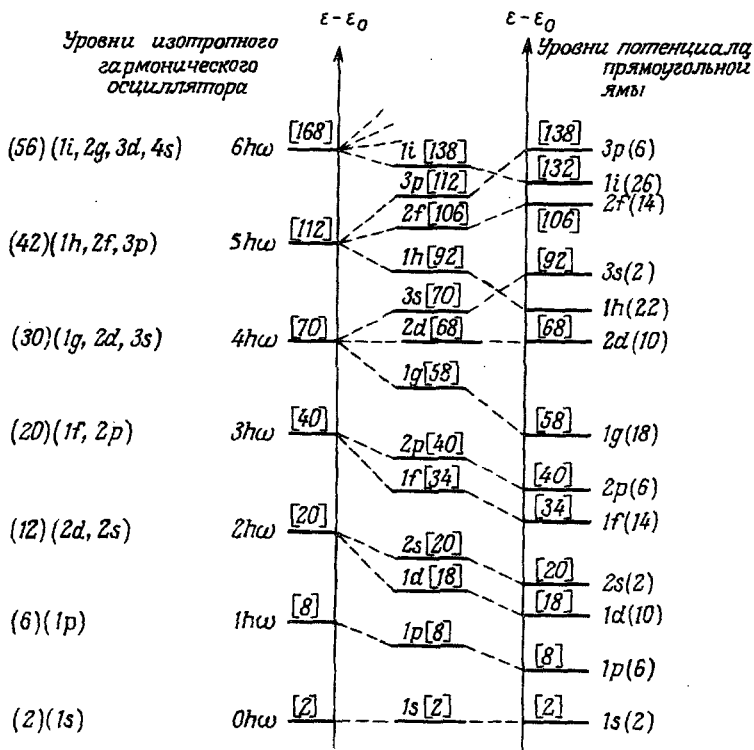


РИС. 7.4. Система уровней трехмерного изотропного гармонического осциллятора (слева) в сравнении с уровнями для потенциала прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками (справа). Вырождение каждого состояния приведено в круглых скобках, а полное число нижележащих уровней вместе с данным состоянием указано в квадратных скобках [3].

Экспериментальные данные, накопленные в обоснование оболочечной модели, показывали, что некоторые группы нуклонов обладают особой стабильностью (по аналогии с замкнутыми оболочками инертных газов в атомной структуре, где это гораздо более резко выражено). Эти «магические числа» нуклонов равны 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, ... Как видно из рис. 7.4, только первые три магических числа описываются этой моделью. Для описания остальных «магических чисел» Майер и Йенсен (независимо) предположили, что среднее взаимодействие

содержит также спин-орбитальное взаимодействие вида¹⁾

$$V_{\text{spin-orbit}} = -\alpha(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}. \quad (7.9.2)$$

Вычисление результирующего расщепления энергии включает коэффициент Рака

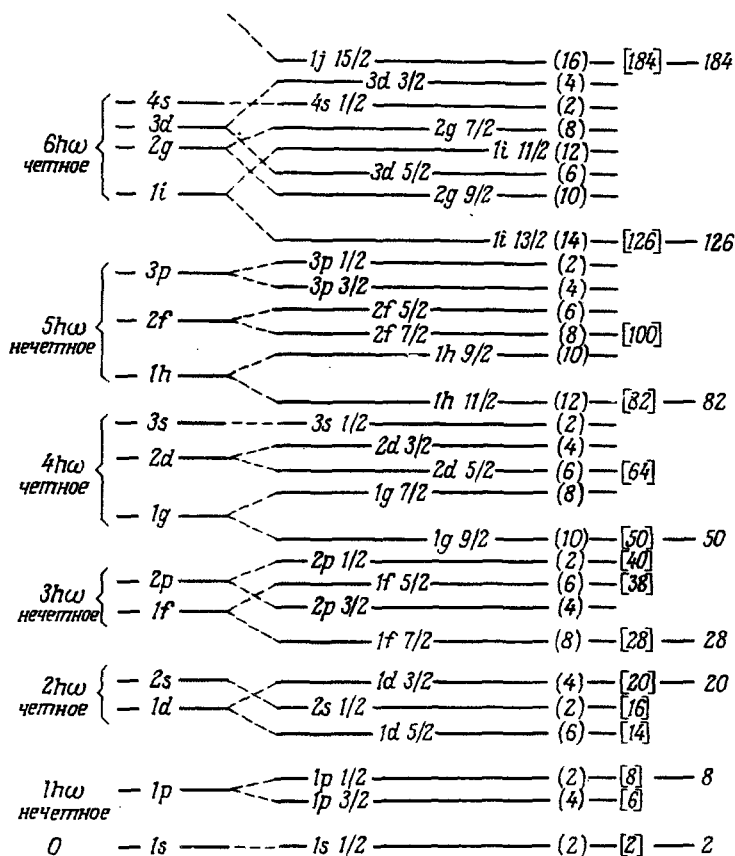


РИС. 7.5. Собственные состояния углового момента оболочечной модели ядра в случае спин-орбитальной связи (посередине) в сравнении с соответствующими состояниями трехмерного осциллятора (слева) [3].

¹⁾ В этом разделе l , s , j и i обозначают орбитальный, спиновый, полный ($l + s$) и изоспиновый угловые моменты соответственно отдельного нуклона. Аналогично L , S , J и I обозначают соответствующие угловые моменты физической системы, состоящей из двух или более нуклонов.

$$\begin{aligned}
 I \cdot s|nl\frac{1}{2};jm\rangle &= -\frac{1}{2}[6(l+1)(2l+1)]^{\frac{1}{2}}W(l\frac{1}{2};l\frac{1}{2})|nl\frac{1}{2};jm\rangle \\
 &= \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]|nl\frac{1}{2};jm\rangle.
 \end{aligned}
 \quad (7.9.3)$$

Таким образом, сдвиги энергии равны

$$\Delta E = -\chi(r) \times \begin{cases} l & \text{для } j = l + \frac{1}{2} \\ -l-1 & \text{для } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (7.9.4)$$

Для притягивательной спин-орбитальной связи¹⁾ состояние $j = l + \frac{1}{2}$ оказывается наименьшим.

Получаемая (схематическая) система энергетических уровней одной частицы показана на рис. 7.5, где указана последовательность магических чисел.

Замечания. а) С точки зрения настоящей монографии существенным элементом в оболочечной модели Майер — Йенсена является то, что состояния отдельной частицы представляют собой совокупность состояний углового момента, упорядоченных по энергии. Таким образом, задача построения ядерных волновых функций становится задачей о связывании угловых моментов, а проблема остаточных взаимодействий становится технически задачей анализа тензорных операторов. Именно по этой причине в книгах, описывающих модель ядерных оболочек, значительное внимание уделяется методу углового момента.

б) Для предсказания ядерных спинов основного состояния в более общих случаях, чем случай ядер в окрестности замкнутых оболочек, схему уровней необходимо дополнить правилами связывания (аналогичными правилу Хунда в атомной физике). Были приняты два эмпирических правила.

Правило Майер — Йенсена: угловой момент четного числа однотипных нуклонов в оболочке равен нулю; следовательно, для основного состояния нечетного ядра (N или Z нечетное) угловой момент равен угловому моменту одного нуклона.

Правило Нордхейма: для нечетного числа нейтронов и нечетного числа протонов мы различаем четыре случая в зависимости от значений $j_n = l_n \pm \frac{1}{2}$ и $j_p = l_p \pm \frac{1}{2}$:

+ + или - -	$J = j_n + j_p.$	(7.9.5)
+ - или - +	$J = j_n - j_p .$	

Эти правила описывают по существу все спины основных состояний ядер, и этот факт является впечатляющим аргументом в пользу такой модели.

Обоснование самих этих правил на основе свойств ядерного взаимодействия проводилось различными методами (ниже мы рассмотрим одно из таких обоснований).

в) Модель оболочек предсказывает все ядерные свойства, которые зависят от одночастичных матричных элементов, в частности для электромагнитных мультипольных моментов.

¹⁾ В атомной физике имеется спин-орбитальная связь (томасовский член), обусловленная релятивистским эффектом. В отличие от нее ядерный спин-орбитальный член на два порядка величины больше и имеет противоположный знак; он интерпретируется как обусловленный влиянием векторных мезонов.

Для магнитного дипольного момента мы имеем модель Шмидта. Выбирая магнитный момент μ в виде линейной комбинации орбитального углового момента l и спина s , получаем

$$\mu = -\frac{eh}{2mc}(g_l l + g_s s). \quad (7.9.6)$$

где g_l и g_s — орбитальное и спиновое гиромагнитное отношения, а $-e$ и m — заряд и масса нуклона. На основе метода углового момента для эффективного гиромагнитного отношения находим выражение, содержащее коэффициенты Рака (см. разд. 3):

$$\begin{aligned} \mu_j &\equiv -g_j \left(\frac{eh}{2mc} \right) j, \\ g_j &= \frac{g_l [j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)]}{2j(j+1)} + \\ &+ \frac{g_s [j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)]}{2j(j+1)}. \end{aligned} \quad (7.9.7)$$

Согласно модели Шмидта, для магнитного момента нечетных ядер с нечетным числом протонов получаем значение

$$(\text{нечетное } Z, \text{ четное } N) : \mu_j = \frac{eh}{2m_p c} \begin{cases} 1 + \frac{2.29}{j} j & \text{для } j = l + \frac{1}{2} \\ 1 - \frac{2.29}{j+1} j & \text{для } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (7.9.8)$$

Соответственно для нечетных ядер с нечетным числом нейтронов, получаем

$$(\text{четное } Z, \text{ нечетное } N) : \mu_j = \frac{eh}{2m_n c} \begin{cases} -\frac{1.91}{j} j & \text{для } j = l + \frac{1}{2} \\ \frac{1.91}{j+1} j & \text{для } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (7.9.9)$$

Эта простая модель оказывается удивительно успешной¹⁾.

Для электрических квадрупольных моментов ситуация не согласуется с моделью оболочек, за исключением случаев вблизи замкнутых оболочек. Это расхождение было устранено в результате развития модели деформированных ядер [4, 5].

г) Характерной чертой энергетических уровней в модели Майер — Йенсена является понижение состояний $j = l + \frac{1}{2}$ до заполнения энергетической оболочки для $N = 50, 82$ и 126 . Это приводит к введению состояний *различной* четности и *большого* j в заполнение оболочки. Поразительное следствие такого эффекта состоит в том, что возбужденные состояния с большими j лежат относительно близко над основными состояниями, имеющими малые значения j (и про-

¹⁾ В выражениях (7.9.8) и (7.9.9) использованы значение $g_l = 1$ и эмпирические значения g_s для протона и нейтрона.

тивоположную четность). Поэтому получаемые из таких состояний путем излучения гамма-лучей более низкие состояния обладают необычно большими временами жизни. Существование таких *изомерных состояний* вблизи некоторых значений чисел нуклонов (определяемых магическими числами — так называемые («острова изомерии»)) явилось убедительным подтверждением оболочечной модели.

в. Квантовое число изоспина. Метод углового момента входит в описание структуры ядра и другим, совершенно отличным способом вследствие формального введения негеометрической квантовой переменной, называемой изоспином. Нейтрон и протон рассматриваются как два проявления одной и той же частицы — *нуклона*, имеющего по определению изоспин $\frac{1}{2}$, причем протон обладает проекцией изоспина $+\frac{1}{2}$, а нейтрон — проекцией изоспина $-\frac{1}{2}$ ¹⁾.

Линейные унитарные преобразования, действующие на этот двумерный изоспиновый базис (преобразования изоспина), формально эквивалентны линейным унитарным унитарным преобразованиям, которые действуют на двумерное неприводимое пространство спинового углового момента $\frac{1}{2}$. Отсюда следует, что метод углового момента переносится на *изоспиновую группу* $SU(2)$.

Понятие изоспина было введено Гейзенбергом [6] в 1932 г. в большой степени в качестве изящного счетного средства; более фундаментальный статус изоспина стал очевидным в супермультиплетной модели ядра Вигнера [7] в 1937 г., а также благодаря введению изоспина в основанную на группе $SU(3)$ модель Гелл-Манна — Неемана в физике элементарных частиц (1961 г. [8, 9]).

Поскольку два состояния нуклона являются физически различимыми (за счет заряда протона и разности масс нейтрона и протона), не очевидно, что понятие изоспина имеет истинный смысл. С экспериментальной точки зрения значение понятия изоспина вытекает из наблюдаемой эквивалентности (в синглетном спиновом состоянии) ядерных взаимодействий nn , pp и np . Равенство взаимодействий nn и pp есть менее ограничительное понятие (зарядовая симметрия); равенство всех трех взаимодействий называется зарядовой независимостью (см. [9а, 10]). Таким образом, *сильные взаимодействия* ядерной физики, как обнаружено экспериментально, инвариантны относительно изоспиновых вращений и поэтому не отличают нейтроны от протонов. Электромагнитные взаимодействия, очевидно, не сохраняют изоспин, и (вероятно) это нарушение симметрии описывает нейтрон-протонное расщепление масс.

Понятие изоспина позволяет изящным способом выразить принцип запрета Паули: *волновые функции для произвольной системы нуклонов должны быть антисимметричными относительно перестановки координат (пространственного положения, спина и изоспина) любых двух нуклонов*. Важно заметить, что этот так называемый «обобщенный принцип Паули» является не истинным

¹⁾ В настоящее время это является общепринятым. Согласно первоначальному определению изоспина в ядерной физике, нейтрону приписывалась проекция изоспина $+\frac{1}{2}$; в физике элементарных частиц было выбрано противоположное определение.

обобщением (включающим дополнительное предположение), а частью удобного формализма. Следствия зарядовой независимости могут быть выведены без введения изоспиновых переменных или обобщенного принципа Паули (см. [4], т. 1, стр. 32).

2. *Свойства короткодействующего взаимодействия.* Чтобы достичь понимания физического источника правил связывания, позволивших предсказать спины основных состояний и утверждавших оболочечную модель, рассмотрим свойства короткодействующего двухчастичного остаточного взаимодействия в модели оболочек [3]. Поскольку состояния оболочечной модели следует считать справедливыми в наинизшем порядке, мы можем рассчитать влияние остаточного взаимодействия как возмущение первого порядка. Мы увидим, что такое вычисление представляет собой интересное упражнение по применению метода углового момента¹⁾.

LS-связь. Представляется поучительным воспользоваться для частиц сначала *LS*-связью, а не *jj*-связью (см. разд. 5). Рассмотрим поэтому пару тождественных нуклонов из одной ядерной оболочки (характеризуемой орбитальным угловым моментом l). Пространственная волновая функция для пары нуклонов, соответствующая связыванию $L = l_1 + l_2$ двух орбитальных угловых моментов, имеет вид²⁾

$$\Phi_{(ll)LM_L}(x_1, x_2) = \sum_{mm'} C_{mm'M_L}^{llL} R_l(r_1) R_l(r_2) Y_{lm}(\hat{x}_1) Y_{lm'}(\hat{x}_2). \quad (7.9.10)$$

Воспользовавшись свойствами симметрии коэффициента Вигнера (разд. 12 гл. 3), находим, что относительно перестановки пространственных координат $x_1 \leftrightarrow x_2$ пространственная волновая функция обладает симметрией $\Phi_{(ll)LM_L}(x_2, x_1) = (-1)^L \Phi_{(ll)LM_L}(x_1, x_2)$. Для нуклонов одного типа (двух протонов или двух нейтронов) изоспин имеет значение $I = 1$; поэтому антисимметричные состояния имеют вид

L нечетное: спиновая функция $|S = 1, M_s\rangle$, $M_s = 1, 0, -1$;

L четное: спиновая функция $|S = 0, M_s = 0\rangle$. (7.9.11)

Представим схематически остаточное взаимодействие как взаимодействие с нулевым радиусом (типа «дельта-функции»):

$$\begin{aligned} V_{\text{residual}}(x_1, x_2) &= -V_0 \delta(|x_1 - x_2|) \\ &= -V_0 r_1^{-2} \delta(r_1 - r_2) \sum_{k\mu} Y_{k\mu}(\hat{x}_1) Y_{k\mu}^*(\hat{x}_2). \end{aligned} \quad (7.9.12)$$

¹⁾ Применение метода углового момента для обоснования правила Нордхейма как свойства короткодействующих сил (со спиновым обменом) впервые было осуществлено Де-Шалитом [11].

²⁾ В обозначении радиальных волновых функций мы опускаем всякое упоминание главного квантового числа.

Тогда после применения теории возмущений энергия взаимодействия принимает вид

$$\Delta E = \langle (l^2) L M_L | V_{\text{residual}} | (l^2) L M_L \rangle = -V_0 F_0 (2l+1)^2 \begin{pmatrix} l & l & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2.$$

$$F_0 \equiv \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} r^2 dr (R_l(r))^4. \quad (7.9.13)$$

$3j$ -коэффициент $\begin{pmatrix} l & l & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ обращается в нуль, если L не является четным; соответственно энергия взаимодействия обращается в нуль для $S = 1$ (триплетные спиновые состояния). Для синглетных состояний сдвиг энергии ΔE можно задать явным образом, используя тот факт, что соответствующий $3j$ -коэффициент для четного L имеет значение (см. (3.182) и (3.194) в гл. 3)

$$\begin{pmatrix} l & l & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{l+\frac{1}{2}L} (l+\frac{1}{2}L)!}{(L/2)!(L/2)!(l-\frac{1}{2}L)!} \left[\frac{(2l-L)!L!L!}{(2l+L+1)!} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (7.9.14)$$

Наибольший сдвиг энергии имеет место для $L = 0$, и мы находим для него

$$(\Delta E)_{L=0} = -V_0 F_0 (2l+1). \quad (7.9.15)$$

Сдвиг энергии быстро убывает с ростом L . Для больших значений l , мы имеем предельную форму

$$\frac{(\Delta E)_L}{(\Delta E)_0} \sim \left[\frac{(L-1)!!}{L!!} \right]^2. \quad (7.9.16)$$

Последний результат показывает, что для следующего энергетического уровня, т.е. для $L = 2$, мы получаем лишь одну четвертую сдвига энергии уровня $L = 0$. Для больших L отношение $(\Delta E)_L/(\Delta E)_0$ стремится к нулю как $2/\pi L$.

Эти результаты, по-видимому, указывают на то, что взаимодействие с нулевым радиусом затрагивает преимущественно состояния с $L = 0$, оставляя все остальные состояния лишь слегка возмущенными. Такой вывод делался в литературе, однако он не вполне корректен, поскольку предельные формы справедливы только для $l \gg L$ и несостоятельны для $2l \approx L$. Полезно продолжить этот результат дальше, с тем чтобы получить правильное соотношение.

Для этой цели найдем сначала асимптотическое выражение для $3j$ -символа, входящего в сдвиг энергии, т.е. коэффициента $\begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2$. Полагая $g = (a+b+c)/2$, имеем

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 = \left[\frac{g!}{(g-a)!(g-b)!(g-c)!} \right]^2 \frac{(2g-2a)!(2g-2b)!(2g-2c)!}{(2g+1)!}. \quad (7.9.17)$$

Если взять a, b, c большими по сравнению с единицей, то формула Стирлинга дает асимптотическое соотношение

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sim \frac{1}{2\pi [g(g-a)(g-b)(g-c)]^{\frac{1}{2}}}. \quad (7.9.18)$$

Здесь в множителе под знаком корня нетрудно узнать архимедову формулу¹⁾ для площади треугольника со сторонами (a, b, c) и с полупериметром g . Записывая площадь в виде: площадь $= (\frac{1}{2})ab \sin \theta$, где θ — угол между a и b , находим более привлекательную формулу для полученного результата:

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sim (\pi ab \sin \theta)^{-1}. \quad (7.9.19)$$

Применим теперь этот результат к рассматриваемой задаче, т.е. к формуле (7.9.13) для сдвига энергии. При этом замечаем следующие черты.

1. Асимптотический сдвиг энергии *симметричен относительно* значения $L = l$, где сдвиг достигает минимального значения $\Delta E \sim -4F_0 V_0 / \pi$.

2. Максимальный сдвиг энергии в соответствии с асимптотическим результатом достигается для $\theta = 0$ и π ($L = 0$ и $L = 2l$). Но в этой области асимптотическое соотношение несправедливо, поэтому приходится обратиться к формулам

$$\begin{aligned} (\Delta E)_{L=0} &= -V_0 F_0 (2l + 1) \simeq -2V_0 F_0 l, \\ (\Delta E)_{L=2l} &\simeq \frac{2}{\pi} V_0 F_0 l^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (7.9.20)$$

Следовательно, хотя сдвиг энергии становится неограниченно большим при $l \rightarrow \infty$, как для $L = 0$, так и для $L = 2l$ сдвиг энергии для $L = 0$ преобладает.

3. Имеется интересное физическое объяснение этих результатов. С физической точки зрения сдвиг энергии пропорционален перекрытию двух волновых функций; для больших угловых моментов волновые функции становятся вращающимися «дисками», перпендикулярными оси вращения. Ясно, что наибольшее перекрытие возникнет в том случае, когда диски лежат в одной и той же плоскости, т.е. когда $\theta = 0$ или π . Это *классический* результат (асимптотическая формула (7.9.19)).

Но при *полуклассическом* рассмотрении ориентация вектора углового момента не является точной (принцип неопределенности²⁾). Только для «тривиального случая», $L = 0$ неопределенность исчезает; эта ситуация соответствует $\theta = 0$, так что перекрытие действительно является точным, даже при полуклассическом рассмотрении. Для другого максимального случая $\theta = \pi$ принцип неопределенности требует некоторой потери перекрытия, так что этот сдвиг энергии имеет меньшую величину, чем для $\theta = 0$, как видно из обсуждения в п. 2. (Действительное значение $(\Delta E)_{L=2l} \propto l^{1/2}$ показывает, что этот эффект обусловлен флуктуациями.)

4. Существует связь между результатом этого вычисления сдвига энергии и прототипной угловой корреляцией для бесспиновых частиц (см. разд. 8). Мы воспользуемся этой формальной аналогией ниже при вычислении в рамках jj -связи для вывода некоторых соотношений, очень сложного в других подходах.

¹⁾ Эту формулу обычно приписывают Герону из Александрии, однако ван дер Варден [12] показал, что это неверно, и приписал эту формулу Архимеду.

²⁾ Соотношения неопределенности для углового момента рассматриваются в работе [41].

jj-связь. Чтобы применить эти результаты к короткодействующему взаимодействию двух нуклонов в конфигурации с *jj*-связью, целесообразно воспользоваться (*LS* — *jj*)-преобразованием (см. соотношение (7.5.97))

$$[(l_1 \frac{1}{2})_{j_1} (l_2 \frac{1}{2})_{j_2}]_{JM} \rangle = \sum_{LS} [(2S+1)(2L+1)(2j_1+1)(2j_2+1)]^{\frac{1}{2}} \times \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ j_1 & j_2 & J \end{Bmatrix} |[(l_1 l_2)_L (\frac{1}{2} \frac{1}{2})_S]_{JM} \rangle. \quad (7.9.21)$$

Сдвиг энергии в *LS*-конфигурации для $I = 1$, как было найдено выше, имеет вид

$$(\Delta E)_{LSJ} = \begin{cases} 0 & L \text{ нечетное, } S = 1. \\ -V_0 F_0 (2l+1)^2 \begin{pmatrix} l & l & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 & L \text{ четное, } S = 0. \end{cases} \quad (7.9.22)$$

Следовательно, сдвиг энергии в *jj*-конфигурации дается выражением

$$\Delta E(lj, lj; J) = (2j+1)^2 \sum_{\substack{S=0,1 \\ L=|J-S|, \dots, J+S}} (2S+1)(2L+1) \times \begin{Bmatrix} l & l & L \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S \\ j & j & J \end{Bmatrix}^2 (\Delta E)_{LSJ}. \quad (7.9.23)$$

Для нуклонов одного типа изоспин $I = 1$; в этом случае единственные ненулевые вклады появляются за счет $S = 0$ и $L = J$. Таким образом,

$$\Delta E(lj, lj; J)_{I=1} = -(2j+1)^2 (2J+1) (V_0 F_0) (2l+1)^2 \begin{pmatrix} l & l & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \times \begin{Bmatrix} l & l & J \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ j & j & J \end{Bmatrix}^2. \quad (7.9.24)$$

Последний результат упрощается в двух направлениях: $9j$ -символ с равным нулю одним аргументом (на основе равенства (3.325)) кратен $6j$ -коэффициенту, в нашем случае $\begin{Bmatrix} l & l & J \\ j & j & \frac{1}{2} \end{Bmatrix}$, произведение $\begin{pmatrix} l & l & J \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l & l & J \\ j & j & \frac{1}{2} \end{Bmatrix}$ равно величине $-\begin{pmatrix} j & j & J \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} / (2l+1)$ (см. формулу (П. 2) в приложении к разд. 4).

С учетом этих упрощений находим

$$\Delta E(lj, lj; J)_{I=1} = -\frac{(2j+1)^2}{2} (V_0 F_0) \begin{pmatrix} j & j & J \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2. \quad (7.9.25)$$

Этот результат имеет вид, весьма напоминающий формулу (7.9.13), найденную для бесспинового случая, и как мы увидим, такая аналогия не случайна.

Результат для нулевого изоспина также может быть получен этим методом, но такой непосредственный подход представляется и трудным, и неинформативным. Поэтому мы поступим иначе.

Поскольку наша цель состоит в иллюстрации метода углового момента, рассмотрим вновь LS -вычисление с самого начала. Для двухчастичной волновой функции с LS -связью коэффициенты связывания угловых моментов дают полный ответ. Для орбитальной части волновой функции имеем

$$\Phi_{(l_1 l_2)LM_L}(x_1, x_2) = \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2 M_L}^{l_1 l_2 L} R_{l_1}(r_1) R_{l_2}(r_2) Y_{l_1 m_1}(\hat{x}_1) Y_{l_2 m_2}(\hat{x}_2). \quad (7.9.26)$$

Взаимодействие типа дельта-функции сводится к наложению условия $x_1 = x_2$ как на начальную, так и на конечную волновые функции в матричном элементе (7.9.13). Исследуем поэтому, какое действие это оказывает на сами волновые функции. Применяя условие $x_1 = x_2$ к орбитальной части волновой функции в выражении (7.9.26) и используя закон произведения (3.436) для сферических функций одинакового аргумента, получаем

$$\Phi_{(l_1 l_2)LM_L}(x, x) = \left\{ \left[\frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}{4\pi(2L + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} C_{000}^{l_1 l_2 L} \right\} \times R_{l_1}(r) R_{l_2}(r) Y_{LM_L}(\hat{x}). \quad (7.9.27)$$

Этот результат можно интерпретировать следующим образом. Коэффициент в фигурных скобках дает амплитуду вероятности того, что две частицы образуют составное состояние углового момента (LM_L) . Точно такая же амплитуда вероятности появляется, как можно видеть, и в нашем прототипном процессе угловой корреляции для бесспиновых частиц; иначе говоря, волновая функция в (7.9.27) формально аналогична (если взять $x_1 \rightarrow -x$) составному состоянию, образованному двумя частицами равных и противоположно направленных импульсов. С этой точки зрения нули на месте аргументов $3j$ -коэффициента, являющихся магнитными квантовыми числами, соответствуют тому факту, что обе сталкивающиеся частицы бесспиновые.

Рассмотрим теперь волновую функцию с jj -связью с той же точки зрения. Волновая функция, соответствующая схеме связывания $j_i = l_i + s_i$ ($i = 1, 2$), $J = j_1 + j_2$, имеет вид

$$\Psi_{[(l_1 \frac{1}{2}) j_1 (l_2 \frac{1}{2}) j_2] J M}(x_1, x_2) = \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1 \mu_2 M}^{j_1 j_2 J} \psi_{(l_1 \frac{1}{2}) j_1 \mu_1}(x_1) \psi_{(l_2 \frac{1}{2}) j_2 \mu_2}(x_2). \\ \psi_{(l_i \frac{1}{2}) j_i \mu_i}(x_i) \equiv R_{l_i}(r_i) \sum_{m_i v_i} C_{m_i v_i \mu_i}^{l_i \frac{1}{2} j_i} Y_{l_i m_i}(\hat{x}_i) | \frac{1}{2}, v_i \rangle. \quad (7.9.28)$$

Если мы так ориентируем координатную систему, что третья ось совпадает с $\hat{x}_1$, и воспользуемся равенством

$$Y_{l_1 m_1}(0, 0, 1) = \delta_{m_1, 0} \left(\frac{2l_1 + 1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}},$$

то волновая функция $\psi_{(l_1 \frac{1}{2})j_1 \mu_1}$ примет вид

$$\psi_{(l_1 \frac{1}{2})j_1 \mu_1}(0, 0, r_1) = \left(\frac{2l_1 + 1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} R_{l_1}(r_1) C_{0\mu_1 \mu_1}^{l_1 \frac{1}{2} j_1} | \frac{1}{2}, \mu_1 \rangle. \quad (7.9.29)$$

Это соответствует «системе координат спиральности», в которой частица имеет спиральность $\mu_1 = \pm \frac{1}{2}$. В общей системе координат волновая функция подвергается вращению, так что мы получаем

$$\psi_{(l_1 \frac{1}{2})j_1 \mu_1}(\mathbf{x}_1) = \left(\frac{2l_1 + 1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} R_{l_1}(r_1) \sum_{\nu_1} C_{\nu_1 \nu_1}^{l_1 \frac{1}{2} j_1} D_{\mu_1 \nu_1}^{j_1*}(\hat{\mathbf{x}}_1) | \frac{1}{2}, \nu_1 \rangle', \quad (7.9.30)$$

где $\hat{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{x}_1/r_1$ связано с $\hat{\mathbf{e}}_3 = \text{col}(0, 0, 1)$ при помощи ортогонального преобразования $\hat{\mathbf{x}}_1 = R\hat{\mathbf{e}}_3$. Тогда специальная матрица вращения $D^{j_1}(\hat{\mathbf{x}}_1)$ определяется как $D^{j_1}(\alpha\beta 0)$ для $\hat{\mathbf{x}}_1 = (\cos\alpha \sin\beta, \sin\alpha \sin\beta, \cos\beta)$. Новая спиновая функция имеет вид

$$| \frac{1}{2}, \nu_1 \rangle' \equiv \sum_{\mu_1} D_{\mu_1 \nu_1}^{\frac{1}{2}}(\hat{\mathbf{x}}_1) | \frac{1}{2}, \mu_1 \rangle.$$

Появляющаяся в (7.9.30) матрица вращения не нормирована относительно элемента объема $d^3\mathbf{x}$. Соотношение (3.138) показывает, что мы должны перенормировать выражение (7.9.30) посредством множителя $[4\pi/(2j_1 + 1)]^{1/2}$, чтобы сравнить с соответствующей функцией $\phi_{l_1 \mu_1}(\mathbf{x}_1) = R_{l_1}(r_1) Y_{l_1 \mu_1}(\hat{\mathbf{x}}_1)$. Замечая, что фигурирующие в (7.9.30) коэффициенты Вигнера имеют значения

$$C_{0\nu\nu}^{l \frac{1}{2} j} = \left(\frac{(2j + 1)}{2(2l + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} \text{sign}(j - l - \nu), \quad \text{sign } 0 \equiv +1,$$

мы находим, что подходящей функцией со спином $\frac{1}{2}$, которую следует сравнивать с функцией спина 0 $\phi_{l_1 \mu_1}(\mathbf{x}_1)$, является

$$\phi_{(l_1 \frac{1}{2})j_1 \mu_1}(\mathbf{x}_1) = \frac{R_{l_1}(r_1)}{\sqrt{2}} \sum_{\nu_1} \text{sign}(j_1 - l_1 - \nu_1) D_{\mu_1 \nu_1}^{j_1*}(\hat{\mathbf{x}}_1) | \frac{1}{2}, \nu_1 \rangle'. \quad (7.9.31)$$

Воспользовавшись этой формулой для правой части соотношения (7.9.28) и упрощая при помощи равенства (3.188), мы получаем (спин $\frac{1}{2}$)-аналог функции со спином 0 (7.9.27):

$$\begin{aligned} \Phi_{[(l_1 \frac{1}{2})j_1, (l_2 \frac{1}{2})j_2]JM}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) &= \frac{1}{2} R_{l_1}(r) R_{l_2}(r) \\ &\times \sum_{\nu_1 \nu_2} (\text{фаза}) C_{\nu_1 \nu_2, \nu_1 + \nu_2}^{j_1 j_2 J} D_{M, \nu_1 + \nu_2}^{J*}(\hat{\mathbf{x}}) | \frac{1}{2}, \nu_1 \rangle' | \frac{1}{2}, \nu_2 \rangle', \\ (\text{фаза}) &= \text{sign}(j_1 - l_1 - \nu_1) \text{sign}(j_2 - l_2 - \nu_2). \end{aligned} \quad (7.9.32)$$

При определении сдвигов энергии следует затем рассмотреть каждую из четырех компонент, $(\nu_1, \nu_2) = (\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2})$, этой композитной волновой функции.

Чтобы определить, как спиральности влияют на компоненты в этой композитной волновой функции (7.9.32), заметим, что для $\nu_1 = \nu_2 = \frac{1}{2}$ коэффициент $C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{j_1 j_2 J}$ обращается в нуль, если J не является нечетным ($j_1 = j_2$); аналогично для $\nu_1 = \nu_2 = -\frac{1}{2}$. Таким образом, эти две компоненты соответствуют изоспину $I = 0$. Остальные две компоненты $\nu_1 = -\nu_2 = \pm \frac{1}{2}$ соответствуют изоспину $I = 0$ для нечетного J и изоспину $I = 1$ для четного J .

Рассмотрим случай изоспина $I = 1$. Для сдвига энергии немедленно получаем

$$\Delta E(lj, lj; J = \text{четное}, I = 1) = \frac{1}{2}(-V_0 F_0)(2j+1)^2 \begin{pmatrix} j & j & J \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2, \quad (7.9.33)$$

что в точности совпадает с полученным ранее выражением (7.9.25).

Для случая изоспина $I = 0$ определим сначала сдвиг энергии для каждой из трех компонент $\nu_1 + \nu_2 = 1, 0, -1$ и просуммируем. Таким способом для сдвига энергии при $I = 0$ находим выражение

$$\Delta E(lj, lj; J = \text{нечетное}, I = 0) = \frac{1}{2}(-V_0 F_0)(2j+1)^2 \left[\begin{pmatrix} j & j & J \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}^2 + \begin{pmatrix} j & j & J \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}^2 \right]. \quad (7.9.34)$$

(Важно заметить, что в этом вычислении слагаемое с $\nu_1 + \nu_2 = 0$ дает множитель 2, точно так же как для аналогичного случая при $I = 1$.)

Конечно, эти результаты можно было получить прямым вычислением, используя либо равенство (7.9.23), либо необходимые тождества с угловыми моментами для упрощения матричных элементов, появляющихся в состояниях (7.9.28). Реальным преимуществом использованной выше процедуры является не столько простота, сколько тот факт, что она «объясняет» физическую причину появления этих частных $3j$ -коэффициентов.

Сдвиг энергии для изоспина $I = 1$, даваемый формулой (7.9.33), существенно отличается от результата (7.9.13) с LS -связью. В частности, сдвиг энергии для случая $I = 1$ быстро и монотонно уменьшается¹⁾ от $J = 0$ до $J = 2j - 1$. В отличие от этого сдвиг энергии для $I = 0$ имеет общую форму перевернутого U (с большими сдвигами как для $J = 1$, так и для $J = 2j$) и, следовательно, качественно ведет себя подобно обсуждавшемуся выше результату с LS -связью.

Весьма примечательно, что эти качественные аспекты остаточного ядерного взаимодействия, которые были выявлены на самых ранних этапах развития оболочечной модели Майер — Йенсена, получили существенное обоснование, исходя из все более точных и многочисленных экспериментальных данных, накопленных с тех пор. Недавно Шиффер [12a] в обзоре, в котором исследуется остаточное нуклон-нуклонное взаимодействие в орбитах оболочечной модели (Майер — Йенсена) для элементов всей периодической таблицы, обнаружил, что взаимодействие типа дельта-функции всегда качественно справедливо, а также почти справедливо количественно, особенно для орбит с тождественными частицами.

д. Парное взаимодействие (синьорити). Парное взаимодействие является схематическим взаимодействием, извлекаемым из свойств короткодействующего взаимодействия (примером которого является взаимодействие типа дельта-функции в синглетно-четных состояниях предыдущего раздела). Соотношение

¹⁾ Имеется физическое объяснение этого эффекта в терминах проекции спина ($= \cos^2 \frac{1}{2}\theta$), на которую умножается бесспиновый (с LS -связью) результат. Этот множитель компенсирует возрастание беспинового результата при $\theta \rightarrow \pi$.

(7.9.33) показывает, что в этом случае существенному воздействию подвергается только состояние с $J = 0$, а для $J > 0$ эффект незначителен. Парное взаимодействие абстрагирует эти черты и, таким образом, определяется как действующее *только* на состояние с $J = 0$.

Соответственно оператор парного взаимодействия q_{12} определяется как двухчастичный вращательно-инвариантный оператор, такой, что для двух частиц в j^2 -конфигурации взаимодействие обращается в нуль, если пара не связана в состояние с $J = 0$, а для $J = 0$ имеет значение $(2j + 1)$. В явном виде имеем

$$\langle jj; JM | q_{12} | jj; J'M' \rangle \equiv (2j + 1) \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{J0}. \quad (7.9.35)$$

Оператор q_{12} впервые был введен Рака для определения — для f -оболочки ($I = 3$) в атомной спектроскопии — нового квантового числа «синьоритн» (обозначаемого через ν от древнееврейского слова *vethek*, означающего старшинство). Соответственно оператор q_{12} обычно называют оператором синьорити (старшинства). Ввиду тесной связи этого оператора с короткодействующими взаимодействиями, которые играют весьма существенную роль в ядерной физике, наибольшее развитие и применение понятие синьорити получило в ядерной физике для j -оболочек (j полуцелое).

Важно подчеркнуть, что хотя оператор q_{12} был выведен из короткодействующего взаимодействия, из его определения видно, что в действительности q_{12} является *нелокальным* оператором¹⁾ и лишь аппроксимирует дельта-функцию (а следовательно, локальность) в ограниченном пространстве функций одной j -оболочки.

Двухчастичные конфигурации в j -оболочке обладают симметрией $(-1)^{J+1}$ относительно перестановки пространственных спинов (как можно видеть на основе симметрии коэффициента Вигнера $C_{mm; M}^{jjJ}$ относительно перестановки двух j). Отсюда следует, что оператор синьорити действует на нуклоны только в симметричной (изоспин $I = 1$) парной конфигурации.

Существенная идея, мотивирующая введение оператора q_{12} , состоит в том, что пары частиц, связанных в состояние с $J = 0$, являются в определенном смысле «инертными» элементами в многочастичной волновой функции. При таком подходе наиболее важными являются как раз *несвязанные* частицы. (Как будет показано ниже, квантовое число синьорити ν определяет число несвязанных частиц.) Это согласуется качественно со многими эмпирическими результатами оболочечной модели. Очевидно, добавление $(J = 0)$ -пар к волновой функции не затрагивает полный угловой момент; но поскольку пары имеют $I = 1$, изоспин может быть подвержен изменению. Фактически наиболее успешными являются приложения понятия синьорити к связыванию тождественных нуклонов (одних нейтронов или одних протонов), для которых изоспином можно пренебречь.

Чтобы понять смысл оператора синьорити q_{12} , воспользуемся определением (7.9.35) и преобразованием от базиса связанных волновых функций $j_1 + j_2 = J$ к

¹⁾ Как подчеркнул Андерсон [13], оператор спаривания нарушает также и галлилееву инвариантность.

базису несвязанных m, m' в соответствии с

$$|jm; jm'\rangle = \sum_j C_{m, m', m+m'}^{jjJ} |(jj)J, m + m'\rangle. \quad (7.9.36)$$

В результате имеем

$$\langle jm'; jm''' | q_{12} | jm; jm'' \rangle = \delta_{m'', -m} \delta_{m''', -m'} (-1)^{m-m'}. \quad (7.9.37)$$

Полученное равенство можно интерпретировать таким образом, что пара состояний $\{|jm\rangle, |jm''\rangle\}$ рассеивается в другую пару состояний $\{|jm'\rangle, |jm'''\rangle\}$ в том и только том случае, если *состояния в каждой паре связываются посредством обращения времени* (т.е. используя результат работы [41] $T|j, m\rangle = (-1)^{j-m}|j, -m\rangle$). Если для пары имеется такая связь, то матричный элемент для рассеяния равен 1. Если воспользоваться фазовым соглашением обращения времени и ограничиться рассмотрением только $(2j+1)/2 \equiv \Omega$ независимых пар (связанных обращением времени), то оператор q_{12} может быть записан как матрица размерности Ω в элементарном виде

$$q_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (7.9.38)$$

Эту матрицу легко диагонализировать, поскольку она обладает двумя свойствами: $\text{tr} q_{12} = \Omega$ и $(q_{12})^2 = \Omega q_{12}$. Отсюда следует, что $\Omega^{-1} q_{12}$ является идемпотентом ранга один и, следовательно, имеет одно ненулевое собственное значение Ω и $(\Omega - 1)$ нулевых собственных значений.

Собственный вектор, соответствующий собственному значению Ω , является взвешенной когерентной комбинацией связанных обращением времени антисимметричных пар:

$$\psi^{(12)} = \sum_{m=-j}^j (-1)^{j-m} \psi_{jm}^{(1)} \psi_{j,-m}^{(2)}. \quad (7.9.39)$$

Двухчастичные состояния этого типа имеют широкое распространение в физике; чаще всего их называют «когерентными состояниями», поскольку они представляют кооперативный эффект взаимодействующих частиц, занимающих большое число вырожденных уровней. (Помимо ядерной физики наиболее важным примером является сверхпроводящее состояние, описываемое посредством парных состояний с импульсами, связанными обращением времени [14, 15].)

е. Квазиспин. Применение в ядерной физике оператора спаривания и понятия синьорити сильно облегчается благодаря тому обстоятельству, что *эти приложения являются не более и не менее как использованием аппарата углового момента в еще одном облике — облике квазиспина*. (Это обстоятельство можно рассматривать либо как свидетельство возрастающего значения углового момента, либо, несколько скромнее, как естественное человеческое стремление эксплуатировать знакомые методы всюду, где это возможно.)

Понятие квазиспина является дальнейшим развитием того понятия, на котором основывается *отображение Йордана* в гл. 5. Если имеется конечное пространство $\mathcal{H}$, — для определенности возьмем пространство $\mathcal{H}_j$, натянутое на

$(2j + 1)$ состояний $|jm\rangle$ j -оболочки, — то отображение Йордана позволяет ассоциировать с каждым оператором $\mathcal{O}$, который переводит $\mathcal{H}_j$ в себя же, две операторные реализации¹⁾:

Бозонная реализация

$$\mathcal{O} \rightarrow \sum_{mm'}^j \mathcal{O}_{mm'} a_m \bar{a}_{m'}, \quad (7.9.40)$$

где определяющими коммутаторными соотношениями являются $[\bar{a}_{m'}, a_m] = \delta_{mm'}$, а все остальные коммутаторы равны нулю.

Фермионная реализация

$$\mathcal{O} \rightarrow \sum_{mm'} \mathcal{O}_{mm'} b_m \bar{b}_{m'}, \quad (7.9.41)$$

где определяющими антикоммутаторными соотношениями являются $\{\bar{b}_{m'}, b_m\} = \delta_{mm'}$, а все остальные антикоммутаторы равны нулю.

Обратившись к гл. 5, вспоминаем, что отображение Йордана сохраняет все коммутационные соотношения для семейства операторов $\{\mathcal{O}\}$. Поскольку нам известны явные тензорные операторы v_q^k , которые служат в качестве базиса для $\{\mathcal{O}\}$, — таковыми являются единичные тензорные операторы, матричные элементы которых есть коэффициенты Вигнера $C_{mqm'}^{jkj}$, — мы можем осуществить отображение Йордана в явном виде:

$$v_q^k \rightarrow \sum_{mm'} C_{mqm'}^{jkj} \begin{cases} a_m \bar{a}_{m'} & (\text{бозоны}), \\ b_m \bar{b}_{m'} & (\text{фермионы}). \end{cases} \quad (7.9.42)$$

В частности, оператор углового момента j с точностью до инвариантного множителя есть не что иное, как v_q^1 ($q = +1, 0, -1$).

(Чтобы понять физический смысл этого построения, полезно заметить, что бозонные и фермионные операторы не обязательно считать операторами, рождающими (или уничтожающими) реальные частицы (как это в общем случае имеет место в теории поля), но можно рассматривать как операторы, рождающие (уничтожающие) элементарные возбуждения некоторой системы вблизи ее основного состояния [16 — 18]. Например, можно представить себе (бозонные) возбуждения жидкости (ядерной модели жидкой капли) или (фермионные) возбуждения ядерной оболочечной структуры²⁾).

Естественным развитием этих идей представляется рассматривать операторы, которые рождают (или уничтожают) пары частиц или даже более сложные кластеры. Тем самым отображение Йордана обобщается до рассмотрения опе-

¹⁾ Бозонные и фермионные операторы следует обозначать a_m^α и b_m^α , где α — индекс частицы, указывающий на то, что бозон (фермион) ассоциируется с пространством $\mathcal{H}_\alpha$ одночастичных состояний, появляющимся на α -м месте в тензорном произведении пространств $\mathcal{H}_j \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_j \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_j$. Для краткости мы опускаем индекс α , восстанавливая его там, где это необходимо.

²⁾ В таком более общем подходе, матричные элементы операторов $\{a\}$ и $\{b\}$ называются «генеалогическими коэффициентами» [19, 20]

раторов, действующих на пары (а в общем случае на последовательности) состояний в тензорном произведении пространств¹⁾.

Рассмотрим теперь операторы, которые рожают (или уничтожают) пару частиц. Чтобы угловой момент оставался без изменения, сама пара при своем образовании должна давать нулевой угловой момент. Таким образом, имеем (для фермионов)

$$\begin{aligned} Z_+ &\equiv \frac{1}{2}(2j+1)^{\frac{1}{2}} \sum_{m'} C_{m'-m,0}^{jj0} b_m b_{-m} \\ &= \frac{1}{2} \sum_m (-)^{j-m} b_m b_{-m}. \end{aligned} \quad (7.9.43)$$

(Здесь предполагается, что $2j$ равно нечетному целому числу.)

Эрмитово сопряжение к Z_+ имеет вид

$$Z_- \equiv (Z_+)^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_m (-)^{j-m} \bar{b}_{-m} \bar{b}_m. \quad (7.9.44)$$

По построению операторы $Z_{\pm}$ коммутируют с оператором углового момента j или с отображением Йордана этого оператора.

Вычислим затем коммутатор $[Z_+, Z_-]$. Воспользовавшись правилами антикоммутации для фермионных операторов и считая, что $2j$ есть нечетное целое число, находим

$$[Z_+, Z_-] = 2 \sum_m (b_m \bar{b}_m - \bar{b}_m b_m) / 4 \equiv 2Z_0. \quad (7.9.45)$$

Наконец, легко находим последнее коммутационное соотношение

$$[Z_0, \dot{Z}_{\pm}] = \pm Z_{\pm}. \quad (7.9.46)$$

Тем самым подтверждается, что *три оператора* (Z_+ , Z_0 , Z_-) *удовлетворяют правилам коммутации, характеризующим угловой момент*. Это оправдывает название *оператора квазиспина* для $\{Z\}$.

Установив, что операторы $\{Z\}$ формально составляют угловой момент, мы можем привлечь весь технический аппарат углового момента для использования в приложениях. Прежде чем перейти к этим приложениям, отметим сначала некоторые общие черты рассматриваемых операторов.

1. Если бы мы использовали в определении Z_+ условие, что $2j$ равно четному целому числу, то получаемый оператор был бы тождественно равен нулю. Иначе говоря, можно считать, что для $2j$, равного нечетному целому числу, коэффициенты $C_{m'-m,0}^{jj0}$ определяют симплектическое внутреннее произведение.

2. Если бы в определении Z_+ мы использовали бозонные операторы вместо фермионных операторов, то ситуация изменилась бы на обратную: необращение оператора в нуль требует, чтобы $2j$ было равно четному целому числу. Для коммутаторов находим теперь

¹⁾ Это развитие (для физики) было инициировано Швингером [21], который рассмотрел операторы рождения-уничтожения (бозонных) пар как операторы, генерирующие «гиперболический угловой момент» $SU(1,1)$ (см. [41]). Дальнейшее развитие этой идеи было дано Андерсоном [13] (приложение к сверхпроводимости) и (для синьорити в ядерной физике) Хелмерсом [22], Керманом [23] и Макфарлейиом [24].

$$[Z_+, Z_-] = -2Z_0, \\ Z_0 \equiv \sum_m (a_m \bar{a}_m + \bar{a}_m a_m)/4 \quad (7.9.47)$$

для $2j$, равного четному целому числу, и для бозонных операторов.

Обратим внимание на особую важность знака в этом коммутаторе. Оказывается, что *квазиспин для бозонных операторов является формально гиперболическим угловым моментом*. Гиперболическая природа этого результата (означающего, что точные унитарные неприводимые представления являются бесконечномерными) хорошо согласуется с физической интуицией в том смысле, что не существует предела для числа бозонных пар, которые занимают одно и то же состояние, так что действие оператора Z_+ на пространство бозонных векторов состояния является необрывающимся. Квазиспин для бозонных структур в ядерной физике был применен в работе Уи [25].

ж. Квазиспиновые волновые функции (параметр синьорити). Цель данного раздела состоит в том, чтобы показать, как и в какой степени квантовое число синьорити ν служит для индексирования многочастичных состояний в j -оболочке. Поскольку оператор углового момента j коммутирует с каждым квазиспиновым оператором Z_+ , Z_0 , Z_- , мы имеем также (помимо параметров j , m) еще два параметра, обеспечиваемых оператором Z_0 и инвариантным оператором Z^2 , который определен выражением

$$Z^2 \equiv \frac{1}{2}(Z_- Z_+ + Z_+ Z_-) + Z_0^2. \quad (7.9.48)$$

Полезно заметить, что квазиспиновый оператор Z_0 связан с оператором числа N (отображение Йордана единичного оператора). Конкретно мы имеем

$$Z_0 = \frac{1}{2}N - \frac{1}{4}(2j + 1), \quad (7.9.49)$$

где $N \equiv \sum_m b_m \bar{b}_m$. Отсюда следует, что вакуумное состояние $|0\rangle$, определяемое равенством $b_m |0\rangle = 0$ для всех m , имеет теперь квазиспиновое свойство

$$Z_0 |0\rangle = -\frac{1}{2}\Omega |0\rangle, \quad \Omega = (2j + 1)/2, \quad (7.9.50)$$

вследствие соотношения $N|0\rangle = 0$ (что соответствует отсутствию частиц).

Основная идея, на которой базируется понятие синьорити, состоит в том, что пары с $J = 0$ в волновой функции должны быть «инертными». В связи с этим возникает вопрос: каким образом можно судить, является ли волновая функция «свободной от пар»? Рассмотрим множество двухчастичных кет-векторов. Все двухчастичные кет-векторы являются линейными комбинациями базисных векторов $\{b_m b_{m'} |0\rangle\}$. Используя коэффициенты векторной связи, находим

$$|(j^2)JM\rangle = \sum_{mm'} C_{mm'}^{j^2 JM} b_m b_{m'} |0\rangle, \quad (7.9.51)$$

где (в силу свойства антикоммутируемости фермионных операторов и симметрии коэффициента Вигнера) единственные неисчезающие кет-векторы имеют J , равное четному целому числу.

Ясно, что единственным состоянием с $(J = 0)$ -парой является состояние с $J = 0$; соответственно состояния с $J = 2, 4, \dots, 2j - 1$ с необходимостью «сво-

бодны от пар». Следовательно, если мы удаляем пару из этих состояний, т.е. действуем квазиспиновым оператором Z_- , то мы должны получить нуль:

$$Z_-|(j^2)JM\rangle = 0 \quad \text{для} \quad J = 2, 4, \dots, 2j - 1. \quad (7.9.52)$$

(Непосредственное вычисление подтверждает этот результат.) Поскольку эти двухчастичные состояния являются свободными от пар, число несвязанных частиц равно 2, что определяет значение квантового числа синьорити $\nu = 2$.

Это условие отсутствия в состоянии пар облегчает вычисление собственного значения оператора Z^2 для этих состояний. Следовательно, получаем

$$Z^2|(j^2)JM\rangle = z_0(z_0 - 1)|(j^2)JM\rangle, \quad J \neq 0. \quad (7.9.53)$$

где z_0 — собственное значение оператора Z_0 . Кроме того, поскольку N имеет собственное значение ν на состояниях, свободных от пар, мы имеем

$$z_0 = \frac{\nu - \Omega}{2}. \quad (7.9.54)$$

Этот результат показывает, что квазиспин z , определяемый собственным значением $z(z + 1)$ оператора Z^2 , имеет значение $z = (\Omega - \nu)/2$, так что Z^2 имеет собственное значение $\frac{1}{4}(\Omega - \nu)(\Omega - \nu + 2)$. Поскольку оператор Z^2 коммутирует с Z_+ , Z_- и Z_0 , отсюда следует, что квантовое число синьорити ν фактически не зависит от числа ($J = 0$)-пар. Значит, мы можем генерировать совокупность состояний, обладающих точным синьорити ν , из состояния, которое имеет ν несвязанных частиц:

$$|(j^n)\nu JM\rangle = (\text{нормировка}) (Z_+)^{n - \nu/2} |(j^\nu)\nu JM\rangle. \quad (7.9.55)$$

Собственные значения квазиспина для этих состояний равны

$$\begin{aligned} Z^2 &\rightarrow z(z + 1) = \frac{1}{4}(\Omega - \nu)(\Omega - \nu + 2), \\ Z_0 &\rightarrow z_0 = \frac{n - \Omega}{2}. \end{aligned} \quad (7.9.55')$$

В частности, основное состояние $|0\rangle$, как нетрудно видеть, имеет $\nu = 0$ и квазиспин $z = \Omega/2$ с проекцией $-\Omega/2$.

Вычисление нормировочного множителя в выражении (7.9.55) проводится непосредственно и эквивалентно вычислению нормировки состояния $(J_+)^k |j, -j\rangle$, где j — общий угловой момент. Такое вычисление использует только абстрактные свойства углового момента; соответственно оно осуществляется наиболее просто при помощи отображения Йордана для бозонов (гл. 5). На основе этого отображения получаем

$$J_+ \rightarrow a_1 \bar{a}_2, \quad |j, -j\rangle \rightarrow \frac{(a_2)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}} |0\rangle. \quad (7.9.56)$$

Таким образом, находим

$$\begin{aligned}
 (J_+)^k |j, -j\rangle &= \left[\frac{(2j)!}{(2j-k)!} \right] \frac{(a_1)^k (a_2)^{2j-k}}{\sqrt{(2j)!}} |0\rangle \\
 &= \left[\frac{(2j)! k!}{(2j-k)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(a_1)^k (a_2)^{2j-k}}{\sqrt{k!(2j-k)!}} |0\rangle \\
 &= \left[\frac{(2j)! k!}{(2j-k)!} \right]^{\frac{1}{2}} |j, k-j\rangle.
 \end{aligned} \tag{7.9.57}$$

Переходя теперь к переменным, подходящим для квазиспина, $j = (\Omega - \nu)/2$ и $k = (n - \nu)/2$, находим, что нормировочный множитель равен

$$\left[\frac{(\Omega - \nu)! \left(\frac{n - \nu}{2} \right)!}{\left(\Omega - \frac{n + \nu}{2} \right)!} \right]^{-\frac{1}{2}}$$

Таким образом, для нормированного состояния (7.9.55) имеем

$$|(j^n) \nu JM\rangle = \left[\left(\frac{\Omega - \nu}{\frac{n - \nu}{2}} \right) \right]^{-\frac{1}{2}} \frac{(J_+)^{(n - \nu)/2} |(j^\nu) \nu JM\rangle}{\left(\frac{n - \nu}{2} \right)!} \tag{7.9.58}$$

Появление биномиального фактора

$$\left(\frac{\Omega - \nu}{\frac{n - \nu}{2}} \right)$$

в нормировке интерпретируется физически как «эффект блокировки». *Вырождение пар* в j -оболочке дается величиной $(2j + 1)/2 = \Omega$; число пар, добавляемых к «свободной от пар» волновой функции $|(j^\nu) \nu JM\rangle$, равно $(n - \nu)/2$. Число способов распределения $(n - \nu)/2$ пар в системе, которая обладает Ω возможностями, равно биномиальному коэффициенту

$$\left(\frac{\Omega}{\frac{n - \nu}{2}} \right)$$

Сравнение с биномиальным коэффициентом, полученным выше, показывает, что «эффективное вырождение» равно $\Omega - \nu$. Другими словами, ν несвязанных частиц «заблокировали» ν возможных пар в силу принципа запрета Паули (антисимметрия).

Квантовое число спинорити ν оказывается полезным в нумеровании состояний n (тождественных) частиц в j -оболочке, но характеристик n , ν , J и M недо-

статочны для общей классификации. Для $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ квантовое число синьорити является излишним; вполне достаточно квантовых чисел n, J, M . Для $j = \frac{1}{2}$ и $\frac{3}{2}$ синьорити дает разделение всех кратностей. Для $j \geq \frac{1}{2}$ квантовое число синьорити оказывается полезным, но его недостаточно.

3. *Применение квазиспина к тензорным операторам.* Множество всех одночастичных тензорных операторов было дано выше как $\{v_q^k\}$ и реализовывалось при помощи фермионного отображения Йордана. Для установления квазиспиновых тензорных свойств этих операторов определим сначала квазиспин самих фермионных операторов b_m и $\bar{b}_m$. Находим

$$\begin{aligned} [Z_+, b_m] &= 0, & [Z_+, (-1)^{j-m} \bar{b}_{-m}] &= b_m, \\ [Z_0, b_m] &= \frac{1}{2} b_m, & [Z_0, (-1)^{j-m} \bar{b}_{-m}] &= -\frac{1}{2} (-1)^{j-m} \bar{b}_{-m}, \\ [Z_-, b_m] &= (-1)^{j-m} \bar{b}_{-m}, & [Z_-, (-1)^{j-m} \bar{b}_{-m}] &= 0. \end{aligned} \quad (7.9.59)$$

Таким образом, каждая пара b_m и $(-1)^{j-m} \bar{b}_{-m}$ ($m = j, j-1, \dots, -j$) является квазиспиновым тензором ранга $\frac{1}{2}$ с компонентами, обозначаемыми $\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$.

Из этого факта следует, что одночастичные операторы, поскольку они строятся билинейно над базисом b_μ и $\bar{b}_\mu$, а $[\frac{1}{2}] \otimes [\frac{1}{2}] = [0] \oplus [1]$, являются либо квазиспиновыми векторами, либо квазиспиновыми скалярами. Симметрия относительно перестановки различает эти два случая, и мы находим (как обычно, с помощью симметрии коэффициентов Вигнера), что квазиспиновыми скалярами являются тензорные операторы с нечетным угловым моментом, тогда как четные тензорные операторы являются квазиспиновыми векторами.

Это важный результат. Чтобы оценить его значение, рассмотрим теорему Вигнера — Эккарта в квазиспиновом пространстве. Так как нечетные тензорные операторы скаляры по квазиспину, теорема Вигнера — Эккарта показывает, что эти операторы диагональны в базисе синьорити и не зависят от числа частиц (поскольку квазиспиновый аналог «магнитного квантового числа» определяется числом частиц). В частности, оператор магнитного момента есть квазиспиновый скаляр; тот факт, что магнитный момент не зависит от числа пар (тождественных) частиц, подтверждается данными оболочечной модели. (Это обосновывает вычисления на основе модели Шмидта; см. стр. 463.)

Для одночастичных тензорных операторов четных мультиполей, обозначаемых как $\mathcal{O}_{\text{even}}$, матричные элементы в соответствии с теоремой Вигнера — Эккарта имеют вид

$$\begin{aligned} &\langle (\alpha')(j^n) v' J' M' | \mathcal{O}_{\text{even}} | (\alpha)(j^n) v J M \rangle \\ &= C \frac{\Omega - v}{2} \frac{\Omega - v'}{2} \frac{n - \Omega}{2} \langle (\alpha')(j^{v'}) v' J' M' | \mathcal{O}_{\text{even}} | (\alpha)(j^v) v J M \rangle. \end{aligned} \quad (7.9.60)$$

Этот результат достигает важной цели: явная зависимость от числа частиц была определена для всех одночастичных операторов в схеме обозначения, использующей квантовое число синьорити [26, 26а].

В качестве примера указанного результата рассмотрим оператор квадрупольного момента. Как четный мультиполь, этот оператор является квазиспиновым

вектором. Для статического квадрупольного момента матричные элементы диагональны как по v , так и по λ . Следовательно, квадрупольные моменты зависят от квазиспинового аналога коэффициента Вигнера $C_{m0m}^{1j} = m/\sqrt{j(j+1)}$. Из соответствий $j \rightarrow (\Omega - v)/2$ и $m \rightarrow (n - \Omega)/2$ заключаем, что квадрупольный момент изменяется как $(n - \Omega)/2$. Это означает, что квадрупольные моменты в начале j -оболочки ($n < \Omega$) имеют противоположный знак по сравнению с квадрупольными моментами вблизи конца оболочки ($n > \Omega$). Это правило прекрасно подтверждается данными по систематике ядер. Полученный результат означает также, что квадрупольный момент обращается в нуль в середине оболочки ($n = \Omega$); последнее предсказание не подтверждается данными, и физическое объяснение (деформация формы ядра для оболочек, далеких от замкнутости) указывает на то, что использующая синьорити модель ограничена несколькими частицами (или несколькими дырками) вблизи замкнутых оболочек.

Этот результат, полученный для квадрупольного оператора, показывает, например, что имеется связь между состоянием n частиц и состоянием, в котором имеется $2\Omega - n$ частиц. Эта связь, обозначаемая как «сопряжение частица — дырка», является более общей, чем характеристика с помощью квантового числа синьорити, и является общим свойством самой оболочечной модели [27].

Замечание. Особенно удачным приложением понятия сопряжения является преобразование Пандиа [28], которое, исходя из энергетического спектра ядра, имеющего две частицы вне замкнутых оболочек, определяет энергетический спектр соответствующего ядра типа частица — дырка (в предположении двухчастичных взаимодействий). Требуемое преобразование есть преобразование Рака:

$$E_{J \text{ частица—дырка}} = (\text{const}) - \sum_{J'} (2J' + 1) W(j_1 j_2 j_1; JJ') E_{J'}^{\text{частица—частица}} \quad (7.9.61)$$

где j_1 и j_2 — угловые моменты двухчастичных состояний оболочечной модели (j_1 — угловой момент дырочного состояния) и $(\text{const}) = (2j_1 + 1) \sum_{J'} (2J' + 1) \times E_{J'}^{\text{частица—частица}}$ (Последнее соотношение выводится и обсуждается в книге [27].)

Это соотношение подтверждается экспериментально в спектрах отдельных пар с такого рода связью.

Анализ тензорных операторов в терминах квазиспина может быть распространен на двухчастичные операторы, причем эти операторы являются квазиспиновыми операторами с $z = 2, 1$ или 0 . Существенный результат этого анализа состоит опять же в определении явной зависимости матричных элементов от числа частиц. Приложение такой техники к реакциям срыва и захвата (передача частицы) можно найти в работах [24, 29, 30].

и. Синьорити в терминах операторов Казимира. Существует другой подход к оператору синьорити q_{12} , который важен для понимания метода углового момента и в более широком смысле симметричных методов. При таком подходе оператор q_{12} рассматривается в терминах операторов Казимира и общего оператора двухчастичного обмена.

Рассмотрим отдельную j -оболочку и для простоты тождественные нуклоны, заполняющие эту оболочку. Если предполагается определенное двухчастичное

(остаточное) ядерное взаимодействие, то задача состоит в определении, исходя из этой информации, энергетического спектра для n -частичной системы, $n = 1, 2, \dots, 2j + 1$.

Двухчастичное взаимодействие V_{12} приводит к матрице возмущения $\langle (j^2)JM | V_{12} | (j^2)JM \rangle$, которую можно параметризовать при помощи $6j$ -коэффициентов. Поскольку взаимодействие V_{12} является вращательно инвариантной функцией расстояния $r_{12} = \|x_1 - x_2\|$ между частицами, мы можем воспользоваться разложением по полиномам Лежандра,

$$V_{12}(r_{12}) = \sum_{k=0}^{\infty} V_{12}^{(k)}(r_1, r_2) P_k(\hat{x}_1 \cdot \hat{x}_2), \quad (7.9.62)$$

для матрицы возмущения; в результате получаем (см. (7.5.109), (7.5.110))

$$\langle (j^2)JM | V_{12} | (j^2)JM \rangle = \sum_k F^k(l, l) f_k[(lj)^2 J]. \quad (7.9.63)$$

В последнее равенство входят следующие величины.

1. Интегралы Слэтера, определяемые согласно

$$F^k(l, l) = \iint r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 V_{12}^{(k)}(r_1, r_2) [R_l(r_1) R_l(r_2)]^2. \quad (7.9.64)$$

2. Факторы углового момента $f_k[(lj)^2 J]$, определяемые как

$$f_k[(lj)^2 J] = (-1)^{J-1} (2j+1)^2 \begin{pmatrix} j & k & j \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \begin{Bmatrix} j & j & J \\ j & j & k \end{Bmatrix}. \quad (7.9.65)$$

Существенной чертой формулы (7.9.63) является то, что общее остаточное взаимодействие представляется через ограниченное число параметров (F_k для $k = 0, \dots, 2j$). Однако, поскольку взаимодействие определяет только $(2j+1)/2$ физических данных — энергетических уровней двухчастичной системы (которая в силу антисимметрии должна иметь J , равное четному целому числу), ясно, что весьма различные взаимодействия могут быть физически эквивалентными [24]. Оптимально данные для двухчастичной системы должны параметризоваться посредством $(2j+1)/2$ основных взаимодействий, выбранных для простоты в распространении на случай n -частиц. Одна стратегия для выбора этих основных взаимодействий состоит в использовании *обменных взаимодействий*.

Чтобы понять идею использования обменных взаимодействий, рассмотрим простейший такой оператор — спиновый обменный оператор Дирака

$$S_{12} \equiv \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_1 \cdot \sigma_2), \quad (7.9.66)$$

где σ_i — паулиевские операторы спина для (кинематически независимых) спинов двух частиц (обозначаемых как 1 и 2). Легко проверить, что, как и подобает обменному оператору, $(S_{12})^2 = \mathbb{1}$, так что собственные значения все равны ± 1 . Точно так же легко проверить, что на триплетных состояниях ($S = 1$) собственное значение равно $+1$, а на синглетных состояниях ($S = 0$) собственное значение равно -1 .

Спиновый обменный оператор полезен тем, что его можно распространить на системы n -частиц. Соответствующее определение имеет вид

$$S_{\text{exch}} \equiv \sum_{1 \leq \alpha < \beta}^n S_{\alpha\beta}, \quad (7.9.67)$$

и вычисляется при помощи полного спина $\mathbf{S} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\sigma}_{\alpha}$:

$$S_{\text{exch}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha < \beta} (\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\beta}) = \frac{n(n-1)}{4} + (\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} - \frac{3}{4}n). \quad (7.9.68)$$

Следовательно, собственное значение оператора S_{exch} равно

$$\frac{n(n-4)}{4} + S(S+1). \quad (7.9.69)$$

Если полный спин является точным квантовым числом (как в схеме LS -связи), спиновое обменное взаимодействие является удовлетворительным основным взаимодействием для параметризации двухчастичных остаточных взаимодействий.

Эти результаты несложны и известны, но в целях обобщения представляется полезным другой взгляд на спиновый обмен. Система спина $\frac{1}{2}$ имеет два состояния, поэтому двухчастичная система обладает четырьмя состояниями. Соответственно оператор, переставляющий параметры состояния (jm) частицы 1 с соответствующими параметрами состояния частицы 2, представляет собой оператор 4×4 (перестановочная матрица) в тензорном произведении пространств, задаваемый в виде

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (7.9.70)$$

Из $P^2 = \mathbb{1}_4$, $\text{tr} P = 2$ следует, что P фактически эквивалентно оператору S_{12} .

Эти наблюдения допускают обобщение с двухчастичной системы состояний на систему k состояний: обменный оператор $P(k)$ для двух частиц есть тогда перестановочная матрица $k^2 \times k^2$. Свойства $P^2(k) = \mathbb{1}_{k^2}$ и $\text{tr} P(k) = k$ определяют, что $P(k)$ имеет $k(k+1)/2$ собственных значений $+1$ и $k(k-1)/2$ собственных значений -1 . Такое вырождение указывает, что обменный оператор $P(k)$ приписывает собственное значение $+1$ симметричной двухчастичной системе со схемой Юнга $\square\square$, а собственное значение -1 — антисимметричной двухчастичной системе со схемой Юнга $\square$.

Чтобы распространить общий обменный оператор $P_{\alpha\beta}(k)$ на состояния n частиц, вычисляют оператор $\sum_{\alpha < \beta} P_{\alpha\beta}(k)$ на множестве n -частичных состояний, причем каждое состояние задается стандартной схемой Юнга вида $[\lambda]$ из n клеток, ограниченной условием, что все столбцы имеют длину $\leq k$. Приводим (без доказательства) этот результат:

$$P([\lambda]) \stackrel{\text{def}}{=} \left\langle [\lambda] \left| \left(\sum_{1 \leq \alpha < \beta}^n P_{\alpha\beta}(k) \right) \right| [\lambda] \right\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \lambda_i (\lambda_i - 2i + 1). \quad (7.9.71)$$

Предыдущий результат для спинового обменного оператора, как можно видеть, является частным случаем последней формулы при $k = 2$ (в этом случае $n = \lambda_1 + \lambda_2$, $S = (\lambda_1 - \lambda_2)/2$).

Покажем теперь, как этот результат связан с операторами Вигнера теории углового момента. Базис для множества всех операторов, отображающих в себя пространство $\mathcal{H}_j$, натягиваемое на базисные векторы $\{|jm\rangle; m = j, j-1, \dots, -j\}$, дается совокупностью мультипольных операторов $\{v_q^k; k = 0, 1, \dots, 2j; q = k, k-1, \dots, -k\}$ (операторов Вигнера), матричные элементы которых есть коэффициенты $\langle jm' | v_q^k | jm \rangle = C_{mqm'}^{kj}$ ($k = 0, 1, \dots, 2j$). Следовательно, наибольшее общее вращательно-инвариантное (эрмитово) двухчастичное взаимодействие (для частиц в j -оболочке) имеет вид

$$H_{12} = (2j+1)^{-1} \sum_{k=0}^{2j} A_k v^k(1) \cdot v^k(2),$$

$$v^k(1) \cdot v^k(2) \equiv \sum_q (-1)^q v_q^k(1) v_{-q}^k(2), \quad (7.9.72)$$

где через A_k обозначены числовые (вещественные) параметры. Взяв матричные элементы по двухчастичным состояниям¹⁾, приходим к результату

$$\langle (j^2)JM | H_{12} | (j^2)JM \rangle = \sum_{k=0}^{2j} (-1)^{2j+J} A_k W(jjjj; kJ). \quad (7.9.73)$$

Чтобы определить постоянные A_k , соответствующие особенно простым взаимодействиям, напомним тождества, существующие для коэффициентов Рака. Из тождества (равенство (3.274) в гл. 3)

$$\sum_f (2f+1) (-1)^{b+d-f} W(abcd; ef) W(adcb; gf) = (-1)^{c+g-a-e} W(bacd; eg), \quad (7.9.74)$$

положив $c = b$, $d = a$, $g = 0$ и воспользовавшись также формулой (3.282) и соотношением симметрии, получаем

$$\sum_f (2f+1) W(abba; fe) = 1. \quad (7.9.75)$$

Таким образом, полагая в соотношении (7.9.72) $A_k = 2k + 1$, находим

$$(2j+1)^{-1} \langle (j^2)JM | \sum_{k=0}^{2j} (2k+1) v^k(1) \cdot v^k(2) | (j^2)JM \rangle = (-1)^{J+2j}. \quad (7.9.76)$$

¹⁾ Двухчастичные состояния $|(j^2)JM\rangle$ в этом соотношении для различных частиц таковы, что эти состояния существуют для всех $J = 0, 1, \dots, 2j$. Выполнения этого свойства мы требуем для того, чтобы была возможность определить коэффициенты A_k единственным образом через взаимодействие (см. обсуждение на стр. 481). Полученные на этом пути операторные тождества (например, (7.9.84)) применимы (как тождества) к произвольным состояниям (симметричным, антисимметричным или со смешанной симметрией).

Поскольку величина $(-1)^{j+2j}$ дает $+1$ для симметричных состояний (как для целых, так и для полуцелых j) и -1 для антисимметричных состояний, ясно, что формула (7.9.76) определяет представление через оператор Вигнера для общего обменного оператора:

$$\text{Обменный оператор} \equiv P_{\alpha\beta} \equiv \sum_{k=0}^{2j} \frac{(2k+1)}{(2j+1)} v^k(\alpha) \cdot v^k(\beta). \quad (7.9.77)$$

Такая же важная интерпретация обменного оператора следует из того факта, что обменный оператор $P_{\alpha\beta}$ коммутирует со всеми преобразованиями, порожаемыми при помощи операторов $v^k \equiv \sum_{\alpha=1}^n v^k(\alpha)$, $k = 0, 1, \dots, 2j$. Эти операторы¹⁾ (их число равно $(2j+1)^2$) генерируют группу $U(2j+1)$, и, следовательно, величина $\sum_{\alpha < \beta} P_{\alpha\beta}$ связана с квадратичным инвариантом этой группы (который известен как оператор Казимира I_2). Эта связь имеет вид

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq \alpha < \beta} P_{\alpha\beta} &= \sum_{\alpha < \beta} \sum_{k=0}^{2j} \frac{(2k+1)}{(2j+1)} v^k(\alpha) \cdot v^k(\beta) \\ &= \left[I_2 - \sum_{\alpha=1}^n I_2(\alpha) \right] / 2(2j+1), \end{aligned} \quad (7.9.78)$$

где мы определили

$$\begin{aligned} I_2 &= \sum_{k=0}^{2j} (2k+1) v^k \cdot v^k = \text{оператор Казимира для } U(2j+1), \\ I_2(\alpha) &= \sum_{k=0}^{2j} (2k+1) v^k(\alpha) \cdot v^k(\alpha). \end{aligned} \quad (7.9.79)$$

Заметим, что $I_2(\alpha) = I_2(1)$ для каждого $\alpha = 1, \dots, n$.

Нетрудно теперь получить выражение для оператора синьорити через операторы Вигнера. Из соотношения ортогональности (формула (3.271) гл. 3) получаем тождество

$$\sum_e (2e+1)(2f+1) W(abcd; ef) W(abcd; eg) = \delta_{fg}. \quad (7.9.80)$$

Если положить $g = 0$, последнее принимает вид

$$\sum_k (2k+1)(-1)^{2j+k} W(jjjj; kJ) = (2j+1)\delta_{J0}. \quad (7.9.81)$$

Таким образом, эта формула вместе с (7.9.73) показывает, что оператор синьорити q_{12} , определяемый согласно

$$\langle (j^2)JM | q_{12} | (j^2)JM \rangle = (2j+1)\delta_{J0}. \quad (7.9.82)$$

¹⁾ В бозонной реализации операторы v^k связаны с введенными в формуле (7.5.176) разд. 5 операторами V^k равенством $v^k = [(2j+1)(2k+1)]^{1/2} V^k$.

выражается через оператор Вигнера следующим образом:

$$q_{12} = \sum_{k=0}^{2j} (-1)^k \frac{(2k+1)}{(2j+1)} v^k(1) \cdot v^k(2). \quad (7.9.83)$$

Воспользовавшись полученным для обменного оператора соотношением (7.9.77), из выражения для оператора синьорити можно исключить четные мультиполи:

$$q_{12} = P_{12} - 2 \sum_{k \text{ odd}} \frac{(2k+1)}{(2j+1)} v^k(1) \cdot v^k(2). \quad (7.9.84)$$

Полученное выражение весьма важно для теоретико-групповой интерпретации оператора синьорити. Как для целых, так и для полуцелых j порождаемая мультипольными операторами $\{v^k\}$ унитарная группа $U(2j+1)$ имеет подгруппу, которая генерируется *нечетными* мультипольными операторами, а именно группу $SO(2j+1)$ для целых j и симплектическую группу $Sp(2j+1)$ для полуцелых j . Входящее в последнюю формулу выражение $\sum_{k \text{ нечетное}} (2k+1) v^k(1) \cdot v^k(2)$ показывает, что оператор синьорити содержит квадратичный инвариантный оператор для подгруппы. Поэтому мы заключаем, что оператор синьорити имеет теоретико-групповое содержание не только в редукции $U(2j+1) \supset SO(2j+1)$ или $Sp(2j+1)$, но также может быть выражен в терминах инвариантных операторов Казимира этих двух групп.

к. Заключительные замечания. Приложения метода углового момента, которые мы рассмотрели выше, являются по необходимости довольно специализированными и имеют ограниченную применимость. Рассмотренные примеры могут лишь указывать (да и то не в полной мере) на важную (и даже доминирующую) роль метода углового момента в этой обширной области исследований. Уже само существование оболочечной модели ядра, которая классифицирует ядерные орбиты по квантовым числам углового момента, гарантирует то, что в большинстве вычислений появляется необходимость всевозможных связываний и разложений угловых моментов индивидуальных частиц. Непосредственное применение метода углового момента в широкомасштабном вычислительном наступлении на различные аспекты ядерной структуры становится возможным благодаря современным компьютерам. Требуемая для этого «технология углового момента» (основанная на $3lj$ -коэффициентах, см. также разд. 12 в работе [41]) развивается и обсуждается в применении к ядерной физике в работе Даноса и Жилле [31]. Сотрудничество Рочестер — ОРНЛ [32] привело к разработке компьютерных программ большого масштаба для вычислений по ядерной структуре.

Альтернативой таких широкомасштабных численных расчетов является усечение пространства оболочечной модели до получения «ручного» базиса со схематическими гамильтонианами взаимодействия [33 — 34a]. Обзор программы решаемых (схематических) гамильтонианов взаимодействия в соединении с принадлежащим Ландау понятием элементарных возбуждений (в случае ядер основанным на угловых моментах) дан недавно в работе Бортиньоа и др. [35]. Можно также рассматривать усеченные пространства оболочечной модели как про-

странства, в которых реализуются более широкие симметричные структуры, содержащие симметрию углового момента в качестве подгруппы. Такой подход является составной частью более общей программы приложения теоретико-групповых (симметричных) методов к структуре ядер [12а, 36 — 40].

Авторы выражают признательность профессору Мичиганского университета Хехту за критическое прочтение настоящего раздела.

л. Примечание. Понятие оператора Вигнера хорошо известно в физической литературе (и подробно развивается в работе [41]); понятие оператора Рака (рассмотренное в гл. 3 и более подробно в работе [41]) известно в меньшей степени. Равенство (7.9.73) представляет собой прекрасный пример этого последнего понятия и иллюстрирует тот факт, что операторы Рака играют такую же роль по отношению к пространствам связанных угловых моментов { базис $|j_1 j_2 j m\rangle$ }, какую играют операторы Вигнера по отношению к пространствам основного углового момента { базис $|j m\rangle$ }. Операторы Рака, имеющие непосредственное отношение к построению инвариантных взаимодействий в пространствах связанных угловых моментов, являются в точности такими, что они *не вызывают сдвига* характеристик j_1, j_2 (см. разд. 21 гл. 3):

$$\left\{ \begin{array}{cc} k & \\ 2k & 0 \\ k & \end{array} \right\}. \quad (7.9.85)$$

Из равенства (7.9.73) видно, что совокупность операторов, соответствующих $k = 0, 1, \dots, 2j$, является базисом для всех инвариантных операторных отображений $(2j + 1)$ -мерного пространства, натянутого на базис $\{|(j^2)JM\rangle: J = 0, 1, \dots, 2j\}$, в себя (см. примечание на стр. 483). Таким образом, альтернативная по отношению к (7.9.72) операторная формулировка имеет вид

$$H_{12} = \sum_{k=0}^{2j} a_k \left\{ \begin{array}{cc} k & \\ 2k & 0 \\ k & \end{array} \right\}. \quad (7.9.86)$$

Используя соотношение ортогональности для следа (см. формулу (3.357) гл. 3), задаваемое в виде

$$\text{tr} \left[(2J + 1) \left\{ \begin{array}{cc} k' & \\ 2k' & 0 \\ k' & \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{cc} k & \\ 2k & 0 \\ k & \end{array} \right\}^+ \right] = \delta_{k'k} \frac{(2j + 1)^2}{(2k + 1)}, \quad (7.9.87)$$

можно вычислить коэффициенты разложения a_k в терминах самого инвариантного взаимодействия:

$$a_k = \frac{(2k + 1)}{(2j + 1)^2} \text{tr} \left[(2J + 1) H_{12} \left\{ \begin{array}{cc} k & \\ 2k & 0 \\ k & \end{array} \right\}^+ \right]. \quad (7.9.88)$$

Более того, операторы (7.9.85), соответствующие $k = 0, 1, \dots, 2j$, взаимно коммутируют, являются эрмитовыми и коммутируют с J . Следовательно совокупность одновременных собственных значений этих операторов $\{(2j + 1) \times$

$\times W(Jjjk; jj): k = 0, 1, \dots, 2j$ }, или, что то же самое, сам индекс k , позволяет полностью характеризовать базис в пространстве инвариантных отображений.

Таким образом, понятие оператора Рака дает весьма важную интерпретацию разложения (7.9.73).

Литература

1. *Elsasser W. M.*, J. Phys. Rad., **5**, 389; 634 (1934).
О принципе Паули в ядрах.
См. также *Feenberg E.*, Shell Theory of the Nucleus, Princeton Univ. Press, Princeton, N. J., 1955.
Оболочечная теория ядер.
2. *Goldschmidt V. M.*, Norske Viden. Akad. (Oslo), **1** — 148 (1937).
Геохимические законы размещения элементов. IX. Количественные соотношения элементов и однотипных атомов.
3. *Mayer M. G., Jensen J. H. D.*, Elementary Theory of Nuclear Shell Structure, Wiley, New York, 1955. [Имеется перевод: *Геннепт-Майер М., Йенсен И.* Элементарная теория ядерных оболочек. — М.: ИЛ, 1958.]
4. *Bohr A., Mottelson B. R.*, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., **27**, No. 16, 1 (1953). [Имеется перевод в сб.: «Проблемы соврем. физики», **9** (1955).] Исчерпывающий обзор дается в монографии *Bohr A., Mottelson B. R.*, Nuclear Structure, Vol. I, Benjamin, New York, 1969; Vol. II, 1975. [Имеется перевод: *Бор О., Моттельсон Б.* Структура атомного ядра. — М.: Мир, 1971.]
5. *Rainwater J.*, Phys. Rev., **79**, 432 (1950).
Аргумент энергетических уровней ядер для модели сфероида ядра.
6. *Heisenberg W.*, Z. Physik, **77**, 1 (1932).
О строении атомных ядер.
7. *Wigner E. P.*, Phys. Rev., **51**, 106 (1937).
О следствиях симметрии ядерного гамильтониана для спектроскопии ядер.
8. *Gell-Mann M.*, The eightfold Way: A Theory of Strong Interaction Symmetry, California Inst. of Technology Report CTSL-20, 1961.
Восьмеричный путь: теория симметрии сильных взаимодействий; репродуцировано в монографии: *Gell-Mann M., Ne'eman Y.*, The Eightfold Way, Benjamin, New York, 1964.
9. *Ne'eman Y.*, Nucl. Phys. **26**, 222 (1961). [Имеется перевод: *Нееман Ю.* Вывод сильных взаимодействий из принципа калибровочной инвариантности. — В сб. статей: Элементарные частицы и компенсирующие поля/Под ред. Д. Иваненко. — М.: Мир, 1964.]
- 9a. *Wigner E. P.* in: Proc. of the First Robert A. Welch Foundation Conference: On the Structure of the Nucleus, W. O. Milligan, ed., Rice Institute, Houston, 1958, p. 61.
Изоспин — квантовое число для ядер.
10. *Robson D.*, Phys. Rev., **137**, 535 (1965).
Теория резонансов с аналогом изобарического спина.
См. также *Bohr A., Mottelson B. R.*, Nuclear Structure, Vol. I, Benjamin, New York, 1969, p. 35. [Имеется перевод: *Бор О., Моттельсон Б.* Структура атомного ядра, т. 1, — М.: Мир, 1971.]
11. *de-Shalit A.*, Phys. Rev., **91**, 1479 (1953).
Энергетические уровни нечетно-нечетных ядер.
12. *van der Waerden B. L.*, Science Awakening, Wiley, New York, 1963, pp. 228, 277.
Пробуждение науки.

- 12a. *Schiffer J. P.* in: *The Two-Body Force in Nuclei* (S. M. Austin and G. M. Crawley, eds.), Plenum, New York, 1972, p. 205.
Эффективное нуклон-нуклонное взаимодействие, выводимое из ядерных спектров. *Schiffer J. P., True W. W.*, *Rev. Mod. Phys.*, **48**, 191 (1976).
Эффективное взаимодействие между нуклонами, выводимое из ядерных спектров.
13. *Anderson P. W.*, *Phys. Rev.*, **110**, 827 (1958).
Когерентные возбужденные состояния в теории сверхпроводимости: калибровочная инвариантность и эффект Майснера.
14. *Anderson P. W.*, *Phys. Rev.*, **112**, 1900 (1958).
Приближение случайной фазы в теории сверхпроводимости.
15. *Blatt J. M.*, *Theory of Superconductivity*, Academic Press, New York, 1964.
Теория сверхпроводимости.
16. *Ландау Л. Д.* — *ЖЭТФ*, **11**, 592 (1941); *ЖЭТФ*, **35**, 95 (1958).
17. *Мигдал А. Б.* *Метод квазичастиц в теории ядра.* — М.: Наука, 1967.
18. *Brown G. E.*, *Unified Theory of Nuclear Models*, 2nd ed., North-Holland, Amsterdam, 1967. [Имеется перевод: *Браун Дж.* *Единая теория ядерных моделей и сил.* — М.: Атомиздат, 1970.]
19. *Jahn H. A.*, *Proc. Roy. Soc.*, **A201**, 517 (1950).
Теоретические исследования структуры ядер.
20. *Talmi I.*, *Helv. Phys. Acta*, **25**, 185 (1952).
Ядерная спектроскопия с волновыми функциями гармонического осциллятора.
21. *Schwinger J.* in: *Quantum Theory of Angular Momentum* (L. C. Biedenharn and H. van Dam, eds.), Academic Press, New York, 1965.
Об угловом моменте.
22. *Helmers K.*, *Nucl. Phys.*, **23**, 594 (1961).
Симплектические инварианты и классификация Флауэrsa состояний оболочечной модели.
23. *Kerman A. K.*, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **12**, 300 (1961).
Парные силы и ядерное коллективное движение.
24. *MacFarlane M. H.* in: *Lectures in Theoretical Physics*, P. D. Kunz, D. A. Lind and Brittin W. E., eds., Vol. VIII-C, Univ. Colorado Press, Boulder, Colo., 1966, p. 583.
Теория оболочечной модели тождественных нуклонов.
25. *Uti H.*, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **49**, 69 (1968). *SU(1, 1)*-квасиспиновый формализм системы многих бозонов в сферическом поле.
26. *de-Shalit A., Talmi I.*, *Nuclear Shell Theory*, Academic Press, New York, 1963.
Ядерная теория оболочек.
- 26a. *de-Shalit A., Feshbach H.*, *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York, 1974.
Теоретическая ядерная физика.
27. *Brussaard P. J., Glaudemans P. W. M.*, *Shell Model Applications in Nuclear Spectroscopy*, North-Holland, Amsterdam, 1977.
Приложения оболочечной модели в ядерной спектроскопии.
28. *Pandya S. P.*, *Phys. Rev.*, **103**, 956 (1956).
Взаимодействие нуклон — дырка в схеме *jj*-связи.
29. *Satchler G. R.* in: *Lectures in Theoretical Physics*, P. D. Kunz, D. A. Lind and Brittin W. E., eds., Vol. VII-C, Univ. of Colorado Press, Boulder, Colo., 1966, p. 73.
Некоторые вопросы в теории прямых ядерных реакций.
30. *Bayman B. F.* in: *Proceedings of the 5th Scottish Universities Summer School — Nuclear Structure and Electromagnetic Interactions*, N. MacDonald, ed., Oliver & Boyd, Edinburgh, 1965.
Общие свойства ядерных моделей.

31. *Danos M., Gillet V.*, Relativistic Many-Body Bound Systems, National Bureau of Standards Monograph 147, U.S. Government Printing Office, Washington, 1975.
Релятивистские связанные системы многих тел.
32. *French J. B. et al.* in: Advances in Nuclear Physics, M. Baranger and E. Vogt, eds., Vol. 3, Plenum, New York, 1969, p. 193.
Комплексная спектроскопия.
33. *Lipkin H. J., Meshkov N., Glick A. J.*, Nucl. Phys., **62**, 188 (1965).
Обоснованность многочастичных приближенных методов для решаемой модели. (I). Точные решения и теория возмущений.
34. *Holstein T., Primakoff H.*, Phys. Rev., **58**, 1098 (1940).
Полевая зависимость собственного доменного намагничивания ферромагнетика.
- 34а *Ginocchio J. N.* in: Interacting Bosons in Nuclear Physics, F. Iachello, ed., Plenum, New York, 1978, p. 111.
Фермионные гамильтонианы с монопольным и квадрупольным спариванием. *Ginocchio J. N.*, Ann. Phys. (N.Y.), **126**, 234 (1980).
Схематическая модель для монопольного и квадрупольного спаривания в ядрах.
35. *Bortignon P. F., et al.*, Phys. Rept., **30C**, 307 (1977).
Ядерная полевая теория.
36. *Hecht K.*, Ann. Rev. Nucl. Sci., **23**, 123 (1973).
Симметрии в ядрах.
37. *Matsen F. A.* in: Advances in Quantum Chemistry, Vol. II. Academic, New York, 1978, p. 223.
Унитарная группа и задача многих тел.
38. *Arima A., Iachello F.*, Ann. Phys. (N.Y.), **111**, 201 (1978).
Модель взаимодействующих бозонов для коллективных состояний ядер. II. Вращательный предел.
39. *Castaños O. et al.*, J. Math. Phys., **20**, 35 (1979).
Теория групп в ядерной модели взаимодействующих бозонов.
40. *Parikh J. C.*, Group Symmetries in Nuclear Structure, Plenum, New York, 1978.
Группы симметрий в ядерных структурах.
41. *Biedenharn L. C., Louck J. D.*, Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

10. Системы отсчета, жестко связанные с телом: спектры молекул типа сферического волчка¹⁾

а. Введение. Квантовая теория атомных спектров представляла собой уже весьма подробно исследованную область (исследования достигли своей кульминации в опубликовании в 1935 г. «Теории атомных спектров» Кондона и Шортли), когда был принят адекватный общий метод приложения квантовой теории к интерпретации колебательно-вращательных спектров многоатомных молекул (с тремя или более атомами).

В конце двадцатых — начале тридцатых годов всеобщее признание получила модель молекулы, состоящей из ядер, которые могут совершать малые колеба-

¹⁾ Все обсуждение в настоящем разделе ведется в рамках нерелятивистской квантовой механики.

- 12a. *Schiffer J. P.* in: *The Two-Body Force in Nuclei* (S. M. Austin and G. M. Crawley, eds.), Plenum, New York, 1972, p. 205.
Эффективное нуклон-нуклонное взаимодействие, выводимое из ядерных спектров.
Schiffer J. P., True W. W., *Rev. Mod. Phys.*, **48**, 191 (1976).
Эффективное взаимодействие между нуклонами, выводимое из ядерных спектров.
13. *Anderson P. W.*, *Phys. Rev.*, **110**, 827 (1958).
Когерентные возбужденные состояния в теории сверхпроводимости: калибровочная инвариантность и эффект Майсснера.
14. *Anderson P. W.*, *Phys. Rev.*, **112**, 1900 (1958).
Приближение случайной фазы в теории сверхпроводимости.
15. *Blatt J. M.*, *Theory of Superconductivity*, Academic Press, New York, 1964.
Теория сверхпроводимости.
16. *Ландау Л. Д.* — *ЖЭТФ*, **11**, 592 (1941); *ЖЭТФ*, **35**, 95 (1958).
17. *Мигдал А. Б.* *Метод квазичастиц в теории ядра.* — М.: Наука, 1967.
18. *Brown G. E.*, *Unified Theory of Nuclear Models*, 2nd ed., North-Holland, Amsterdam, 1967. [Имеется перевод: *Браун Дж.* Единая теория ядерных моделей и сил. — М.: Атомиздат, 1970.]
19. *Jahn H. A.*, *Proc. Roy. Soc.*, **A201**, 517 (1950).
Теоретические исследования структуры ядер.
20. *Talmi I.*, *Helv. Phys. Acta*, **25**, 185 (1952).
Ядерная спектроскопия с волновыми функциями гармонического осциллятора.
21. *Schwinger J.* in: *Quantum Theory of Angular Momentum* (L. C. Biedenharn and H. van Dam, eds.), Academic Press, New York, 1965.
Об угловом моменте.
22. *Helmers K.*, *Nucl. Phys.*, **23**, 594 (1961).
Симплектические инварианты и классификация Флауэрс состояний оболочечной модели.
23. *Kerman A. K.*, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **12**, 300 (1961).
Парные силы и ядерное коллективное движение.
24. *MacFarlane M. H.* in: *Lectures in Theoretical Physics*, P. D. Kunz, D. A. Lind and Brittin W. E., eds., Vol. VIII-C, Univ. Colorado Press, Boulder, Colo., 1966, p. 583.
Теория оболочечной модели тождественных нуклонов.
25. *Ui H.*, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **49**, 69 (1968). *SU(1, 1)*-квасиспиновый формализм системы многих бозонов в сферическом поле.
26. *de-Shalit A., Talmi I.*, *Nuclear Shell Theory*, Academic Press, New York, 1963.
Ядерная теория оболочек.
- 26a. *de-Shalit A., Feshbach H.*, *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York, 1974.
Теоретическая ядерная физика.
27. *Brussaard P. J., Glaudemans P. W. M.*, *Shell Model Applications in Nuclear Spectroscopy*, North-Holland, Amsterdam, 1977.
Приложения оболочечной модели в ядерной спектроскопии.
28. *Pandya S. P.*, *Phys. Rev.*, **103**, 956 (1956).
Взаимодействие нуклон — дырка в схеме *jj*-связи.
29. *Satchler G. R.* in: *Lectures in Theoretical Physics*, P. D. Kunz, D. A. Lind and Brittin W. E., eds., Vol. VII-C, Univ. of Colorado Press, Boulder, Colo., 1966, p. 73.
Некоторые вопросы в теории прямых ядерных реакций.
30. *Bayman B. F.* in: *Proceedings of the 5th Scottish Universities Summer School — Nuclear Structure and Electromagnetic Interactions*, N. MacDonald, ed., Oliver & Boyd, Edinburgh, 1965.
Общие свойства ядерных моделей.

31. *Danos M., Gillet V.*, Relativistic Many-Body Bound Systems, National Bureau of Standards Monograph 147, U.S. Government Printing Office, Washington, 1975.
Релятивистские связанные системы многих тел.
32. *French J. B. et al.* in: Advances in Nuclear Physics, M. Baranger and E. Vogt, eds., Vol. 3, Plenum, New York, 1969, p. 193.
Комплексная спектроскопия.
33. *Lipkin H. J., Meshkov N., Glick A. J.*, Nucl. Phys., **62**, 188 (1965).
Обоснованность многочастичных приближенных методов для решаемой модели. (I). Точные решения и теория возмущений.
34. *Holstein T., Primakoff H.*, Phys. Rev., **58**, 1098 (1940).
Полевая зависимость собственного доменного намагничивания ферромагнетика.
- 34a *Ginocchio J. N.* in: Interacting Bosons in Nuclear Physics, F. Iachello, ed., Plenum, New York, 1978, p. 111.
Фермионные гамильтонианы с монопольным и квадрупольным спариванием.
Ginocchio J. N., Ann. Phys. (N.Y.), **126**, 234 (1980).
Схематическая модель для монопольного и квадрупольного спаривания в ядрах.
35. *Bortignon P. F., et al.*, Phys. Rept., **30C**, 307 (1977).
Ядерная полевая теория.
36. *Hecht K.*, Ann. Rev. Nucl. Sci., **23**, 123 (1973).
Симметрии в ядрах.
37. *Matsen F. A.* in: Advances in Quantum Chemistry, Vol. II. Academic, New York, 1978, p. 223.
Унитарная группа и задача многих тел.
38. *Arima A., Iachello F.*, Ann. Phys. (N.Y.), **111**, 201 (1978).
Модель взаимодействующих бозонов для коллективных состояний ядер. II. Вращательный предел.
39. *Castaños O. et al.*, J. Math. Phys., **20**, 35 (1979).
Теория групп в ядерной модели взаимодействующих бозонов.
40. *Parikh J. C.*, Group Symmetries in Nuclear Structure, Plenum, New York, 1978.
Группы симметрий в ядерных структурах.
41. *Biedenharn L. C., Louck J. D.*, Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Пака — Вигнера в квантовой теории.

10. Системы отсчета, жестко связанные с телом: спектры молекул типа сферического волчка¹⁾

а. Введение. Квантовая теория атомных спектров представляла собой уже весьма подробно исследованную область (исследования достигли своей кульминации в опубликовании в 1935 г. «Теории атомных спектров» Кондона и Шортли), когда был принят адекватный общий метод приложения квантовой теории к интерпретации колебательно-вращательных спектров многоатомных молекул (с тремя или более атомами).

В конце двадцатых — начале тридцатых годов всеобщее признание получила модель молекулы, состоящей из ядер, которые могут совершать малые колеба-

¹⁾ Все обсуждение в настоящем разделе ведется в рамках нерелятивистской квантовой механики.

ния вблизи положений равновесия (локализованных минимумов потенциала), порождаемые гораздо более быстрыми движениями электронов [1]. Использование для описания этих движений нормальных координат [2, 3] было тщательно исследовано Вильсоном [4]. Однако лишь в 1934 — 1935 гг. Эккарт [5, 6] рассмотрел методы получения общего гамильтониана, который давал бы приближенное разделение полного вращательного движения молекулы (рассматриваемой как твердое тело) и малых «внутренних» смещений ядер от своих положений равновесия. (Возможность такого разделения несколько ранее предположил Казимир [7].)

Трудность описания движений ядер в этой упомянутой выше интуитивной модели заключалась в определении *движущейся системы* отсчета, такой, что гамильтониан, будучи отнесен к этой движущейся системе отсчета, удовлетворял бы условию Казимира (малое взаимодействие между вращательным и внутренним движениями). Трудно было заранее указать тот «тип» движущейся системы отсчета, который осуществлял бы «разделение движений», что обеспечивало бы эффективность методов теории возмущений, столь необходимой для успешного применения квантовой теории к многочастичным системам.

В своей первой работе Эккарт [5] построил выражения для классической кинетической энергии, отнесенной к системе отсчета, определяемой при помощи *главных моментов инерции в каждый момент времени* (система главных осей). Но в этом выражении слагаемое чисто вращательной энергии не было классическим по форме (см. соотношение (7.10.22)), как следовало бы ожидать в том случае, если бы оно было доминирующим. То же самое аномальное слагаемое вращательной энергии появляется также в уравнении Шредингера для N -частичной системы, в котором используются декартовы координаты, измеряемые по отношению к системе главных осей [8]. Во второй статье Эккарт [6] отвергает систему главных осей как несовместимую с описанием в нормальных координатах малых внутренних движений относительно фиксированных положений равновесия, хотя Ван Флек [9] показал, каким образом следует «исправить» аномальную вращательную энергию в системе главных осей, чтобы получить обычное классическое выражение. (Парадоксально, что Эккарт цитирует работу Ван Флека в качестве одного из своих аргументов против использования системы главных осей¹⁾.) Возникший недавно вновь интерес к этой проблеме (см. работы [10, 11] и цитируемые там источники) может пролить новый свет на возможность использования различных типов движущихся систем отсчета, приспособленных к разнообразным физическим моделям.

Система главных осей и введенная Эккартом система в равной степени фундаментальны; каждая является примером более общего кинематического понятия — *системы отсчета, жестко связанной с телом*. Как мы увидим, это понятие тесно связано со свойствами углового момента.

¹⁾ Интуиция Эккарта была, однако, безошибочной: численные расчеты показывают, что в классической модели сферической волчковой молекулы смещения ядер от положений равновесия остаются малыми относительно эккартовой системы отсчета, но становятся большими (даже неопределенными) для системы главных осей, поскольку главные моменты инерции почти равны и фактически для некоторых движений становятся равными (частное сообщение Р.Б. Уокера, Лос-Аламосская национальная лаборатория).

Угловой момент и симметричные понятия находят многочисленные применения при исследовании колебательно-вращательных спектров многоатомных молекул. Эти применения включают принципы инвариантности, входящие с самого начала в определение движущихся систем отсчета; построение самого гамильтониана; классификацию взаимодействий в соответствии с их тензорными относительно группы $O(3)$, G -инвариантными свойствами, где G — подгруппа в $O(3)$; определение расщепления уровней, связанного с такими взаимодействиями; квантование углового момента вдоль различных осей симметрии молекулы; теорию Фробениуса индуцированных представлений; асимптотическое поведение коэффициентов Вигнера; принцип запрета Паули и другие вопросы. В настоящем разделе рассматриваются эти приложения, и в последнем подразделе дается иллюстрация их успеха в интерпретации недавно полученных лазерных спектров.

Данный раздел получился весьма большим, поскольку мы в нем рассмотрели гораздо более подробно, чем это обычно принято, понятие системы отсчета, жестко связанной с телом, построение и симметрии феноменологического молекулярного гамильтониана, а также реализацию этих симметрий при помощи действий группы на координаты и волновые функции молекул. Мы сочли такое подробное описание необходимым для последовательного рассмотрения структуры и спектров жестких молекул, основанного на методах стандартной теории углового момента, развитых в гл. 3. Физические приложения теории даются главным образом в подразделах о и р — х; большую часть этих подразделов можно читать независимо от других.

б. Определение и кинематика системы отсчета, жестко связанной с телом. Для ясности целесообразно напомнить обсуждавшиеся в разд. 2 кинематические принципы, лежащие в основе всех спектроскопических рассмотрений, в частности в применении к молекулярной спектроскопии. На основе обсуждения в разд. 2 мы заключаем, что подходящей системой отсчета для квантового описания движения молекулы является инерциальная система координат, для которой ассоциированное линейное многообразие векторов состояния удовлетворяет условию, что оператор полного импульса *обращается в нуль* при действии его на любой вектор состояния из многообразия. Для такой системы отсчета положение центра масс молекулы является (в силу принципа неопределенности) *равновероятным по всему пространству*. Поэтому не имеет смысла говорить, например, что «система отсчета определена таким образом, что начало координат совпадает с центром масс частиц».

Правильный способ определения положений частиц в этой специальной системе отсчета состоит во введении *трансляционно-инвариантных положений* $\bar{y}^\alpha$, определяемых при помощи равенства $\bar{x}^\alpha = \bar{y}^\alpha + \bar{R}$, где $\bar{R}$ — вектор центра масс, который задается выражением $\bar{R} = \sum_\alpha m_\alpha \bar{x}^\alpha$, в котором через $\bar{x}^\alpha$ ($\alpha = 1, 2, \dots, N$) обозначен вектор положения частицы с номером α и массой m_α .

Именно трансляционно-инвариантные положения частиц $\{\bar{y}^\alpha\}$, задаваемые относительно специальной фиксированной инерциальной системы отсчета, следует использовать для описания квантовых состояний молекулы. Как только мы усвоили этот концептуально важный факт, может использоваться без су-

шественных недоразумений более привычный язык (в котором некорректно говорится о фиксированном центре масс).

Обратимся теперь к понятию системы отсчета, жестко связанной с телом.

Следуя Экарту, мы можем принять, что существует много типов движущихся систем отсчета, включающих 1) системы отсчета, мгновенное положение которых зависит только от некоторой наперед заданной функции времени, 2) системы отсчета, мгновенное положение и ориентация которых зависят только от мгновенных (трансляционно-инвариантных) положений совокупности частиц, и т.д. Мы выделяем второй тип систем и называем их *системами отсчета, жестко связанными с телом*¹⁾.

Как будет показано в этом разделе, роль систем отсчета, жестко связанных с телом, представляется особенно важной по той причине, что *оператор углового момента, генерирующий вращения этой системы, является полным орбитальным угловым моментом системы частиц* (это утверждение будет разъяснено). Введение такой системы отсчета в описание движений многочастичных систем служит частично для определения *преобразования от декартовых координат к новым координатам* таким образом, что гарантируется возможность построения состояний системы, обладающей точным полным орбитальным угловым моментом (хорошими квантовыми числами LM). Трудностью этого метода как общей процедуры является то, что существует бесконечное множество таких систем отсчета, жестко связанных с телом, и выбор системы отсчета и остальных $3N - 6$ координат должен быть приспособлен к данной физической задаче. Тем не менее могут быть выведены некоторые общие свойства систем отсчета, жестко связанных с телом, и теперь мы переходим к этому вопросу (рассматриваем только декартовые системы координат).

Пусть $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^N$ — мгновенные векторы положения совокупности N точечных частиц с массами $m_1, m_2, \dots, m_N$ относительно некоторой фиксированной точки O , которую можно считать началом координат лабораторной (инерциальной) системы отсчета ($\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3$) (правосторонняя единичная триада). Определение (декартовой) системы отсчета, жестко связанной с телом, следующее: *триада единичных векторов $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3), \hat{f}_i \cdot \hat{f}_j = \delta_{ij}$ где каждый единичный вектор является функцией $\hat{f}_i = \hat{f}_i(\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^N)$ мгновенных векторов положения набора из N частиц $\{\vec{x}^\alpha\}$, называется жестко связанной с телом системой отсчета для совокупности частиц, нумеруемых посредством $\{\alpha: \alpha = 1, 2, \dots, N\}$, если эти единичные векторы $\hat{f}_i$ удовлетворяют следующим условиям:*

¹⁾ Из обсуждения в разд. 3 гл. 2 следует, что существует только одна версия (струны могут не перепутываться в результате вращения на 2π) связанной с телом системы отсчета, ассоциированной с точечными частицами. Этот факт уже означает, что такие связанные с телом системы отсчета в противоположность тем, которые ассоциированы с твердыми (непроницаемыми) телами, могут нести лишь целочисленные значения угловых моментов. Математическое подтверждение этого результата возникает в явных формулах (7.10.10), из которых видно, что угловой момент системы отсчета (определенной так, что полный линейный импульс обращается в нуль) является полным орбитальным угловым моментом частиц. Следовательно, значения квантового числа *полного орбитального углового момента* с необходимостью целочисленны.

- (1) $\hat{f}_i(\vec{x}^1 + \vec{a}, \dots, \vec{x}^N + \vec{a}) = \hat{f}_i(\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^N)$ для каждой трансляции¹⁾ $\vec{a}$;
 (2) $\hat{f}_i(\mathcal{R}\vec{x}^1, \dots, \mathcal{R}\vec{x}^N) = \mathcal{R}[\hat{f}_i(\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^N)]$ для каждого вращения $\mathcal{R}$;
 (3) $\left(\frac{\partial \hat{f}_i}{\partial x_1^2}, \frac{\partial \hat{f}_i}{\partial x_2^2}, \frac{\partial \hat{f}_i}{\partial x_3^2} \right) \neq (0, 0, 0)$

(7.10.1)

по крайней мере для одного i и для всех $\alpha = 1, 2, \dots, \tilde{N}$.

Таким образом, единичные векторы инвариантны относительно трансляций, но вращаются вместе с частицами при одновременном вращении всех частиц²⁾. Последнее условие гарантирует, что ориентация системы отсчета зависит от мгновенного положения каждой частицы в наборе.

Это определение системы отсчета, связанной с телом, означает следующее: каждый единичный вектор $\hat{f}_k$, образующий жестко связанную с телом систему отсчета, является векторным оператором по отношению к полному орбитальному угловому моменту $M = \sum_{\alpha} \vec{x}^{\alpha} \times \vec{p}^{\alpha}$ системы:

$$[M_i, \hat{f}_m \cdot \hat{l}_j] = i e_{ijk} \hat{f}_m \cdot \hat{l}_k. \quad (7.10.2)$$

(Число $i = \sqrt{-1}$ в правой части последней формулы не следует смешивать с индексами $i, j, k, m, \dots$, которые принимают значения 1, 2, 3.)

Важным свойством всех связанных с телом систем отсчета в отличие от произвольных движущихся систем является то, что трансляционно-инвариантные координаты частиц относительно системы отсчета, жестко связанной с телом, есть инварианты по отношению ко всем вращениям-инверсиям частиц.

Доказательство. Координаты y_i^{α} ($i = 1, 2, 3$) частицы α относительно системы отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ являются скалярными произведениями $y_i^{\alpha} = (\vec{x}^{\alpha} - \vec{R}) \cdot \hat{f}_i$, где $\vec{R}$ — вектор, описывающий центр масс, $\vec{R} \equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha} \vec{x}^{\alpha}$. ■

Второе важное свойство системы отсчета, жестко связанной с телом, состоит в том, что генератор вращений системы отсчета является полным орбитальным угловым моментом частиц. Изложим подробнее доказательство этого важного результата.

Доказательство. Компоненты $M_i = \vec{M} \cdot \hat{l}_i$ оператора $\vec{M}$ полного углового момента для набора из N частиц определяются согласно

¹⁾ Это требование трансляционной инвариантности является существенным в определении связанной с телом системы отсчета, так как все рассуждения можно переформулировать в терминах трансляционно инвариантных положений $\{\vec{y}^{\alpha}\}$.

²⁾ Для обсуждаемых в настоящем разделе конкретных систем отсчета, жестко связанных с телом, мы обнаруживаем, что при инверсии положений всех частиц $\vec{x}^{\alpha} \rightarrow -\vec{x}^{\alpha}$ связанная с телом система отсчета также обращается, т.е. $\hat{f}_i \rightarrow -\hat{f}_i$. Соответственно в определении связанной с телом системы отсчета полезно допустить как левосторонние, так и правосторонние системы отсчета. Впоследствии это свойство будет использовано при обсуждении свойств инвариантности молекулярного гамильтониана относительно таких пространственных инверсий.

$$M_i = -i \sum_x \left(x_j^x \frac{\partial}{\partial x_k^x} - x_k^x \frac{\partial}{\partial x_j^x} \right), \quad i, j, k \text{ циклически,} \quad (7.10.3)$$

где $x_i^\alpha = \bar{x}^\alpha \cdot \bar{l}_i$ ($i = 1, 2, 3$) — компоненты вектора положения $\bar{x}^\alpha$ относительно лабораторной системы отсчета. Используя y^α для обозначения вектора положения частицы с номером α относительно центра масс $\bar{R}$, имеем

$$x^x = \bar{R} + y^x, \quad \sum_x m_x y^x = \bar{0}; \quad (7.10.4)$$

или

$$x_i^x = R_i + \sum_j C_{ij} y_j^x, \quad (7.10.5)$$

где через $R_i = \bar{R} \cdot \bar{l}_i$ ($i = 1, 2, 3$) обозначены компоненты вектора $\bar{R}$ в лабораторной системе отсчета; $y_j^\alpha = \bar{y}^\alpha \cdot \bar{f}_j$ ($\alpha = 1, 2, \dots, n$; $j = 1, 2, 3$) обозначают компоненты положений частиц относительно связанной с телом системы отсчета, размещенной в центре масс; наконец,

$$C_{ij} = \bar{l}_i \cdot \bar{f}_j, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (7.10.6)$$

обозначают косинусы углов между лабораторной и жестко связанной с телом системами отсчета.

Затем мы используем преобразование (7.10.5) для вычисления производных, появляющихся в определении M_i , в терминах производных по отношению к величинам R_p , C_{jk} и $y_j^{\beta 1)$:

$$\frac{\partial}{\partial x_i^x} = \sum_j \left(\frac{\partial R_j}{\partial x_i^x} \right) \frac{\partial}{\partial R_j} + \sum_{jk} \left(\frac{\partial C_{jk}}{\partial x_i^x} \right) \frac{\partial}{\partial C_{jk}} + \sum_{\beta j} \left(\frac{\partial y_j^\beta}{\partial x_i^x} \right) \frac{\partial}{\partial y_j^\beta}. \quad (7.10.7)$$

Используя эти производные в равенстве (7.10.3) и свойство дифференцирования $M_i(fg) = f(M_i g) + (M_i f)g$ для операторов $\{M_i\}$, получаем

$$M_i = \sum_j [M_i, R_j] \frac{\partial}{\partial R_j} + \sum_{jk} [M_i, C_{jk}] \frac{\partial}{\partial C_{jk}} + \sum_{\beta j} [M_i, y_j^\beta] \frac{\partial}{\partial y_j^\beta} \quad (7.10.8)$$

где $[A, B]$ означает коммутатор $AB - BA$.

Все коммутаторы в последнем выражении вычисляются, если заметить, что оператор M является генератором вращения $\mathcal{R}$ векторов $\{\bar{x}^\alpha\}$. Таким образом, векторы $\{\bar{x}^\alpha\}$, а также $\bar{R}, \bar{f}_1, \bar{f}_2, \bar{f}_3$, — все являются *векторными операторами* (неприводимыми тензорами ранга 1) относительно $\bar{M}$, а каждое y_j^β есть инвариант. Из этого наблюдения получаем следующий список коммутаторов:

$$[M_i, y_j^\beta] = 0,$$

$$[M_i, R_j] = i e_{ijk} R_k,$$

¹⁾ При желании тому факту, что эти производные не являются независимыми, может быть дано четкое объяснение; однако оно не меняет результата (7.10.10).

$$[M_i, \hat{f}_j] = i(\hat{f}_j \times \hat{l}_i),$$

$$[M_i, C_{jm}] = ie_{ijk} C_{km}. \quad (7.10.9)$$

Подстановка этих коммутаторов в соотношение (7.10.8) дает следующий результат:

$$M_i = -i \left(R_j \frac{\hat{c}}{\partial R_k} - R_k \frac{\hat{c}}{\partial R_j} \right) + J_i,$$

$$J_i = -i \sum_l \left(C_{jl} \frac{\hat{c}}{\partial C_{kl}} - C_{kl} \frac{\hat{c}}{\partial C_{jl}} \right), \quad (7.10.10)$$

где i, j, k циклически по 1, 2, 3¹⁾. Учтем теперь, что в специальной инерциальной системе отсчета (обсуждавшейся выше) действие первого слагаемого в выражении для M_i на линейном многообразии векторов состояния равно нулю (поскольку действие самого полного линейного импульса на эти состояния по определению дает нуль). Поэтому на физических состояниях существует только второе слагаемое J_i . Это обосновывает то утверждение, что полный орбитальный угловой момент системы N частиц есть генератор вращений системы отсчета, жестко связанной с телом.

в. Вид векторов состояния для изолированных систем, описываемых в связанной с телом системе отсчета. Для понимания роли систем отсчета, жестко связанных с телом, в описании квантовых систем полезно рассмотреть вид векторов состояния $|\alpha\rangle JM\rangle$ точного полного углового момента (J, M) . Для ясности примем параметризацию при помощи углов Эйлера $(\alpha\beta\gamma)$ для матрицы C (см. соотношение (2.37) гл. 2). Тогда векторы состояния относительно инерциальной системы отсчета с необходимостью имеют вид²⁾

$$\langle y; \alpha\beta\gamma | (x) JM \rangle = \sum_K D_{MK}^J(\alpha\beta\gamma) \Phi_{(x)K}^J(y). \quad (7.10.11)$$

где $D_{MK}^J(\alpha\beta\gamma)$ — элементы матрицы вращений, а y обозначает вектор-строку относительных координат:

¹⁾ Если принять $C_{ij} = \pm R_{ij} = \pm R_{ij}(\alpha\beta\gamma)$, где R_{ij} — элементы матрицы углов Эйлера (2.37), то J_i будут в точности операторами (3.101), т.е. $J_i \Psi(c) = \mathcal{J}_i \Phi_{\pm}(\alpha\beta\gamma)$ для $C_{ij} = \pm R_{ij}(\alpha\beta\gamma)$, где $\Phi_{\pm}(\alpha\beta\gamma) = \Psi(\pm R(\alpha\beta\gamma))$. Формулой (7.10.10) можно воспользоваться для вычисления операторов J_i в других параметризациях, и мы используем (зависимые) переменные C_{ij} всюду в этом разделе для обозначения такой большей общности.

Заметим, что формулы (7.10.9) и (7.10.10) справедливы даже для левосторонней системы отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ в которой C — несобственная ортогональная матрица. Более того, компоненты углового момента (7.10.10) инвариантны относительно преобразования $C \rightarrow -C$, причем это является следствием того факта, что угловой момент представляет собой аксиальный вектор.

²⁾ Мы надеемся, что использование (α) для неконкретизированных квантовых чисел не приведет к смешиванию с углом Эйлера α или с номером частицы α .

$$y = (y_1^1, y_2^1, y_3^1; \dots; y_1^N, y_2^N, y_3^N). \quad (7.10.12)$$

(в этом случае операторы углового момента J_i реализуются посредством дифференциальных операторов $\mathcal{J}_i$, задаваемых явно формулами (3.101) гл. 3).

Доказательство. Доказательство формулы (7.10.11) весьма простое: она следует из полноты матриц вращения, которая означает, что наиболее общим решением диагонализации операторов $\mathcal{J}^2$ и $\mathcal{J}_3$ является $\sum_K a_K D_{MK}^{J*}(\alpha\beta\gamma)$, где коэффициенты есть *инварианты* относительно вращений. Но вид преобразования (7.10.5) показывает, что единственными инвариантами, которые входят в качестве аргументов a_K , являются сами $3N$ относительных координат $\{y^\alpha_i\}$. ■

Формулу (7.10.11) можно выразить также при помощи других параметризаций матрицы C . Если использовать однородные полиномиальные формы $\mathcal{D}^J(C)$ (заменив R_{ij} на C_{ij}), задаваемые выражениями (6.178) и (6.179) в гл. 6, то вообще нет необходимости параметризовать матрицу C . В этом случае формула (7.10.11) записывается в виде¹⁾

$$\langle y; C | (x)JM \rangle = \sum_K \mathcal{D}_{MK}^{J*}(C) \Phi_{(x)K}^J(y). \quad (7.10.13)$$

В последней формуле C фактически может быть ортогональной матрицей, т.е. не обязательно, чтобы она была собственной.

Выраженный формулой (7.10.11) результат был приведен Хиршфельдером и Вигнером [8] для системы главных осей. Это общее соотношение, справедливое для любой физической системы (обладающей вращательной и трансляционной симметрией), для описания которой используется система отсчета, жестко связанная с телом.

Значение результата, выраженного формулой (7.10.11), состоит в том, что он решает задачу построения состояний точного полного углового момента для системы N взаимодействующих частиц. Не следует обманываться кажущейся простотой этого результата. Очевидно, что сложности этой задачи переместились в определение связанной с телом системы отсчета, «подходящей» для конкретной физической системы, и в нахождение «внутренних» волновых функций $\Phi_{(\alpha)K}^J$.

После того как мы показали общую связь между понятием системы отсчета, жестко связанной с телом, и теорией углового момента, рассмотрим теперь подробно некоторые специальные связанные с телом системы отсчета, которые встречаются в литературе.

г. Система отсчета мгновенных главных осей инерции. Мгновенные моменты инерции относительно центра масс для системы N точечных частиц определяются формулой²⁾

$$Q_{ij} \equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha} (x_i^{\alpha} - R_i)(x_j^{\alpha} - R_j). \quad (7.10.14)$$

¹⁾ Несколько позже (см. равенство (7.10.204)) мы обобщим волновые функции ротатора в этом результате, с тем чтобы включить множитель $(\det C)^{\sigma}$, $\sigma = 0, 1$. Этот множитель важен при рассмотрении эффекта пространственной инерсии.

²⁾ Величины $I_{ij} = \delta_{ij}(\text{tr} Q) - Q_{ij}$ обычно называют моментами инерции: I_{ii} — момент инерции относительно оси i , I_{ij} ($i \neq j$) — момент инерции для осей i и j .

Тогда матрица $Q = (Q_{ij})$ вещественна и симметрична (Q часто называют 3×3 -квадруполем масс). Поэтому матрицу Q можно диагонализировать при помощи вещественной собственной ортогональной матрицы C ¹⁾:

$$\tilde{C}QC = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3). \quad (7.10.15)$$

Тогда ортогональная триада единичных векторов $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$, определяемых в виде

$$\hat{f}_j = \sum_i C_{ij} \hat{i}_i \quad (7.10.16)$$

является жестко связанной с телом системой отсчета, которая называется системой главных осей. (Это отождествляет матрицу C в равенстве (7.10.15) с матрицей C в соотношении (7.10.6). Заметим, что $\hat{f}_j$ неявно зависят от x_i^0 через элементы C_{ij} .)

Доказательство того, что триада $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ образует связанную с телом систему отсчета, можно осуществить путем проверки выполнения определяющих свойств (1) — (3) (7.10.1). Дальнейшие свойства этой системы отсчета описаны ниже в разд. к.

Система главных осей является хорошо определенным понятием для общего случая движений набора из N частиц. Для физических систем, для которых могут быть сделаны специальные предположения относительно движений частиц, в литературе имеются другие типы систем отсчета, жестко связанных с телом. Например, молекулярная физика в основном была развита на основе использования связанной с телом системы отсчета, введенной Эккартом [6] (см. также [12 — 15]). Обратимся теперь к описанию этой системы отсчета.

д. Молекулярная система отсчета Эккарта. Сначала сосредоточим внимание на двух аспектах описания классической жесткой молекулы: 1) описание статической модели (равновесной конфигурации) молекулы и 2) описание движения динамической модели молекулы в пространстве-времени.

Рассмотрим прежде всего описание статической модели (гантелеобразной модели, построенной из сфер и перемычек), состоящей из N ядер, нумеруемых индексами $\alpha = 1, 2, \dots, N$, с массами $m_1, m_2, \dots, m_N$, у которой расстояния между всеми парами ядер постоянны. Статическая модель будет описана в лабораторной системе отсчета L с базисными векторами $(\hat{i}_1, \hat{i}_2, \hat{i}_3)$, которая является системой главных осей, находящейся в центре масс. Таким образом, статическая модель описывается набором векторов

$$\mathcal{A} = \{\vec{a}^\alpha; \alpha = 1, 2, \dots, N\}, \quad (7.10.17)$$

где $\vec{a}^\alpha$ — вектор положения, направленный из начала координат системы L в точку, где находится атом с номером α . Каждый вектор $\vec{a}^\alpha$ может быть выражен относительно системы отсчета L в виде

¹⁾ Матрица C единственна лишь с точностью до знака и перестановок ее столбцов. Следовательно, для того чтобы с Q можно было ассоциировать единственную матрицу C , необходимо наложить дополнительные условия. Здесь мы пренебрегаем такими тонкостями.

$$\vec{a}^2 = a_1^2 \vec{l}_1 + a_2^2 \vec{l}_2 + a_3^2 \vec{l}_3, \quad (7.10.18)$$

где a_1^2, a_2^2, a_3^2 — некоторые конкретные вещественные числа, удовлетворяющие равенствам

$$\sum_i m_i a_i^2 = 0, \quad (7.10.19)$$

$$\sum_i m_i a_i^2 a_j^2 = \delta_{ij} \dot{\lambda}_i^0. \quad (7.10.20)$$

Рассмотрим теперь модель движения молекулы в пространстве-времени. Интуитивно представляется следующая ситуация. Мы предполагаем, что жесткая конструкция перемещается и вращается в пространстве, и что ядра осуществляют малые колебательные движения в окрестности (движущихся) точек равновесия. Такая интуитивная картина для совокупности движений N частиц соответствует нашей концепции движений (основанной на эмпирическом знании) того, что в настоящее время называют «жесткой» молекулой. Существует достаточно много молекул «жесткого» типа, чтобы оправдать тщательную разработку такой модели. (Очевидно, что в феноменологической модели молекулы, какой является рассматриваемая нами модель, пренебрегается многими аспектами «реальной молекулы», и вряд ли можно ожидать, что эта модель будет справедлива в общем случае: данная модель предназначена специально для описания вибрационно-ротационных движений ядер n , более того, для ограниченной области энергий.)

Даже после того как мы сформулировали модель, имеется еще немало подходов, которые могут быть использованы, чтобы дать описание движений. Продолжим интуитивные рассуждения. Использование движущейся системы отсчета предполагается в том случае, когда целью является получить классический гамильтониан H для системы, который для движений в окрестности равновесной конфигурации имеет приближенный вид

$$H \simeq T_{\text{С.М.}} + H_R + H_V, \quad (7.10.21)$$

где $T_{\text{С.М.}}$ — кинетическая энергия центра масс, H_R — вращательная кинетическая энергия, а H_V — слагаемое гамильтониана, соответствующее кинетической и потенциальной энергиям малых движений около положения равновесия. Интуиция подсказывает следующие выражения для H_R и H_V :

$$H_R = \frac{\mathcal{P}_1^2}{2I_1} + \frac{\mathcal{P}_2^2}{2I_2} + \frac{\mathcal{P}_3^2}{2I_3},$$

$$H_V = \sum_{\mu=1}^{3N-6} (p_\mu^2 + \omega_\mu^2 q_\mu^2) / 2. \quad (7.10.22)$$

В определении H_R символ $\mathcal{P}_i$ ($i = 1, 2, 3$) обозначает компоненту полного углового момента J вдоль i -й оси движущейся системы отсчета, а I_i есть главный момент инерции равновесной конфигурации относительно i -й оси движущейся системы отсчета. (Движущуюся систему отсчета мы выбираем такой, что она совпадает с системой главных осей, когда ядра находятся в своих точках равновесия.) В определении H_V символ q_μ ($\mu = 1, 2, \dots, 3N - 6$) обозначает нормальную координату, p_μ — сопряженный ей линейный импульс, а ω_μ — частоту μ -й

нормальной моды колебания. (Анализ колебательного движения по нормальным модам может быть осуществлен на невращающейся молекуле при помощи нескольких доступных методов.)

Рассмотрим теперь, как можно сформулировать намеченный выше подход.

Первая задача, которую необходимо решить, состоит в определении подходящей движущейся системы отсчета. Эккарт [6] решал эту задачу путем наложения на движущуюся систему отсчета следующих двух условий.

1. *Условие Казимира.* В пределе исчезающе малых смещений ядер от равновесной конфигурации слагаемое кинетической энергии, представляющее кориолисово взаимодействие между вращением и внутренними движениями, должно быть равно нулю.

2. *Линейность внутренних координат.* Внутренние степени свободы должны описываться координатами, которые являются линейными комбинациями (с фиксированными числовыми коэффициентами) компонент смещений ядер от положения равновесия, причем компоненты следует рассматривать по отношению к движущейся системе отсчета. (Второе условие налагается, чтобы гарантировать, что нормальные координаты, вычисленные для невращающейся молекулы, могут быть перенесены без изменения на вращающуюся колеблющуюся молекулу.)

Переходим теперь непосредственно к определению эккартовой системы отсчета, следуя изложению работы [16]. Ниже будет показано, что условие Казимира и условие линейности выполняются (см. замечание «б» ниже). Выражения (7.10.21) и (7.10.22) для гамильтониана в «нулевом порядке» мы сможем обосновывать только в разделе н, после того как будет построен полный гамильтониан для модели жесткой молекулы.

Явную конструкцию эккартовой системы отсчета можно дать следующим образом. 1) Вводим три вектора F_i , называемые *эккартовыми векторами*, которые определяются в виде
$$\vec{F}_i \equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha} a_i^{\alpha} \vec{x}^{\alpha} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} a_i^{\alpha} \vec{y}^{\alpha}, \quad (7.10.23)$$

где $\vec{x}^{\alpha}$ — мгновенный вектор положения ядра α в лабораторной системе отсчета L , а $\vec{y}^{\alpha} = \vec{x}^{\alpha} - R$. 2) Определяем триаду единичных перпендикулярных векторов ($\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3$) при помощи¹⁾

¹⁾ Этот метод непосредственно обобщается на случай построения n перпендикулярных векторов $x_1, x_2, \dots, x_n$ из n линейно независимых векторов $y_1, y_2, \dots, y_n$. Интересно заметить, что стандартная процедура Грама-Шмидта инвариантна относительно группы треугольных преобразований

$$\begin{aligned} y_1 &\rightarrow \alpha_{11} y_1, & y_2 &\rightarrow \alpha_{21} y_1 + \alpha_{22} y_2 \dots \\ y_n &\rightarrow \alpha_{n1} y_1 + \alpha_{n2} y_2 + \dots + \alpha_{nn} y_n. \end{aligned}$$

в то время как изложенный выше метод инвариантен относительно группы перестановок в том смысле, что любая перестройка порядка векторов в заданном наборе $y_1, y_2, \dots, y_n$, после которой следует процедура ортогонализации, приводит к такой же перестройке для перпендикулярных векторов. Поэтому процедура Грама — Шмидта инвариантна по отношению к масштабному преобразованию $y_i \rightarrow \lambda_i y_i$, тогда как симметрическая ортогонализация, как легко показать, дает наборы ортонормальных векторов, зависящих от λ_i . Таким образом, симметрическая ортогонализация зависит от *норм* векторов $\{y_i\}$, а также от углов между ними. На этот последний факт указал нам Б.Брэндоу из Лос-Аламосской на-

$$\hat{f}_i = \sum_j (F^{-1})_{ij} \bar{F}_j, \quad (7.10.24)$$

где F обозначает симметричную матрицу Грама с элементами $F_{ij} = \bar{F}_i \cdot \bar{F}_j$. (Мы будем предполагать, что $\bar{F}_1, \bar{F}_2, \bar{F}_3$ являются линейно независимыми, так что F положительно определена; тогда $F^{-1/2}$ по определению есть положительно определенная матрица, такая, что $F^{-1/2} F^{-1/2} = F^{-1}$. Условие положительной определенности налагается для единственности определения квадратных корней, поскольку в общем случае у симметричной положительно определенной 3×3 -матрицы существует восемь квадратных корней.)

Заметим, что эккартовы векторы зависят неявно от векторов положения частиц $\vec{x}^N$. Если обозначить этот факт записью $\hat{f}_i(\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^N)$, то легко проверить, что триада $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ удовлетворяет определяющим соотношениям (7.10.1) для системы отсчета, жестко связанной с телом¹⁾. (Заметим кроме того, что инвариантность постоянных $\{a_i^\alpha\}$ по отношению к вращениям существенна при доказательстве того, что из преобразования $\vec{x}^N \rightarrow \mathcal{R}\vec{x}^N$ следует $\bar{F}_i \rightarrow \mathcal{R}\bar{F}_i$, из которого в свою очередь следует $\hat{f}_i \rightarrow \mathcal{R}\hat{f}_i$.)

Теперь, после того как определена связанная с телом эккартова система отсчета (мы рассматриваем здесь только неплоскостные молекулы), мы можем определить преобразование от декартовых векторов положения $\{\vec{x}^N\}$ относительно лабораторной системы отсчета к «молекулярным координатам». Вектор положения α -го ядра имеет вид

$$\vec{x}^\alpha = \bar{R} + \vec{u}^\alpha + \vec{\rho}^\alpha, \quad (7.10.25)$$

где $\bar{R}$ — вектор мгновенного центра масс, $\vec{u}^\alpha$ — вектор положения движущейся точки равновесия α -го ядра относительно центра масс, имеющий вид

$$\vec{u}^\alpha = a_1^\alpha \hat{f}_1 + a_2^\alpha \hat{f}_2 + a_3^\alpha \hat{f}_3, \quad (7.10.26)$$

циональной лаборатории. Швайнлер и Вигнер [17] приписывают этот метод *симметрической ортогонализации* Ландшофу [18]. Но Ландшоф не дал этот результат в законченной форме $x_i = \sum_j (G^{-1/2})_{ij} y_j$, $G_{ij} = (y_i, y_j)$. Поскольку интерес Ландшофа был направлен на применение теории возмущений с использованием интегралов перекрытия $S_{ij} = G_{ij} - \delta_{ij}$, то x_i давались лишь приближенно в форме разложения величины $(I + S)^{-1/2}$, которая включала несколько членов по S_{ij} . По-видимому, Лёвдин [19] впервые дал общую конструкцию для физических задач. Юргенсен [20] рассмотрел другие интересные свойства этого метода ортогонализации. Сам по себе этот метод хорошо известен в математической литературе как полярная факторизация вещественной несингулярной $n \times n$ -матрицы Y на ортогональную матрицу X и симметрическую положительно определенную матрицу $G^{1/2}$, т.е. $Y = G^{1/2} X$, $G = Y Y^T$ (см. [20a], стр. 276, 286, и цитируемую там работу [171]; [206], стр. 77 и [20 в]).

1) Следует отметить, что числовые постоянные $\{a_i^\alpha\}$, определяющие статическую модель, входят непосредственно в определение «эккартовой системы отсчета». Таким образом, физическое условие, чтобы существовало «среднее» положение, связанное с движением каждого из ядер, есть существенное условие для формулировки определения этой связанной с телом системы отсчета.

относительно движущейся эккартовой системы отсчета; $\vec{\rho}^\alpha$ — вектор смещения ядра α от точки равновесия $\vec{R} + \vec{u}^\alpha$.

Имеется шесть условий, наложенных на векторы смещений $\{\vec{\rho}^\alpha\}$: условие центра масс

$$\sum_{\alpha} m_{\alpha} \vec{\rho}^{\alpha} = \vec{0}, \quad (7.10.27)$$

и условия Эккарта

$$\sum_{\alpha} m_{\alpha} \vec{u}^{\alpha} \times \vec{\rho}^{\alpha} = \vec{0}. \quad (7.10.28)$$

Второй набор условий вытекает из легко доказываемого соотношения между векторами эккартовой системы отсчета $\hat{f}_i$ и F_i :

$$\hat{f}_1 \times \vec{F}_1 + \hat{f}_2 \times \vec{F}_2 + \hat{f}_3 \times \vec{F}_3 = \vec{0}. \quad (7.10.29)$$

Совокупность векторов $\{\vec{\rho}^\alpha; \alpha = 1, \dots, N\}$, удовлетворяющих условиям (7.10.27) и (7.10.28), мы называем набором векторов смещений для системы отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$.

Замечания. а) Равенство (7.10.25) дает физическую (классическую) модель жесткой молекулы в движении: относительно движущейся эккартовой системы отсчета (находящейся в центре масс) мы «видим» ядро α смещенным от фиксированного (если его рассматривать в движущейся системе отсчета) положения $\vec{u}^\alpha$ на мгновенный вектор смещения $\vec{\rho}^\alpha$. Для жестких молекул величина $\vec{\rho}^\alpha$ мала, так что ядро α остается в окрестности точки, которую определяет $\vec{u}^\alpha$. Ядра движутся коллективно таким образом, что удовлетворяются условия (7.10.27) и (7.10.28). б) Из условий (7.10.28) следуют условия Казимира (см. [21]): дифференцирование равенства (7.10.28) по времени t с учетом $d\hat{f}_i/dt = \vec{\omega} \times \hat{f}_i$ ($\vec{\omega}$ — угловая скорость системы отсчета) дает соотношение

$$\sum_{\alpha} m_{\alpha} \vec{u}^{\alpha} \times \vec{v}^{\alpha} = \vec{0}, \quad (7.10.30)$$

где $\vec{v}^\alpha$ — скорость ядра α по отношению к системе отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$. Используя теперь известное выражение для классической кинетической энергии T совокупности N частиц (с полной массой m) относительно движущейся системы отсчета, находящейся в центре масс,

$$\begin{aligned} 2T = m \frac{d\vec{R}}{dt} \cdot \frac{d\vec{R}}{dt} + \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\vec{\omega} \times \vec{y}^{\alpha}) \cdot (\vec{\omega} \times \vec{y}^{\alpha}) \\ + \sum_{\alpha} m_{\alpha} \vec{y}^{\alpha} \cdot \vec{v}^{\alpha} + 2\vec{\omega} \cdot \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\vec{y}^{\alpha} \times \vec{v}^{\alpha}), \end{aligned} \quad (7.10.31)$$

мы видим, что слагаемое Кориолиса $2\vec{\omega} \cdot \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\vec{y}^{\alpha} \times \vec{v}^{\alpha})$ равно нулю для всех $\vec{\rho}^\alpha = \vec{0}$, т.е. для $\vec{y}^\alpha = \vec{u}^\alpha$ ($\alpha = 1, 2, \dots, N$).

Приведенные в этом разделе результаты послужили мотивировкой для введения эккартовой системы отсчета с использованием свойств специальной модели жесткой молекулы. Нам потребуются еще и другие свойства этой системы отсчета, но мы отложим их рассмотрение до последующих разделов.

е. Системы отсчета выделенной частицы. В задачах рассеяния налетающая одиночная частица (будем называть ее частица 1) является выделенной, и можно

ввести жестко связанную с телом систему отсчета следующим образом: пусть $\vec{y}^\alpha = \vec{x}^\alpha - \vec{R}$, $\alpha = 1, 2, \dots, N$, обозначают векторы положения относительно центра масс; рассмотрим две дополнительные частицы 2 и 3, такие, что мгновенные векторы относительно положения $\vec{y}^1, \vec{y}^2, \vec{y}^3$ линейно независимы (следовательно, $N > 3$). Мы можем затем ввести связанную с телом систему отсчета $(\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3)$ путем осуществления ортогонализации¹⁾ Грама — Шмидта над векторами $\vec{y}^1, \vec{y}^2, \vec{y}^3$:

$$\begin{aligned}\hat{f}_1 &= \vec{y}^1 (D_1)^{-1/2}, \\ \hat{f}_2 &= \left[\begin{array}{cc} \vec{y}^1 \cdot \vec{y}^1 & \vec{y}^1 \cdot \vec{y}^2 \\ \vec{y}^1 & \vec{y}^2 \end{array} \right] (D_1 D_2)^{-1/2}, \\ \hat{f}_3 &= \left[\begin{array}{ccc} \vec{y}^1 \cdot \vec{y}^1 & \vec{y}^1 \cdot \vec{y}^2 & \vec{y}^1 \cdot \vec{y}^3 \\ \vec{y}^2 \cdot \vec{y}^1 & \vec{y}^2 \cdot \vec{y}^2 & \vec{y}^2 \cdot \vec{y}^3 \\ \vec{y}^1 & \vec{y}^2 & \vec{y}^3 \end{array} \right] (D_1 D_2 D_3)^{-1/2},\end{aligned}\quad (7.10.32)$$

где $||$ обозначает детерминант, D_k ($k = 1, 2, 3$) — $k \times k$ -детерминант Грама (инварианты относительно вращений-инверсий), образованный из векторов $\vec{y}^1, \dots, \vec{y}^k$. Ясно, что $(\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3)$ является системой отсчета, жестко связанной с телом²⁾.

ж. Единообразный метод определения связанных с телом систем отсчета.

Конструкция (7.10.24) экартовой системы отсчета из трех векторов $\vec{F}_i$ ($i = 1, 2, 3$), которые заданы согласно (7.10.23), предполагает единообразный метод введения связанных с телом систем отсчета: мы заменяем набор постоянных $\{a_i^\alpha\}$ в определении $\vec{F}_i$ совокупностью наперед заданных функций $\{u_i^\alpha = u_i^\alpha(\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^N)\}$, удовлетворяющих следующим условиям:

трансляционная инвариантность

$$u_i^\alpha(\vec{x}^1 + \vec{a}, \dots, \vec{x}^N + \vec{a}) = u_i^\alpha(\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^N).$$

вращательная инвариантность

$$u_i^\alpha(\mathcal{R}\vec{x}^1, \dots, \mathcal{R}\vec{x}^N) = u_i^\alpha(\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^N). \quad (7.10.33)$$

условие центра масс

$$\sum_\alpha m_\alpha u_i^\alpha = 0.$$

¹⁾ Можно также воспользоваться симметричной ортогонализацией (см. примечание на стр. 499).

²⁾ Системы отсчета этого типа были введены в молекулярные задачи рассеяния Кертисом и др. [22] (см. также [23, 24]). Кертис и др. фактически строят лишь два вектора $\vec{f}_1$ и $\vec{f}_2$ и не отмечают, что привлекается именно ортогонализация Грама — Шмидта. Тогда третий вектор определяется в виде $\vec{f}_3 = \vec{f}_1 \times \vec{f}_2$.

Обобщенные эккартовы векторы, определяемые в виде¹⁾

$$\vec{F}_i = \sum_{\alpha} m_{\alpha} u_i^{\alpha} (\vec{x}^{\alpha} - \vec{R}) = \sum_{\alpha} m_{\alpha} u_i^{\alpha} \vec{y}^{\alpha} \quad (7.10.34)$$

используются теперь для определения системы отсчета $(\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3)$ при помощи симметричной процедуры ортогонализации:

$$\hat{f}_i = \sum_j (F^{-1})_{ij} \vec{F}_j. \quad (7.10.35)$$

Теперь легко показать, что ортонормированная триада $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ представляет собой жестко связанную с телом систему отсчета; иначе говоря, она удовлетворяет свойствам (1) и (2) в (7.10.1). (Мы не пытались сформулировать в общем случае свойства величин $\{u_i^{\alpha}\}$, которые приводили бы к свойству (3), но мы будем предполагать, что свойство (3) выполняется для любого конкретного выбора функций $\{u_i^{\alpha}\}$.)

Имеются следующие трансляционно и вращательно инвариантные функции $\{u_i^{\alpha}\}$, которые приводят к введенным в разд. г — е системам отсчета, жестко связанным с телом.

Система главных осей

$$u_i^{\alpha} = \sum_j C_{ji} (x_j^{\alpha} - R_j) = \sum_j C_{ji} (\vec{y}^{\alpha} \cdot \hat{l}_j). \quad (7.10.36)$$

где C_{ij} — функции координат $\{x_j^{\alpha}\}$, получаемые из собственной ортогональной матрицы C , которая диагонализует квадруполь масс Q (см. (7.10.15)). (Этот метод получения системы главных осей представляется более сложным, чем прямое определение (7.10.16), но он обладает тем преимуществом, что объединяет этот вывод с другими методами; кроме того, обобщенные эккартовы векторы (7.10.35) важны сами по себе, как будет показано ниже.)

Эккартова молекулярная система отсчета

$$\{u_i^{\alpha}\} = \{a_i^{\alpha}\} = \text{параметры равновесной конфигурации}. \quad (7.10.37)$$

Система отсчета выделенной частицы²⁾

¹⁾ В этом общем рассмотрении мы принимаем, что векторы $\vec{F}_1, \vec{F}_2, \vec{F}_3$ линейно независимы для некоторой подходящей области определения векторов $\{\vec{x}^{\alpha}\}$.

Отображение симметричной ортогонализации от эккартовых векторов к эккартовым системам отсчета является отображением типа много-в-один. Чтобы показать это, обозначим, через $(\vec{F}_1, \vec{F}_2, \vec{F}_3)$ заданный набор эккартовых векторов (конкретизированных вращательно-трансляционных инвариантов u_i^{α} в соотношении (7.10.34)), а через $(\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3)$ — соответствующую систему отсчета. Пусть S обозначает произвольную симметрическую положительно определенную матрицу 3×3 , элементы которой есть вращательные инварианты. Для каждой матрицы S определяем новые эккартовы векторы посредством $\vec{F}_i(S) = \sum_{\alpha} m_{\alpha} u_i^{\alpha}(S) \vec{y}^{\alpha}$, где $u_i^{\alpha}(S) = \sum_j (S F^{-1})_{ij} u_j^{\alpha}$ ($i = 1, 2, 3$). Тогда при симметричной ортогонализации находим $(\vec{F}_1(S), \vec{F}_2(S), \vec{F}_3(S)) = (\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3)$ для каждой S .

²⁾ Эти системы упоминаются здесь только для иллюстрации; их свойства более подробно здесь не обсуждаются.

$$\begin{aligned}
u_1^x &= \hat{y}^x \cdot \hat{y}^1 (D_1)^{-\frac{1}{2}}, \\
u_2^x &= \begin{vmatrix} \hat{y}^1 \cdot \hat{y}^1 & \hat{y}^1 \cdot \hat{y}^2 \\ \hat{y}^x \cdot \hat{y}^1 & \hat{y}^x \cdot \hat{y}^2 \end{vmatrix} (D_1 D_2)^{-\frac{1}{2}}, \\
u_3^x &= \begin{vmatrix} \hat{y}^1 \cdot \hat{y}^1 & \hat{y}^1 \cdot \hat{y}^2 & \hat{y}^1 \cdot \hat{y}^3 \\ \hat{y}^2 \cdot \hat{y}^1 & \hat{y}^2 \cdot \hat{y}^2 & \hat{y}^2 \cdot \hat{y}^3 \\ \hat{y}^x \cdot \hat{y}^1 & \hat{y}^x \cdot \hat{y}^2 & \hat{y}^x \cdot \hat{y}^3 \end{vmatrix} (D_1 D_2 D_3)^{-\frac{1}{2}}. \quad (7.10.38)
\end{aligned}$$

Связанная с телом система отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$, определяемая при помощи (7.10.35), и обобщенные экартовы векторы $\bar{F}_1, \bar{F}_2, \bar{F}_3$, определяемые согласно (7.10.34), всегда удовлетворяют соотношению

$$\hat{f}_1 \times \bar{F}_1 + \hat{f}_2 \times \bar{F}_2 + \hat{f}_3 \times \bar{F}_3 = \vec{0} \quad (7.10.39)$$

поскольку $(F^{-1/2})_{ij}$ симметрично по (i, j) , тогда как $\hat{F}_i \times \hat{F}_j$ антисимметрично по (i, j) . Если определить $\bar{u}^\alpha$ равенством

$$\bar{u}^x \equiv \sum_i u_i^x \hat{f}_i, \quad (7.10.40)$$

то соотношение (7.10.39) можно представить также в виде

$$\sum_x m_x \bar{u}^x \times \bar{y}^x = \vec{0}. \quad (7.10.41)$$

То же самое соотношение может быть представлено и еще в одном полезном виде. Определим матрицу $G = (G_{ij})$ согласно

$$G_{ij} \equiv \bar{F}_i \cdot \hat{f}_j = \text{вращательный инвариант}; \quad (7.10.42)$$

тогда соотношение (7.10.39) (или (7.10.41)) эквивалентно соотношению

$$G = \bar{G}; \quad (7.10.43)$$

т.е. матрица $\bar{G}$ симметрическая. Можно также проверить, что

$$G^2 = F. \quad (7.10.44)$$

Таким образом, мы находим также следующее соотношение между векторами системы отсчета, связанной с телом, и обобщенными экартовыми векторами:

$$\hat{f}_i = \sum_j (G^{-1})_{ij} \bar{F}_j. \quad (7.10.45)$$

(Это соотношение выражает связь между двумя наборами векторов, и его не следует считать определением $\hat{f}_i$, поскольку сами G_{ij} зависят от $\hat{f}_i$.)

Соотношения (7.10.42) и (7.10.45) ясно показывают различие между системой мгновенных главных осей и экартовой молекулярной системой отсчета.

► Система главных осей:

$$G_{ij} = \delta_{ij} \lambda_i, \quad (7.10.46)$$

$$\bar{F}_i = \lambda_i \hat{f}_i. \quad (7.10.47)$$

С точностью до мультипликативного вращательного инварианта экартовы векторы $\bar{F}_1, \bar{F}_2, \bar{F}_3$, задаваемые согласно (7.10.34) и (7.10.36), определяют систему главных осей.

► Экартова молекулярная система отсчета:

$$G_{ij} = G_{ji} \neq 0, \quad i \neq j. \quad (7.10.48)$$

В этом случае равенство (7.10. 41) выражает нетривиальную связь между векторами $\{\bar{\mathbf{u}}^\alpha\}$ (постоянные компоненты a_i^α относительно экартовой системы отсчета) и мгновенными векторами положения $\{\bar{\mathbf{y}}^\alpha\}$. (Это то самое соотношение, которое обеспечило физическую основу для введения экартовой системы отсчета; см. замечание «б» в разд. д.)

3. *Внутренние координаты.* Ключевым результатом для определения понятия внутренней координаты является теорема, принадлежащая Вейлю [25]:

Каждый четный вращательный инвариант, зависящий от N векторов $\bar{\mathbf{y}}^1, \bar{\mathbf{y}}^2, \dots, \bar{\mathbf{y}}^N$ в трехмерном пространстве, может быть выражен посредством N^2 скалярных произведений $\bar{\mathbf{y}}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{y}}^\beta$. Каждый нечетный инвариант является суммой выражений

$$[\bar{\mathbf{z}}^1 \cdot (\bar{\mathbf{z}}^2 \times \bar{\mathbf{z}}^3)] f(\bar{\mathbf{y}}^1, \dots, \bar{\mathbf{y}}^N), \quad (7.10.49)$$

где $\bar{\mathbf{z}}^1, \bar{\mathbf{z}}^2, \bar{\mathbf{z}}^3$ выбираются из $\bar{\mathbf{y}}^1, \dots, \bar{\mathbf{y}}^N$, а y — четный инвариант.

В последующем обсуждении нам потребуются только четные инварианты. Поскольку мы можем написать

$$\bar{\mathbf{y}}^\alpha \cdot \bar{\mathbf{y}}^\beta = \sum_i (\bar{\mathbf{y}}^\alpha \cdot \hat{\mathbf{f}}_i)(\bar{\mathbf{y}}^\beta \cdot \hat{\mathbf{f}}_i), \quad (7.10.50)$$

где $(\hat{\mathbf{f}}_1, \hat{\mathbf{f}}_2, \hat{\mathbf{f}}_3)$ определяет связанную с телом систему отсчета, из теоремы Вейля следует, что *каждый четный инвариант может быть выражен при помощи $3N$ скалярных произведений $y_i^\alpha = \bar{\mathbf{y}}^\alpha \cdot \hat{\mathbf{f}}_i$, $\alpha = 1, 2, \dots, N$; $i = 1, 2, 3$.*

Дадим теперь определение внутренних координат¹⁾: совокупность координат $\{q_\mu; \mu = 1, 2, \dots, 3N - 6\}$ образует *набор внутренних координат* для связанной с телом системы отсчета $(\hat{\mathbf{f}}_1, \hat{\mathbf{f}}_2, \hat{\mathbf{f}}_3)$, если выполняются следующие условия.

1. Каждая координата q_μ является четным инвариантом и, следовательно, по теореме Вейля выражается в виде

$$q_\mu = h_\mu(y_1^1, y_2^1, y_3^1, \dots, y_1^N, y_2^N, y_3^N). \quad (7.10.51)$$

где каждый базовый инвариант y_i^α в свою очередь выражается через набор $\{q_\mu\}$, т.е. преобразование обратимо в некоторой подходящей области:

$$y_i^\alpha = g_i^\alpha(q_1, \dots, q_{3N-6}). \quad (7.10.52)$$

2. Удовлетворяются условия центра масс:

$$\sum_\alpha m_\alpha y_i^\alpha = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (7.10.53)$$

3. Удовлетворяются три условия на $\{y_i^\alpha = \bar{\mathbf{y}}^\alpha \cdot \hat{\mathbf{f}}_i\}$, налагаемые определением системы отсчета, жестко связанной с телом. Эти три условия для двух рассматриваемых случаев таковы:

$$\text{система главных осей: } G_{ij} = 0, i \neq j, \quad (7.10.54)$$

экартова система: G симметрическая.

Внутренние координаты для экартовой системы и системы главных осей могут быть введены в явном виде вследствие простоты условий для координат

¹⁾ В этом общем обсуждении мы не рассматриваем линейные или плоские молекулы.

$y_i^\alpha = \bar{y}^\alpha \cdot \hat{f}_i$. Таким образом, мы ищем $3N - 6$ внутренних координат $\{q_\mu\}$, которые удовлетворяют определяющим соотношениям (7.10.51) — (7.10.54).

и. *Внутренние координаты для эккартовой системы отсчета.* Наиболее важное свойство внутренних координат для эккартовой молекулярной системы отсчета состоит в том, что они являются линейными комбинациями компонент $\{\rho_i^\alpha \equiv \bar{\rho}^\alpha \cdot \hat{f}_i\}$ векторов смещений с числовыми коэффициентами (следовательно, они выражаются линейно по ρ_i^α):

$$q_\mu = \sum_{i1} q_{i1}^\mu \rho_i^\alpha, \quad \mu = 1, 2, \dots, 3N - 6. \quad (7.10.55)$$

$$\text{где} \quad \rho_i^\alpha = y_i^\alpha - a_i^\alpha = (\bar{y}^\alpha - \bar{a}^\alpha) \cdot \hat{f}_i, \quad (7.10.56)$$

а величины $\{q_{i1}^\mu; \alpha = 1, 2, \dots, N; \mu = 1, 2, \dots, 3N - 6; i = 1, 2, 3\}$ представляют собой вещественные числа.

Доказательство. Чтобы доказать этот результат, удобно переписать условия центра масс (7.10.27) и условия Эккарта (7.10.28) в следующем виде (см. [15, 26]):

$$\sum_\alpha \bar{s}_\lambda^\alpha \cdot \bar{\rho}^\alpha = 0, \quad \lambda = 1, 2, \dots, 6, \quad (7.10.57)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{s}_i^\alpha &\equiv m_\alpha \hat{f}_i / m^\frac{1}{2}, & m &= \sum_\alpha m_\alpha, \\ \bar{s}_{i+3}^\alpha &= m_\alpha N_i^{-\frac{1}{2}} (\hat{f}_i \times \bar{u}^\alpha), \\ N_i &= \sum_\alpha m_\alpha (\hat{f}_i \times \bar{u}^\alpha) \cdot (\hat{f}_i \times \bar{u}^\alpha). \end{aligned} \quad (7.10.58)$$

Мы нормировали векторы $\bar{s}_\lambda^\alpha$ в том смысле, что

$$\sum_\alpha m_\alpha^{-1} \bar{s}_\lambda^\alpha \cdot \bar{s}_\lambda^\alpha = 1. \quad (7.10.59)$$

Заметим также, что эти векторы перпендикулярны, т.е. они удовлетворяют условию

$$\sum_\alpha m_\alpha^{-1} \bar{s}_\lambda^\alpha \cdot \bar{s}_{\lambda'}^\alpha = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (7.10.60)$$

Эти равенства устанавливают ортогональность следующих шести векторов-строк в $3N$ -мерном пространстве:

$$\bar{S}_\lambda \equiv \left(\frac{1}{\sqrt{m_1}} \bar{s}_\lambda^1, \frac{1}{\sqrt{m_2}} \bar{s}_\lambda^2, \dots, \frac{1}{\sqrt{m_N}} \bar{s}_\lambda^N \right), \quad \lambda = 1, 2, \dots, 6. \quad (7.10.61)$$

Если считать, что $\bar{S}_1, \dots, \bar{S}_6$ есть первые шесть строк ортогональной матрицы $3N \times 3N$, то можно найти (бесконечно многими способами для $N > 3$) $3N - 6$ дополнительных строк, которые дают ортогональную матрицу $3N \times 3N$. Обозначим совокупность таких дополнительных строк при помощи

$$\bar{Q}_\mu = \left(\frac{1}{\sqrt{m_1}} \bar{q}_\mu^1, \frac{1}{\sqrt{m_2}} \bar{q}_\mu^2, \dots, \frac{1}{\sqrt{m_N}} \bar{q}_\mu^N \right), \quad (7.10.62)$$

где

$$\bar{q}_\mu^\alpha \equiv \sum_i q_{i1}^\mu \hat{f}_i, \quad \mu = 1, 2, \dots, 3N - 6. \quad (7.10.63)$$

Условия ортогональности величин $\bar{Q}_\mu$ первым шести строкам, задаваемым явно соотношениями (7.10.58) и (7.10.61), и ортонормированности между собой принимают вид

$$\begin{aligned}\sum_x \bar{q}_\mu^x &= \bar{0}, \\ \sum_x (\bar{u}^x \times \bar{q}_\mu^x) &= \bar{0}, \\ \sum_x m_x^{-1} (\bar{q}_\mu^x \cdot \bar{q}_\nu^x) &= \delta_{\mu\nu}\end{aligned}\quad (7.10.64)$$

для $\mu, \nu = 1, 2, \dots, 3N - 6$.

Для определенности предположим, что конкретный набор векторов $\{\bar{q}_\mu^x\}$, удовлетворяющих этим соотношениям (7.10.64), уже построен.

Тогда мы вводим $3N - 6$ инвариантов вращений-инверсий, определяемых согласно

$$q_\mu \equiv \sum_x \bar{q}_\mu^x \cdot \bar{\rho}^x, \quad \mu = 1, 2, \dots, 3N - 6. \quad (7.10.65)$$

Используя ортогональность матрицы со строками $\bar{S}_1, \dots, \bar{S}_6, \bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_{3N-6}$, последнее соотношение можно обратить, что дает

$$\rho_i^x = m_x^{-1} \sum_\mu q_\mu^x q_\mu. \quad (7.10.66)$$

Это равенство определяет совокупность компонент смещений $\{\rho_i^x\}$ через $3N - 6$ инвариантов вращений-инверсий $q_1, q_2, \dots, q_{3N-6}$, таких, что ограничения (7.10.53) и (7.10.54) выполняются. ■

Главный результат, получаемый из приведенного анализа, следующий: на инварианты вращений-инверсий, определяемые в виде

$$q_\mu = \sum_x \bar{q}_\mu^x \cdot \bar{\rho}^x, \quad \mu = 1, 2, \dots, 3N - 6 \quad (7.10.67)$$

натягивается $(3N - 6)$ -мерное пространство внутренних координат. (Мы используем здесь термин «натягивается» в том смысле, что каждая внутренняя координата вида $\xi = \sum_\alpha \bar{\xi}^\alpha \cdot \bar{\rho}^\alpha$, $\bar{\xi}^\alpha = \xi_1^\alpha \hat{f}_1 + \xi_2^\alpha \hat{f}_2 + \xi_3^\alpha \hat{f}_3$, имеет форму $\xi = \sum_\mu \xi_\mu q_\mu$. Кроме того, из равенства $\sum_\mu a_\mu q_\mu = \sum_\mu b_\mu q_\mu$ следует $a_\mu = b_\mu$.)

Представляет интерес определить, насколько инварианты $G_{ij} = \bar{F}_i \cdot \bar{f}_j$ (см. (7.10.42)) подходят в схеме внутренних координат. Мы можем написать

$$\bar{F}_i \cdot \bar{f}_j = \lambda_i^0 \delta_{ij} + \sum_x \bar{\xi}_{ij}^x \cdot \bar{\rho}^x, \quad (7.10.68)$$

где $\lambda_i^0 (i = 1, 2, 3)$ — главные моменты инерции для равновесной конфигурации, и

$$\bar{\xi}_{ij}^x \equiv m_x a_i^x \hat{f}_j, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (7.10.69)$$

Тогда находим, что три инварианта

$$\sum_x (\bar{\xi}_{ij}^x - \bar{\xi}_{ji}^x) \cdot \bar{\rho}^x = 0, \quad i < j = 1, 2, 3, \quad (7.10.70)$$

выражают условия Эккарта; три инварианта

$$\xi_i = \sum_x \bar{\xi}_{ii}^x \cdot \bar{\rho}^x, \quad i = 1, 2, 3, \quad (7.10.71)$$

всегда перпендикулярны внутренним координатам; а инвариант ($i < j$)

$$\xi_{ij} = \sum_{\alpha} (\bar{\xi}_{ij}^{\alpha} + \bar{\xi}_{ji}^{\alpha}) \cdot \bar{\rho}^{\alpha} \quad (7.10.72)$$

представляет собой внутреннюю координату в том и только том случае, если $\lambda_i^0 = \lambda_j^0$. (Один из инвариантов ξ_{12} , ξ_{13} , ξ_{23} является внутренней координатой для молекул типа симметричного волчка; все три являются внутренними координатами для молекул типа сферического волчка.)

Тот факт, что мы всегда получаем три или более внутренних координат из самих эккартовых векторов, сильно упрощает явное построение внутренних координат для конкретных молекул (примеры см. в работе [16]).

Подытожим эти результаты, приведя преобразование от $3N$ декартовых координат $\{x_i^{\alpha} = \bar{x}^{\alpha} \cdot \bar{f}_i\}$ к $3N$ координатам, которые состоят из 1) трех координат центра масс $R_i = R \cdot \bar{f}_i$ ($i = 1, 2, 3$), 2) трех независимых параметров матрицы косинусов углов C с $C_{ij} = \bar{f}_i \cdot \bar{f}_j$, 3) $3N - 6$ внутренних координат q_{μ} ($\mu = 1, 2, \dots, 3N - 6$):

$$x_i^{\alpha} = R_i + \sum_j C_{ij}(a_j^{\alpha} + \rho_j^{\alpha}) \quad (7.10.73)$$

где

$$\rho_j^{\alpha} = m_x^{-1} \sum_{\mu} q_{\mu}^{\alpha} q_{\mu}. \quad (7.10.74)$$

Это преобразование обратимо для тех значений $\{x_i^{\alpha}\}$, для которых существует конструкция эккартовой системы отсчета ($\det F \neq 0$):

$$\begin{aligned} m\bar{R} &= \sum_{\alpha} m_{\alpha} \bar{x}^{\alpha}, \\ \hat{f}_i &= \sum_j (F^{-1})_{ij} \bar{F}_j, & C_{ij} &= \bar{f}_i \cdot \bar{f}_j, \\ q_{\mu} &= \sum_{\alpha} \bar{q}_{\mu}^{\alpha} \cdot \bar{\rho}^{\alpha}. \end{aligned} \quad (7.10.75)$$

Как мы видели, имеется значительная свобода (неединственность) в построении внутренних координат $\{q_{\mu}; \mu = 1, 2, \dots, 3N - 6\}$, приведенном выше. Для большей наглядности выразим конструкцию в матричной форме.

Если ввести ρ и Q для обозначения векторов-столбцов

$$\rho = \text{col}(\rho_1^1, \rho_2^1, \rho_3^1; \dots; \rho_1^N, \rho_2^N, \rho_3^N),$$

$$Q = \text{col}(0, \dots, 0, q_1, q_2, \dots, q_{3N-6}), \quad (7.10.76)$$

то преобразование от координат смещений по отношению к связанной с телом системе отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ к внутренним координатам q_{μ} выражается при помощи ортогонального преобразования

$$Q = S\rho, \quad \bar{S}S = I_{3N} \quad (\text{единичная матрица } 3N \times 3N), \quad (7.10.77)$$

где S , конечно, не единственна. Записывая

$$q = \text{col}(q_1, q_2, \dots, q_{3N-6}), \quad (7.10.78)$$

мы видим, что произвольное ортогональное преобразование A :

$$\mathbf{q} \rightarrow A\mathbf{q} = \mathbf{q}', \quad (7.10.79)$$

дает новое преобразование к внутренним координатам, которые удовлетворяют всем ограничениям. Новое преобразование к внутренним координатам имеет вид

$$\mathbf{Q}' = S'\mathbf{p},$$

$$\mathbf{Q}' = \text{col}(0, \dots, 0, q'_1, q'_2, \dots, q'_{3N-6}),$$

$$S' = \begin{pmatrix} I_6 & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix} S, \quad (7.10.80)$$

где I_6 обозначает единичную матрицу 6×6 .

Особенно важно то, что новые векторы положения $\{\bar{x}'^\alpha\}$, соответствующие новым внутренним координатам $\mathbf{q} \rightarrow A\mathbf{q} = \mathbf{q}'$, определяют ту же самую эккартову систему отсчета $\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3$, что и старые векторы положения $\{\bar{x}^\alpha\}$, соответствующие внутренним координатам $\mathbf{q}$. Эта свобода означает, что группа $SO(3N-6)$ вещественных ортогональных матриц размерности $3N-6$ является группой внутренних преобразований и оставляет эккартову систему отсчета инвариантной¹⁾. Такой результат допускает возможность иметь группы внутренних преобразований (подгруппы группы $SO(3N-6)$), которые оставляют инвариантной не только систему отсчета, но и гамильтониан.

Представляется важным тот факт, что (как упоминалось выше) внутренние координаты q_μ определяются в эккартовой молекулярной модели лишь с точностью до произвольных ортогональных преобразований. Эта дополнительная свобода придает модели степень общности, выходящую за пределы конкретизации параметров $\{a_i^\alpha\}$. Чтобы дать более детальное определение матрицы A в соотношении (7.10.79), необходимо включить в модель дополнительные физические соображения. Например, довольно часто принимают, что потенциальную энергию можно аппроксимировать при помощи положительно определенной квадратичной формы [15]

$$V = \sum_{\mu\nu} u_{\mu\nu} q_\mu q_\nu, \quad (7.10.81)$$

в которой q_μ — конкретизированные инварианты вращений-инверсий требуемой формы

$$q_\mu = \sum_x \tilde{q}_\mu^x \cdot \tilde{p}^x. \quad (7.10.82)$$

Тогда матрица A определяется (лишь частично, если имеются вырожденные собственные значения) требованием, что $\mathbf{q}' = A\mathbf{q}$ диагонализуют V .

к. Внутренние координаты для системы главных осей. Основными соотношениями для обсуждения внутренних координат для системы главных осей являются соотношение центра масс и соотношение эккартовых векторов (7.10.47):

¹⁾ В действительности этот результат справедлив для общей линейной группы.

$$\sum_x m_x \ddot{y}^x = \vec{0}, \quad (7.10.83)$$

$$\sum_x m_x y_i^x \ddot{y}^x = \lambda_i \hat{f}_i. \quad (7.10.84)$$

Заметим, что второе соотношение дает инварианты (умножим равенство скалярно на $\hat{f}_i$)

$$\lambda_i = \sum_x m_x y_i^x y_i^x, \quad i = 1, 2, 3, \quad (7.10.85)$$

а также ограничения (умножим равенство скалярно на $\hat{f}_j$ ($j \neq i$)) на компоненты $\{y_i^x\}$, налагаемые определением системы отсчета:

$$\sum_x m_x y_i^x y_j^x = 0, \quad i \neq j. \quad (7.10.86)$$

Векторная форма равенств (7.10.83) и (7.10.84) показывает, что следует рассмотреть другие линейные комбинации векторов положения $\{\vec{y}_i^x\}$:

$$\vec{z} = \sum_x \zeta^x \ddot{y}^x. \quad (7.10.87)$$

С каждой такой линейной комбинацией мы можем ассоциировать вектор ζ в N -пространстве:

$$\zeta = (\zeta^1, \zeta^2, \dots, \zeta^N), \quad (7.10.88)$$

и, наоборот, каждый такой вектор в N -пространстве определяет линейную комбинацию векторов положений.

Поскольку массы входят линейно в каждое из равенств (7.10.83) и (7.10.84), удобно определить (как в (7.10.59)) скалярное произведение двух векторов ζ и η в N -пространстве согласно

$$\zeta \cdot \eta = \sum_x m_x^{-1} \zeta^x \eta^x. \quad (7.10.89)$$

Например, нормированные векторы в N -пространстве, ассоциированные с соотношениями (7.10.83) и (7.10.84), задаются в виде

$$\zeta_4 = (m_1, m_2, \dots, m_N) / \sqrt{m}, \quad (7.10.90)$$

$$\zeta_i = (m_1 y_i^1, m_2 y_i^2, \dots, m_N y_i^N) / \sqrt{\lambda_i}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (7.10.91)$$

Заметим, что эти векторы уже ортогональны:

$$\zeta_\kappa \cdot \zeta_{\kappa'} = \delta_{\kappa\kappa'}, \quad \kappa, \kappa' = 1, 2, 3, 4. \quad (7.10.92)$$

В терминах нормированных векторов (7.10.91) и (7.10.90) соотношение центра масс (7.10.83) и соотношение экартовых векторов (7.10.84) принимают вид

$$\vec{z}_i \equiv \sum_x \zeta_i^x \ddot{y}^x = \sqrt{\lambda_i} \hat{f}_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (7.10.93)$$

$$\vec{z}_4 \equiv \sum_x \zeta_4^x \ddot{y}^x = \vec{0}. \quad (7.10.94)$$

Теперь можно сформулировать основной результат для задачи внутренних координат для системы главных осей, используя приведенные выше обозначения: пусть набор векторов $\{\zeta_\kappa \cdot \kappa = 4, \dots, N\}$ вместе с тремя векторами ζ_i ($i = 1, 2, 3$), заданными согласно (7.10.91), образует совокупность ортонормированных векторов N -пространства $\zeta_\kappa \cdot \zeta_{\kappa'} = \delta_{\kappa\kappa'}$ ($\kappa, \kappa' = 1, 2, \dots, N$). Тогда

$$\sum_x \zeta_i^x \bar{y}^x = \sqrt{\lambda_i} \hat{J}_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$\sum_x \zeta_\kappa^x \bar{y}^x = \vec{0}, \quad \kappa = 4, \dots, N. \quad (7.10.95)$$

Доказательство. Доказательство этой теоремы основывается на результатах, приведенных в работе [10]. Из теоремы Вейля (разд. 3) следует, что базовые инварианты $\{\bar{y}^\alpha \cdot \bar{y}^\beta\}$ являются теми существенными инвариантами, которые следует учитывать в формулировке задачи внутренних координат. Это наблюдение показывает, что необходимо ввести симметрическую матрицу

$$S = (S^{\alpha\beta}), \quad (7.10.96)$$

где

$$S^{\alpha\beta} = \sqrt{m_\alpha m_\beta} \bar{y}^\alpha \cdot \bar{y}^\beta, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \dots, N. \quad (7.10.97)$$

Множитель, содержащий массы, включен в определение $S^{\alpha\beta}$, так что между следами матрицы 3×3 квадруполь масс Q (см. (7.10.14)) и $N \times N$ -матрицы квадруполь масс S выполняются следующие тождества:

$$\text{tr } Q^k = \text{tr } S^k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (7.10.98)$$

Из тождеств (7.10.98) и того факта, что S — симметрическая (следовательно, нормальная ¹⁾) матрица, вытекает, что уравнение Кейли — Гамильтона для S имеет вид

$$S(S - \lambda_1 I_N)(S - \lambda_2 I_N)(S - \lambda_3 I_N) = 0, \quad (7.10.99)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ — собственные значения как матрицы S , так и матрицы Q . Из этого факта в свою очередь следует, что собственными значениями матрицы S являются $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ и 0 ($N - 3$ раз). Кроме того, поскольку матрица S симметрическая, она диагонализируема при помощи вещественной ортогональной матрицы. Таким образом, матрица S обладает совокупностью ортонормированных собственных векторов $\{\xi_\kappa; \kappa = 1, 2, \dots, N\}$, таких, что

$$S\xi_i = \lambda_i \xi_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$S\xi_\kappa = 0, \quad \kappa = 4, \dots, N, \quad (7.10.100)$$

где ортогональность векторов выражается в обычном скалярном произведении:

$$(\xi_\kappa, \xi_{\kappa'}) \equiv \sum_x \xi_\kappa^x \xi_{\kappa'}^x = \delta_{\kappa\kappa'}. \quad (7.10.101)$$

Собственные векторы ξ_1, ξ_2, ξ_3 уже даны соотношением для эккартовых векторов (7.10.84). Умножив (7.10.84) скалярно на $\bar{y}^\beta$, получаем уравнение на собственные значения (7.10.100), в котором $\xi_i^\alpha = \xi_i^{\alpha}/\sqrt{m_\alpha}$. (Кроме того, на столбцы матрицы $A \equiv \Pi_{i=1}^3 (S - \lambda_i I_N)$ натягивается пространство собственных векторов S , соответствующих собственному значению 0, но этот результат нам не потребуется.)

Рассмотрим теперь вектор $\bar{z}$, определяемый в виде

$$\bar{z} = \sum_x \sqrt{m_x} \xi^x \bar{y}^x.$$

¹⁾ Свойства нормальных матриц, используемые в этом доказательстве, хорошо известны и могут быть найдены, например, в работе [27].

где $\xi = \sum_{k=4}^N a_k \xi_k$ — произвольный (вещественный) вектор в нуль-пространстве матрицы S . Находим

$$\bar{z} \cdot \bar{y}^\beta = 0, \quad \beta = 1, 2, \dots, N$$

вследствие равенств (7.10.100). Поскольку последнее равенство должно выполняться для произвольных векторов положения $\{\bar{y}^\beta\}$, мы должны иметь $\bar{z} = 0$. Учитывая теперь небольшое различие в определениях скалярных произведений (7.10.89) и (7.10.101), получаем доказательство сформулированной теоремы. ■

Рассмотрим теперь обращение равенств (7.10.95). Поскольку $\zeta = (\zeta_i^\alpha)$ — ортогональная матрица (скалярное произведение строк дается формулой (7.10.89)), она является ортогональной также и по своим столбцам:

$$\sum_k \zeta_k^\alpha \zeta_k^\beta = m_x \delta^{\alpha\beta}. \quad (7.10.102)$$

Используя этот факт в соотношении (7.10.95), получаем

$$\bar{y}^\alpha = m_x^{-1} \sum_i \mu_i \zeta_i^\alpha \hat{f}_i, \quad (7.10.103)$$

где

$$\mu_i \equiv \sqrt{\lambda_i}. \quad (7.10.104)$$

В этой обращенной формуле три вектора N -пространства $\zeta_i (i = 1, 2, 3)$ следует интерпретировать как произвольную общую триаду $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$ ортонормированных векторов, таких, что компоненты каждого вектора удовлетворяют равенству $\sum_\alpha \zeta_i^\alpha = 0$ ($i = 1, 2, 3$) (условие центра масс). Общую тройку, удовлетворяющую этим условиям, можно параметризовать явно при помощи $3N - 9$ угловых параметров $\theta_\tau (\tau \equiv 1, 2, \dots, 3N - 9)$, т.е.

$$\zeta_i^\alpha = g_i^\alpha(\theta_1, \dots, \theta_{3N-9}), \quad (7.10.105)$$

но этот результат в подробном виде нам не потребуется.

Подытожим теперь результаты для преобразования от $3N$ декартовых координат $\{x_i^\alpha = \bar{x}^\alpha \cdot \hat{f}_i\}$ к $3N$ координатам, состоящим из 1) трех координат центра масс $R_i (i = 1, 2, 3)$; 2) трех независимых параметров матрицы косинусов углов C и 3) $3N - 6$ внутренних координат, куда входят $\mu_i = \sqrt{\lambda_i} (i = 1, 2, 3)$ и $3N - 9$ внутренних координат, подразумеваемых в триаде $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$. Из соотношений $\bar{x}^\alpha = \bar{y}^\alpha + \bar{R}$ и (7.10.103) получаем

$$x_i^\alpha = R_i + m_x^{-1} \sum_j C_{ij} \mu_j \zeta_j^\alpha. \quad (7.10.106)$$

Обращение последнего соотношения имеет вид

$$\begin{aligned} m \bar{R} &= \sum_x m_x \bar{x}^\alpha, \\ \hat{f}_i &= \sum_j C_{ji} \hat{l}_j, \quad \bar{C} Q C = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3), \\ \sqrt{\lambda_i} &= \left\{ \sum_x m_x [(\bar{x}^\alpha - \bar{R}) \cdot \hat{f}_i]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \\ \zeta_i^\alpha &= m_x \mu_i^{-1} [(\bar{x}^\alpha - \bar{R}) \cdot \hat{f}_i]. \end{aligned} \quad (7.10.107)$$

Замечание. С точностью до свободы выбора параметров для описания триады ортонормированных векторов N -пространства (ξ_1, ξ_2, ξ_3) ($\sum \alpha_i^\alpha = 0$) внутренние координаты для системы главных осей определяются однозначно, если выбрать также $\mu_i = \sqrt{\lambda_i}$ ($i = 1, 2, 3$) в качестве трех из внутренних координат.

л. Операторы линейного импульса. Чтобы получить гамильтониан для совокупности N взаимодействующих частиц, в котором движения рассматриваются относительно системы отсчета, жестко связанной с телом, мы следуем Борну и Оппенгеймеру [1] и преобразуем непосредственно оператор кинетической энергии

$$T = - \sum_{\alpha i} (2m_\alpha)^{-1} (\hat{\partial} / \partial x_i^\alpha)^2. \quad (7.10.108)$$

С этой целью мы преобразуем сначала линейный импульс $p_i^\alpha = -i (\partial / \partial x_i^\alpha)$ к координатам $\{R_j\}$, $\{C_{jk}\}$, $\{y_j^\alpha = y^{\alpha\beta} \cdot f_j\}$:

$$x_i^\alpha = R_i + \sum_j C_{ij} y_j^\alpha. \quad (7.10.109)$$

Таким образом, имеем

$$\frac{\partial}{\partial x_i^\alpha} = \sum_j \left(\frac{\partial R_j}{\partial x_i^\alpha} \right) \frac{\partial}{\partial R_j} + \sum_{jk} \left(\frac{\partial C_{jk}}{\partial x_i^\alpha} \right) \frac{\partial}{\partial C_{jk}} + \sum_{\beta j} \left(\frac{\partial y_j^\beta}{\partial x_i^\alpha} \right) \frac{\partial}{\partial y_j^\beta}. \quad (7.10.110)$$

Преобразование от $\{y_j^\alpha\}$ к внутренним координатам будет осуществлено впоследствии.

Производные, которые появляются в (7.10.110), легко вычисляются, если воспользоваться соотношением

$$\frac{\partial \hat{f}_k}{\partial x_i^\alpha} = \hat{f}_k \times \bar{\Omega}_i^\alpha. \quad (7.10.111)$$

(Общий вид этой производной следует из $\hat{f}_i \cdot \hat{f}_j = \delta_{ij}$. Явный вид выводится в приложении А и приводится ниже для экартовой системы отсчета и для системы главных осей.) Таким образом, находим следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_j}{\partial x_i^\alpha} &= \delta_{ij} (m_\alpha / m), \\ \frac{\partial C_{jk}}{\partial x_i^\alpha} &= \hat{l}_j \cdot \frac{\partial \hat{f}_k}{\partial x_i^\alpha} = \hat{l}_j \cdot (\hat{f}_k \times \bar{\Omega}_i^\alpha) = \bar{\Omega}_i^\alpha \cdot (\hat{l}_j \times \hat{f}_k), \\ \frac{\partial y_j^\beta}{\partial x_i^\alpha} &= \bar{\Omega}_i^\alpha \cdot (y^{\beta\gamma} \hat{f}_j) + \delta_{\alpha\beta} C_{ij} - (m_\alpha / m) C_{ij}. \end{aligned} \quad (7.10.112)$$

Подстановка этих производных в соотношение (7.10.110) дает следующие выражения для различных слагаемых.

Первое слагаемое:

$$-i \sum_j \left(\frac{\partial R_j}{\partial x_i^\alpha} \right) \frac{\partial}{\partial R_j} = -i \frac{m_\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial R_j}. \quad (7.10.113)$$

Второе слагаемое:

$$-i \sum_{jk} \left(\frac{\partial C_{jk}}{\partial x_i^2} \right) \frac{\partial}{\partial C_{jk}} = \bar{\Omega}_i^\alpha \cdot \bar{K}, \quad (7.10.114)$$

где $\bar{K} = (\det C) \sum_i K_i \hat{f}_i$. Компоненты (K_1, K_2, K_3) определяются здесь в терминах компонент $\hat{f}_i \cdot \bar{J}$ полного углового момента $\bar{J} = \sum_i J_i^I$, отнесенного к системе отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$, согласно¹⁾

$$\begin{aligned} -K_i &= (\det C)(\hat{f}_i \cdot \bar{J}) = (\det C)(\bar{J} \cdot \hat{f}_i) \\ &= (\det C) \sum_l C_{li} J_l = (\det C) \sum_l J_l C_{li} \\ &= -i \sum_l \left(C_{lj} \frac{\partial}{\partial C_{lk}} - C_{lk} \frac{\partial}{\partial C_{lj}} \right), \end{aligned} \quad (7.10.115)$$

где i, j, k циклически по 1, 2, 3 (см. примечание на стр. 495).

Третье слагаемое:

$$-i \sum_{\beta j} \left(\frac{\partial y_j^\beta}{\partial x_i^2} \right) \frac{\partial}{\partial y_j^\beta} = \hat{l}_i \cdot \left\{ \bar{\pi}^\alpha - (m_x/m) \sum_\beta \bar{\pi}^\beta \right\} + \bar{\Omega}_i^\alpha \cdot \sum_\beta (y_j^\beta \times \bar{\pi}^\beta), \quad (7.10.116)$$

где $\bar{\pi}^\alpha$ определяется согласно

$$\bar{\pi}^\alpha = -i \sum_i \hat{f}_i \frac{\partial}{\partial y_i^\alpha}. \quad (7.10.117)$$

Воспользовавшись результатами (7.10.111) — (7.10.117), получаем из соотношения (7.10.110) следующий вид оператора линейного импульса $-i\partial/\partial x_i^\alpha$:

$$-i \frac{\partial}{\partial x_i^\alpha} = -i \frac{m_x}{m} \frac{\partial}{\partial R_i} + \hat{l}_i \cdot \left[\bar{\pi}^\alpha - (m_x/m) \sum_\beta \bar{\pi}^\beta \right] + \bar{\Omega}_i^\alpha \cdot (\bar{K} + \bar{P}), \quad (7.10.118)$$

где вектор $\bar{P}$ мы определили согласно

$$\begin{aligned} \bar{P} &= \sum_x (\vec{y}^x \times \bar{\pi}^x) = (\det C) \sum_i P_i \hat{f}_i, \\ P_i &= -i \sum_x \left(y_j^x \frac{\partial}{\partial y_k^x} - y_k^x \frac{\partial}{\partial y_j^x} \right), \quad i, j, k \text{ циклически.} \end{aligned} \quad (7.10.119)$$

¹⁾ Коммутационные соотношения для трех операторов $\hat{f}_i \cdot \bar{J}$ ($i = 1, 2, 3$) имеют вид $[(\hat{f}_i \cdot \bar{J}), (\hat{f}_j \cdot \bar{J})] = -ie_{ijk}(\det C)(\hat{f}_k \cdot \bar{J})$. Таким образом, включение множителя $-(\det C)$ в определение K_i существенно для получения канонических коммутационных соотношений $[K_i, K_j] = ie_{ijk}K_k$, так что операторы K_i инвариантны относительно инверсии положений всех частиц, т.е. $K_i \rightarrow K_i$ при $\vec{x}^\alpha \rightarrow -\vec{x}^\alpha$. Таким образом, операторы (K_1, K_2, K_3) во всех отношениях ведут себя подобно компонентам углового момента. Эти операторы ведут себя правильным образом также и относительно обращения времени, т.е. $K_i \rightarrow -K_i$ при $\vec{x}^\alpha \rightarrow \vec{x}^\alpha$ и $\vec{p}^\alpha \rightarrow -\vec{p}^\alpha$. Для правосторонней системы отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ связь (J_1, J_2, J_3) и $(K_1, K_2, K_3) = (-\mathcal{P}_1, -\mathcal{P}_2, -\mathcal{P}_3)$ с матрицами вращения, рассматриваемыми как векторы состояния, детально рассмотрена в разд. 7 и 8 гл. 3.

Ниже мы увидим (соотношения (7.10.121) и (7.10.134)), что операторы Π_i зависят только от внутренних координат, а поскольку $\Pi = (\Pi_1, \Pi_2, \Pi_3)$ имеет формальный вид углового момента, его часто называют *внутренним угловым моментом* системы частиц. Но из выражения (7.10.119) не следует делать вывод, что операторы (Π_1, Π_2, Π_3) должны удовлетворять коммутационным соотношениям углового момента, поскольку координаты $\{y_i^\alpha\}$ не являются независимыми, и справедливость коммутационных соотношений зависит от ограничений на координаты. (Это обсуждается ниже в замечании.)

При выводе соотношения (7.10.118) не использовалась зависимость $\{y_i^\alpha\}$ от внутренних координат; поэтому это соотношение справедливо для произвольной системы отсчета, жестко связанной с телом. В случаях экартовой системы отсчета и системы главных осей слагаемые в выражении для линейного импульса принимают специальный вид, что мы теперь и резюмируем.

► Экартова система отсчета:

$$\vec{\pi}^x = -i \sum_{\mu} \vec{q}_{\mu}^x \frac{\hat{c}}{\hat{c} q_{\mu}}, \quad (7.10.120)$$

$$\sum_x \vec{\pi}^x = \vec{0};$$

$$\vec{\Pi} = -i \sum_{\mu\nu} \vec{\zeta}_{\mu\nu} q_{\mu} \frac{\hat{c}}{\hat{c} q_{\nu}}, \quad (7.10.121)$$

$$\vec{\zeta}_{\mu\nu} = \sum_x m_x^{-1} (\vec{q}_{\mu}^x \times \vec{q}_{\nu}^x).$$

Векторы $\vec{\Omega}_i^{\alpha}$ в соотношении (7.10.111) имеют вид (см. приложение А)

$$\vec{\Omega}_i^{\alpha} = \sum_j \Omega_{ij}^{\alpha} \hat{f}_j, \quad (7.10.122)$$

где $\Omega^{\alpha} = (\Omega_{ij}^{\alpha})$ — матрица 3×3 , задаваемая в виде

$$\Omega^x = C A^x M. \quad (7.10.123)$$

Матрицы A^{α} и M , входящие в последнее выражение, имеют определения

$$A^x = m_x \begin{pmatrix} 0 & -a_3^x & a_2^x \\ a_3^x & 0 & -a_1^x \\ -a_2^x & a_1^x & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.10.124)$$

$$M = [-G + (\text{tr } G)I_3]^{-1}, \quad (7.10.125)$$

где G — симметрическая матрица (следовательно, и матрица M симметрическая), заданная согласно (7.10.42). В терминах внутренних координат G и M^{-1} задаются следующими выражениями:

$$G = G_0 + \sum_{\mu} B_{\mu} q_{\mu}, \quad (7.10.126)$$

$$(G_0)_{ij} = \sum_x m_x a_i^x a_j^x, \quad (7.10.127)$$

$$(B_\mu)_{ij} = \sum_x a_i^x q_{\mu j}^x; \quad (7.10.128)$$

$$M^{-1} = M_0^{-1} + \sum_\mu A_\mu q_\mu, \quad (7.10.129)$$

$$M_0^{-1} = (\text{tr } G_0) I_3 - G_0 = \sum_x m_x^{-1} \tilde{A}^x A^x, \quad (7.10.130)$$

$$A_\mu = -B_\mu + (\text{tr } B_\mu) I_3. \quad (7.10.131)$$

► Система главных осей:

$$\pi_i^x = \tilde{\pi}^x \cdot \hat{f}_i = -i \zeta_i^x \frac{\partial}{\partial \mu_i} - i \frac{m_x}{\mu_i} \frac{\partial}{\partial \zeta_i^x} + i \frac{\zeta_i^x}{\mu_i} \left(\sum_\beta \zeta_i^\beta \frac{\partial}{\partial \zeta_i^\beta} \right), \quad (7.10.132)$$

$$\sum_x \pi_i^x = -i \mu_i^{-1} \sum_x m_x \frac{\partial}{\partial \zeta_i^x}, \quad (7.10.133)$$

$$\Pi_i = -i \left[\frac{\mu_j}{\mu_k} \left(\sum_x \zeta_j^x \frac{\partial}{\partial \zeta_k^x} \right) - \frac{\mu_k}{\mu_j} \left(\sum_x \zeta_k^x \frac{\partial}{\partial \zeta_j^x} \right) \right], \quad (7.10.134)$$

где i, j, k циклически по 1, 2, 3, и где мы использовали соотношение ортогональности $\zeta_i \cdot \zeta_j = \delta_{ij}$ при получении последнего соотношения. Выражение для $\tilde{\Pi}_i^\alpha$ задается по-прежнему при помощи (7.10.122) и (7.10.123), но теперь A^α и M имеют определения (см. приложение А)

$$A^\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \mu_3 \zeta_3^\alpha & \mu_2 \zeta_2^\alpha \\ \mu_3 \zeta_3^\alpha & 0 & \mu_1 \zeta_1^\alpha \\ \mu_2 \zeta_2^\alpha & \mu_1 \zeta_1^\alpha & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.10.135)$$

$$M = \begin{pmatrix} (\lambda_2 - \lambda_3)^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & (\lambda_3 - \lambda_1)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & (\lambda_1 - \lambda_2)^{-1} \end{pmatrix}. \quad (7.10.136)$$

Замечание. Величину $\tilde{\Pi}$, задаваемую в общем случае выражением (7.10.119), а в терминах внутренних координат явно выражениями (7.10.121) и (7.10.134) для двух случаев, часто называют *внутренним угловым моментом*, ассоциированным с внутренними координатами. Поскольку $\tilde{\Pi}$ есть аксиальный вектор, его компоненты относительно системы отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$ определяются как $\Pi_i = (\det C) \hat{f}_i \cdot \tilde{\Pi}$ (при пространственной инверсии $\Pi_i \rightarrow -\Pi_i$). Компоненты Π_i не являются операторами углового момента, т.е.

$$[\Pi_i, \Pi_j] \neq i \epsilon_{ijk} \Pi_k, \quad (7.10.137)$$

для эккартовой системы отсчета (соотношение (7.10.121)) [38], но удовлетворяют коммутационным соотношениям углового момента для системы главных осей (формула (7.10.134)) [10]. Таким образом, хотя величина $\tilde{\Pi} = \sum_\alpha (\bar{y}^\alpha \times \bar{\pi}^\alpha)$ имеет формальный вид углового момента, коммутационные соотношения для

компонент не выполняются в общем случае для всех жестко связанных с телом систем отсчета.

Воспользовавшись преобразованием операторов линейного импульса (7.10.118), можно теперь также получить преобразование оператора кинетической энергии к координатам $\{R_i\}$, $\{C_{ij}\}$, и внутренним координатам. Такая процедура требует значительного внимания к деталям, но является в принципе простой. О гамильтониане в эккартовой системе отсчета см. [28 — 30]; о гамильтониане в системе главных осей см. [10].

Введение функции потенциальной энергии V , подходящей для исследуемой физической системы, дает теперь гамильтониан (нерелятивистское уравнение Шредингера) в терминах координат, пригодных для описания в системе отсчета, жестко связанной с телом.

Отметив общность подхода к многочастичным системам на основе жестко-связанной с телом системы отсчета, мы теперь ограничимся изучением жестких молекул, используя эккартову систему отсчета.

м. Гамильтониан для полужесткой (жесткой) многоатомной молекулы. В модели для полужесткой молекулы каждая массивная точка (ядро) осуществляет движение, ограниченное окрестностью положения равновесия, которое фиксировано относительно положений равновесия других точечных масс. Числовые постоянные $\{q_\alpha^i\}$ определяют вектор $\vec{u}^\alpha = \sum \rho_{ij}^{\alpha\beta}$, который является вектором положения равновесия частицы α относительно эккартовой системы отсчета.

Физическая интуиция в пользу такой модели основывается на том представлении, что быстрые движения электронов порождают функцию потенциальной энергии V , которая обладает глубоким минимумом в каждой из точек $\sum \rho_{ij}^{\alpha\beta}$.

Приближение Борна — Оппенгеймера [1] дает тогда математическое обоснование для разделения движений электронов и ядер (см. последний обзор математических свойств этого приближения [31]).

Поскольку движения ограничиваются окрестностью положений равновесия ядер, предполагается, что потенциальная энергия может быть разложена в ряд Тейлора в окрестности этих точек, т.е. справедлива запись

$$V(Q) = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} k_{\mu\nu} Q_\mu Q_\nu + \sum_{\mu\nu\lambda} k_{\mu\nu\lambda} Q_\mu Q_\nu Q_\lambda + \dots \quad (7.10.138)$$

для некоторой подходящим образом выбранной совокупности внутренних координат Q_μ ($\mu = 1, 2, \dots, 3N - 6$) (см. [15]). (Для положения равновесия линейный член в разложении (7.10.138) должен отсутствовать, а не имеющий физического смысла постоянный член нами опущен.)

Квадратичный член потенциальной энергии

$$V_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} k_{\mu\nu} Q_\mu Q_\nu \quad (7.10.139)$$

должен быть симметричным и положительно определенным. Следовательно, существует ортогональное линейное преобразование $Q = Aq$, которое приводит форму (7.10.139) к диагональному виду

$$V_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mu} k_{\mu} q_{\mu}^2, \quad k_{\mu} > 0. \quad (7.10.140)$$

Внутренние координаты q_μ ($\mu = 1, 2, \dots, 3N - 6$) предыдущих разделов, которые соответствуют молекулярной задаче, являются таким образом *нормальными координатами*. (Относительно роли эккартовых векторов в задаче нормальных координат, а также других ссылок на эту задачу см. обзор Лаука и Гелбрейта [16].)

Выражение для квантовомеханического гамильтонова оператора постепенно развивалось с самых первых дней существования квантовой теории ([7, 32]) и вплоть до 1940 г., когда Дарлинг и Деннисон [33] придали ему современный вид (см. также [34]). Первый общий вывод был дан Вильсоном и Ховардом [12], а несколько позже исправлен [15] с учетом критики Дарлинга и Деннисона.

Основные этапы вывода гамильтониана в этих работах можно кратко охарактеризовать следующим образом. 1) Строится классический гамильтониан для молекулярной модели с использованием движущейся системы отсчета, введенной Эккартом [6] (см. [35]). 2) Строится теория для перехода от классического гамильтониана к квантовому гамильтониану в случае импульсов, которые сопряжены координатам [36, 37]. 3) Эта теория распространяется на случай импульсов, не обязательно сопряженных координатам.

Вывод квантовомеханического гамильтониана из его классического аналога при помощи описанной выше процедуры находится в согласии с результатом, полученным методом прямого преобразования, описанным в предыдущем разделе.

Приведем окончательный вид гамильтониана в упрощенной форме, принадлежащей Ватсону [38]. (Детали этого вывода занимают слишком много места, чтобы воспроизводить их здесь. Мы просто сформулируем результаты, отметив несколько шагов, которые приводят к конечному результату.)

Воспользовавшись явным преобразованием от $3N$ декартовых координат $\{x_i^\alpha\}$ к $3N$ молекулярным координатам $\{R_j\}$, $\{C_{ij}\}$ (содержащим три независимые координаты) и нормальным координатам $\{q_\mu\}$, находим для оператора кинетической энергии¹⁾

$$\begin{aligned} T &= - \sum_{xi} (2m_x)^{-1} (\partial / \partial x_i^\alpha)^2 \\ &= - (2m)^{-1} \sum_i (\partial / \partial R_i)^2 - \frac{1}{2} \sum_\mu (\partial / \partial q_\mu)^2 - \frac{1}{2} \sum_\mu \lambda_\mu (\partial / \partial q_\mu) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{ij} \mu_{ij} (K_i + \Pi_i)(K_j + \Pi_j) - \frac{i}{2} \sum_i v_i (K_i + \Pi_i). \end{aligned} \quad (7.10.141)$$

В этом выражении μ_{ij} , λ_μ и v_i определены следующим образом.

1. Матрица $\mu = (\mu_{ij})$ называется *эффективным обратным тензором инерции*. Она представляет собой симметрическую матрицу 3×3 :

$$\mu = \sum_x m_x^{-1} \tilde{\Omega}^x \Omega^x = M M_0^{-1} M. \quad (7.10.142)$$

¹⁾ Заметим, что H инвариантен относительно вращения и инверсии пространственных координат $\bar{x}^\alpha$. Это очевидно для левой части соотношения (7.10.141), равно как и для правой части, поскольку как внутренние координаты q_μ , так и K_i и Π_i являются инвариантами вращений-инверсий.

где M и M_0 определены соответственно равенствами (7.10.125) — (7.10.131).

2. Вещественные числа λ_μ и ν_j определены выражениями

$$\begin{aligned}\lambda_\mu &\equiv \text{tr}(MA_\mu), \\ \nu_j &\equiv \sum_i (G_0 M H_i M)_{ij},\end{aligned}\quad (7.10.143)$$

где H_i — кососимметрическая матрица 3×3 с элементом на пересечении j -й строки и k -го столбца, заданным равенством

$$(H_i)_{jk} = e_{ijk}. \quad (7.10.144)$$

Оператор кинетической энергии (7.10.141) содержит линейные члены по импульсам — $i(\partial/\partial q_\mu)$ и по K_i и Π_i ; они обычно устраняются, если сделать дальнейшее преобразование оператора кинетической энергии. Это преобразование осуществляется при помощи якобиана перехода от декартовых координат $\{x_i^\alpha\}$ к молекулярным координатам $\{R_i\}$, $\{C_{ij}\}$, $\{q_\mu\}$:

$$x_i^\alpha = R_i + \sum_j C_{ij} \left(a_j^\alpha + m_x^{-1} \sum_\mu q_\mu q_{\mu j}^\alpha \right). \quad (7.10.145)$$

Вычисление якобиана $\mathcal{J}$ перехода (7.10.145) нетривиально, но можно показать, что

$$\mathcal{J} = \left[\left(m / \prod_x m_x \right)^{\frac{3}{2}} (\det A)(\det M^{-1})(\det M_0)^{\frac{1}{2}} \right], \quad (7.10.146)$$

где $\det A$ обозначает определитель (3×3) -матрицы A , которую мы сейчас опишем. Пусть (ξ_1, ξ_2, ξ_3) обозначает некоторую параметризацию собственной ортогональной матрицы C . Тогда производные $\partial C / \partial \xi_i$ должны иметь вид

$$\frac{\partial C}{\partial \xi_i} = C \begin{pmatrix} 0 & \lambda_{i3} & -\lambda_{i2} \\ -\lambda_{i3} & 0 & \lambda_{i1} \\ \lambda_{i2} & -\lambda_{i1} & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (7.10.147)$$

для некоторых функций λ_{ij} от параметров. (3×3) -матрицу (λ_{ij}) обозначаем через Λ . (Если $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\alpha\beta\gamma)$ — углы Эйлера, то имеем: $\det \Lambda = \sin \beta$.)

Значение якобиана можно понять следующим образом [37]. Пусть $\Psi(\mathbf{z})$ и $\Phi(\xi; \mathbf{q})$ обозначают собственные функции энергии в терминах $3N - 3$ независимых относительных координат из совокупности $\{x_i^\alpha - R_i\}$ и $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3; q_1, \dots, q_{3N-6}\}$ соответственно. Налагаем условия нормировки

$$\begin{aligned}\int \Psi^*(\mathbf{z}) \Psi(\mathbf{z}) \prod_{\alpha i} dz_i^\alpha &= 1, \\ \int \Phi^*(\xi; \mathbf{q}) \Phi(\xi; \mathbf{q}) (\det A) \prod_i d\xi_i \prod_\mu dq_\mu &= 1.\end{aligned}\quad (7.10.148)$$

Пренебрегая несущественными числовыми константами, отсюда получаем

$$\Phi(\xi; \mathbf{q}) = \Delta^{-\frac{1}{2}} \Psi(\mathbf{z}), \quad (7.10.149)$$

где мы определили (см. соотношение (7.10.125))

$$\Delta = \det M. \quad (7.10.150)$$

Тогда уравнение на собственные значения гамильтониана для $H' \equiv T + V$ (см. соотношения (7.10.138) и (7.10.141))

$$H' \Phi = E \Phi, \quad (7.10.151)$$

преобразуется к виду

$$H \Phi = E \Phi, \quad (7.10.152)$$

где

$$\begin{aligned} H &= \Delta^{-\frac{1}{2}} H' \Delta^{\frac{1}{2}} = H' + \Delta^{-\frac{1}{2}} [H', \Delta^{\frac{1}{2}}] \\ &= H' + \Delta^{-\frac{1}{2}} [T, \Delta^{\frac{1}{2}}]. \end{aligned} \quad (7.10.153)$$

Дополнительное слагаемое $\Delta^{-\frac{1}{2}} [T, \Delta^{\frac{1}{2}}]$, появляющееся в этом последнем выражении, устраняет из выражения для T (7.10.141) линейные члены, содержащие λ_μ и ν_μ , что дает молекулярный гамильтониан в следующем виде [38]:

$$\begin{aligned} H &= - (2m)^{-1} \sum_i (\partial_i \partial R_i)^2 - \frac{1}{2} \sum_\mu (\partial_\mu \partial q_\mu)^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{ij} \mu_{ij} (K_i + P_i)(K_j + P_j) + U + V, \end{aligned} \quad (7.10.154)$$

где

$$U = - \sum_i \mu_{ii}/8 \quad (7.10.155)$$

есть дополнительное слагаемое, возникающее за счет $\Delta^{-\frac{1}{2}} [T, \Delta^{\frac{1}{2}}]$.

Теория колебательно-вращательных спектров многоатомных молекул в значительной степени сводится к разработке методов определения собственных значений и собственных векторов гамильтониана (7.10.154). Поскольку уравнение $H\Psi = E\Psi$ не поддается точному решению, теория этого уравнения по большей части направлена на поиск эффективных приближенных методов решения.

н. Приближенный вид гамильтониана для молекул типа сферического волчка. Основная наша цель здесь состоит в иллюстрации методов теории углового момента. Роль теории углового момента в решении задачи на собственные значения для молекулярного гамильтониана H прекрасно демонстрируется на примере молекул типа сферического волчка и мы остановимся теперь более подробно на гамильтониане H для этого случая. Приложения к другим типам молекул можно найти в литературе [13].

Рассмотрим эффективный обратный тензор инерции для случая сферических волчков, т.е. для случая, когда все главные *равновесные* моменты инерции равны между собой. (Эккартова система отсчета совпадает с системой главных осей, когда все частицы находятся в своих положениях равновесия, т.е. когда все $q_\mu = 0$.) Обратный инерциальный тензор (см. соотношения (7.10.129)–(7.10.131), (7.10.142)) принимает следующий вид:

$$\mu = I_0^{-1} \left(\mathbb{1}_3 + I_0^{-1} \sum_\mu A_\mu q_\mu \right)^{-2}, \quad (7.10.156)$$

где главные равновесные моменты инерции все равны между собой и задаются формулой

$$I_0 = 2 \sum_x m_x a_i^2 a_i^2, \quad i = 1, 2, 3. \quad (7.10.157)$$

На этом этапе удобно восстановить постоянную Планка $\hbar$ в гамильтониане (7.10.154). Это осуществляется путем умножения всех слагаемых кроме V на $\hbar^2$ и включения $\hbar$ в определения K_i и P_i (для этого следует вставить $\hbar$ в правые части равенств (7.10.115) и (7.10.119)). Заменяем также нормальные координаты q_μ , которые имеют размерность (масса)^{1/2} (длина), на безразмерные нормальные координаты q'_μ , определяемые в виде

$$q'_\mu = (\omega_\mu/\hbar)^{1/2} q_\mu, \quad (7.10.158)$$

где ω_μ определены согласно

$$\omega_\mu \equiv (k_\mu)^{1/2}. \quad (7.10.159)$$

В этом определении k_μ — коэффициент, который появляется в квадратичной форме (7.10.140) для потенциальной энергии V_0 (k_μ должен иметь размерность (время)⁻², чтобы V_0 имела размерность энергии (масса) (длина)⁻² (время)⁻². В то же время мы вводим стандартное обозначение

$$B \equiv \hbar/4\pi c I_0 \quad (7.10.160)$$

и определяем (безразмерные) параметры ε_μ ¹⁾:

$$\varepsilon_\mu \equiv (\hbar c B / \hbar \omega_\mu)^{1/2}. \quad (7.10.161)$$

В этих обозначениях для обратного тензора инерции имеем выражение

$$\mu = \frac{2\hbar c B}{\hbar^2} \left[\mathbb{1}_3 + \sum_\mu \varepsilon_\mu A'_\mu q'_\mu \right]^{-2}, \quad (7.10.162)$$

где A'_μ — (безразмерная) матрица

$$A'_\mu \equiv \frac{A_\mu}{(I_0/2)^{1/2}}. \quad (7.10.163)$$

Параметры ε_μ^2 по существу являются отношениями чисто вращательной энергии с $J = 1$ к колебательной энергии основного состояния ν_μ -й моды движения. Эти отношения, как правило, достаточно малы, изменяясь от 5/3000 для ν_3 -полосы метана до 0,1/1000 для ν_3 -полосы гексафторида серы, что дает соответствующие значения для ε_μ , примерно равные 0,04 и 0,01. Элементами матрицы A'_μ являются просто числа порядка единицы. Этот факт вместе с предположением малых колебаний дает обоснование для замены μ разложением

$$\mu = \frac{2\hbar c B}{\hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (n+1) \left(\sum_\mu \varepsilon_\mu A'_\mu q'_\mu \right)^n. \quad (7.10.164)$$

¹⁾ Постоянная Планка $\hbar$ в этом равенстве не сокращена с той целью, чтобы дать для ε_μ явное выражение в виде отношения ротационной энергии $\hbar c B$ к вибрационной энергии $\hbar \omega_\mu$. Эти члены энергии, $\hbar c B$ и $\hbar \omega_\mu$, удерживаются также и в последующих соотношениях, поскольку обычно принято выражать гамильтониан (и энергию) в единицах $\hbar c$ (см⁻¹).

Используя это разложение в гамильтониане (7.10.154), а также опуская слагаемое, соответствующее центру масс, и штрихи у нормальных координат $\{q'_\mu\}$, получаем

$$H = U + \sum_{k=0}^{\infty} H_k, \quad (7.10.165)$$

где

$$H_0 = \frac{\hbar c B}{\hbar^2} \mathbf{J}^2 + \sum_{\mu} \frac{\hbar \omega_{\mu}}{2} \left(\frac{p_{\mu}^2}{\hbar^2} + q_{\mu}^2 \right), \quad (7.10.166)$$

$$H_1 = \frac{2\hbar c B}{\hbar^2} \sum_i K_i \Pi_i - \frac{2\hbar c B}{\hbar^2} \sum_{ij} Q_{ij} K_j K_j + V_1, \quad (7.10.167)$$

$$H_{k+2} = \frac{\hbar c B}{\hbar^2} \sum_{ij} \left[(-1)^{k+2} (k+3) (Q^{k+2})_{ij} K_i K_j + (-1)^{k+1} 2(k+2) (Q^{k+1})_{ij} K_i \Pi_j + (-1)^k (k+1) (Q^k)_{ij} \Pi_i \Pi_j \right] + V_k, \quad (7.10.168)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

$$U = -\frac{\hbar c B}{4} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (k+1) \text{tr } Q^k. \quad (7.10.169)$$

В выражениях (7.10.165) — (7.10.169) мы ввели следующие обозначения.

1. Матрица Q есть симметрическая (безразмерная) матрица, задаваемая в виде

$$Q \equiv \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} A'_{\mu} q_{\mu}, \quad (7.10.170)$$

линейном по нормальным координатам и параметрам ε_{μ} .

2. Координата q_{μ} безразмерна, а $p_{\mu} = -i\hbar \partial / \partial q_{\mu}$ — сопряженный ей импульс. Компоненты внутреннего углового момента Π_i принимают теперь вид¹⁾

$$\Pi_i = \sum_{\mu < \nu} \zeta_{\mu\nu}^i \left(\sqrt{\frac{\omega_{\nu}}{\omega_{\mu}}} q_{\mu} p_{\nu} - \sqrt{\frac{\omega_{\mu}}{\omega_{\nu}}} q_{\nu} p_{\mu} \right). \quad (7.10.171)$$

$$\zeta_{\mu\nu}^i = \left[\sum_{\beta} m_{\beta}^{-1} \left(q_{\mu j}^{\beta} q_{\nu k}^{\beta} - q_{\mu k}^{\beta} q_{\nu j}^{\beta} \right) \right], \quad (7.10.172)$$

¹⁾ Несмотря на то что $\zeta_{\mu\nu}^i$ появляются в компонентах векторного произведения, они являются числами и, следовательно, истинными скалярами. Выражение (7.10.171) для Π_i явно показывает, таким образом, свойства Π_i — Π_i и Π_i — $-\Pi_i$ относительно инверсии частицы и обращения времени соответственно.

где i, j, k циклически по 1, 2, 3. (Свойства коэффициентов дзета изучены в работе [39].)

3. Потенциальная энергия V_k обозначает член степени $k + 2$ в разложении V :

$$V_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \hbar \omega_{\mu} q_{\mu}^2,$$

$$V_1 = \hbar c \sum_{\mu \nu \lambda} k_{\mu \nu \lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\lambda}, \text{ и т.д.,} \quad (7.10.173)$$

где константы $k_{\mu \nu \lambda}, \dots$, выражаются теперь в единицах см^{-1} .

В определении $H_k, k = 0, 1, \dots$, мы собрали вместе все члены степени $k + 2$, где каждому K_p, q_{μ}, p_{μ} приписывается степень 1. Мы предпочли, однако, выделить ватсоновский член U (по этой причине H_k не следует считать гамильтонианом k -ого порядка в теории возмущений). Таким образом, мы видим, что H в разложении (7.10.165) представляется как сумма полиномиальных форм по q_{μ}, p_{μ} и K_p .

Задача на собственные значения для H , использующая полное разложение, которое дается формулами (7.10.165) — (7.10.169), все еще не поддается точному решению, поэтому необходимо ввести методы аппроксимации (теорию возмущений). Порядок членов в пертурбационной теории Рэлея — Шредингера основывается на а) экспериментальном определении величины энергии, которую вносят различные члены в полное собственное значение энергии E , б) степени, до которой возможно нахождение точных решений в задаче «нулевого порядка», и в) простоте физической интерпретации, ассоциируемой с различными членами.

Член, отождествляемый нами как H_0 , удовлетворяет по большей части всем указанным критериям. Он обладает точными собственными функциями¹⁾

$$\left(\frac{2J+1}{8\pi^2} \right)^{\frac{1}{2}} (\det C)^{\sigma} (-1)^{J-K} \mathcal{D}_{M, -K}^{J*}(C) \prod_{\mu} \Phi_{n_{\mu}}(q_{\mu}) \quad (7.10.174)$$

с соответствующими собственными значениями энергии, задаваемыми в виде

$$E_{J, (n)}^{(0)} / \hbar c = BJ(J+1) + \sum_{\mu} \sigma_{\mu} (n_{\mu} + \frac{1}{2}). \quad (7.10.175)$$

В этих выражениях $\Phi_{n_{\mu}}$ обозначает волновую функцию отдельного гармонического осциллятора в собственном состоянии энергии $E_{n_{\mu}} = \hbar c \sigma_{\mu} (n_{\mu} + \frac{1}{2})$; $\sigma_{\mu} = \omega_{\mu} / 2\pi c$ (в единицах см^{-1}) и $n_{\mu} = 0, 1, \dots$. Гамильтониан H_0 имеет также простую физическую интерпретацию: он является гамильтонианом для жесткого тела, вращающегося вокруг своего центра масс, вместе с гамильтонианом для коллективных колебательных движений совокупности отдельных массивных точек относительно вращающегося тела (системы отсчета). (Это появляющееся в H_0 полное разделение движений в нулевом порядке на два слагаемых (см. соот-

¹⁾ Величины $\mathcal{D}_{MK}^J(C)$ обозначают функции представления группы $O(3)$, определенные на элементах ортогональной матрицы $R \in O(3)$ при помощи формул (6.178) и (6.179) гл. 6. На этих функциях не только J_i и K_i имеют стандартное действие, но также операция инверсии $\mathcal{P}: \vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ является диагональной, т.е. имеет собственное значение $(-1)^{J+0}$ на этих состояниях.

ношение (7.10.22)) является одним из следствий использования экартовой системы отсчета.) В меньшей степени H_0 удовлетворяет также критерию «а», указанному выше: два слагаемых энергии (чисто вращательная плюс чисто колебательная) могут составлять основной вклад в полную энергию E молекулы, но для некоторых молекул член *кориолисова взаимодействия*

$$H_c \equiv -\frac{2hcB}{\hbar^2} \sum_i K_i \Pi_i \quad (7.10.176)$$

может давать вклад в энергию, сравнимый с $hcBJ(J+1)$. Кроме того, вклад за счет ангармонических членов в потенциальной энергии не может быть всегда с определенностью упорядочен по степени ассоциированного члена.

Несмотря на отмеченные трудности, стало общепринятым (см. работы [13, 14], а также работу [40] и приведенные в ней ссылки на литературу) развивать формальные построения, используя пертурбационную схему, основанную на выборе $H_0, H_1, H_2, \dots$ (задаваемых выражениями (7.10.165) — (7.10.169)) в качестве гамильтонианов нулевого порядка, первого порядка, второго порядка и т.д., оставляя исключения из такого упорядочения для изучения в качестве специальных случаев.

Полиномиальная форма каждого из гамильтонианов H_k ($k = 0, 1, 2, \dots$) способствует особенно изящной операторной формулировке пертурбационной теории Рэлея — Шредингера. Сама идея берет начало в самых ранних работах по квантовой механике, в которых развивалась теория преобразований [41].

В квантовой механике аналогом классических контактных преобразований является унитарное преобразование

$$q'_\mu = \mathcal{U} q_\mu \mathcal{U}^{-1}, \quad p'_\mu = \mathcal{U} p_\mu \mathcal{U}^{-1}, \quad (7.10.177)$$

которое оставляет без изменения канонические коммутационные соотношения. При этом преобразовании уравнение на собственные значения энергии $H\Psi = E\Psi$ переходит в $H'\Psi' = E\Psi'$, где

$$H' = \mathcal{U} H \mathcal{U}^{-1}, \quad \Psi' = \mathcal{U} \Psi. \quad (7.10.178)$$

Цель теории преобразований состоит в преобразовании H к виду H' , который является более простым и более удобным в обращении, чем H .

Чтобы обеспечить унитарность $\mathcal{U}$, обычно полагают

$$\mathcal{U} = e^{iS}, \quad S \text{ эрмитово.} \quad (7.10.179)$$

Полиномиальная форма каждого члена в молекулярном гамильтониане H подсказывает, что S следует выбрать в виде

$$S = S(q_\mu, p_\mu) = \text{полином по } q_\mu \text{ и } p_\mu \quad (7.10.180)$$

с коэффициентами, которые сами являются полиномами по K_j . Поскольку преобразование

$$H_k \rightarrow H'_k \equiv e^{iS} H_k e^{-iS}, \quad (7.10.181)$$

дает новый полиномиальный оператор H'_k , становится возможным упрощение H при помощи таких унитарных операторных преобразований.

Применение таких операторных методов в теории возмущений известно как преобразование Ван Флека [42] (см. [37]). Используя это преобразование в рамках пертурбационной теории Рэлея — Шредингера, где предполагается разложение H по степеням малого параметра λ вида

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots,$$

и, полагая

$$\mathcal{U} = e^{i\lambda S}, \quad (7.10.182)$$

находим, что преобразованный гамильтониан имеет вид

$$H' = H'_0 + \lambda H'_1 + \lambda^2 H'_2 + \dots,$$

где

$$\begin{aligned} H'_0 &= H_0, \\ H'_1 &= H_1 - i[H_0, S], \\ H'_2 &= H_2 - \frac{i}{2}[H_1 + H'_1, S], \dots \end{aligned} \quad (7.10.183)$$

Вид правых частей соотношений (7.10.183) подсказывает метод определения S : желательно найти такое S , что $[H_0, S] = -iH_1$, поскольку тогда $H'_1 = 0$. Но в общем случае определить такое S невозможно поскольку диагональные (по энергии) матричные элементы коммутатора $[H_0, S]$ равны нулю, в то время как диагональные элементы H_1 не обязательно равны нулю; следовательно, «диагональную часть» оператора H_1 нельзя уничтожить никаким выбором S . Мы не будем давать общего рассмотрения поставленной таким образом задачи, но проиллюстрируем теперь этот метод для молекулярной задачи.

Для молекулярной задачи имеются члены оператора H_1 (см. (7.10.167)) трех типов:

$$\begin{aligned} (1) \quad H_1(\mu) &= hc h_{\mu} q_{\mu}, \\ h_{\mu} &= -2B e_{\mu} \sum_{ij} (A'_{ij}) (K_i K_j / h^2); \end{aligned} \quad (7.10.184)$$

$$(2) \quad H_1(\mu\nu) = hc h_{\mu\nu} \left(\sqrt{\frac{\omega_{\nu}}{\omega_{\mu}}} q_{\mu} p_{\nu} - \sqrt{\frac{\omega_{\mu}}{\omega_{\nu}}} q_{\nu} p_{\mu} \right) / h, \quad \mu \neq \nu, \quad (7.10.185)$$

$$h_{\mu\nu} = 2B \left(\sum_i \zeta_{\mu\nu}^i K_i / h \right); \quad (7.10.186)$$

$$(3) \quad H_1(\mu\nu\lambda) = hc k_{\mu\nu\lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\lambda}. \quad (7.10.187)$$

Непосредственной проверкой [43], используя канонические коммутационные соотношения $[q_{\mu}, p_{\nu}] = i\hbar \delta_{\mu\nu}$, находим¹⁾

$$[H_0, S(\mu \dots)] = -iH_1(\mu \dots), \quad (7.10.188)$$

¹⁾ Поскольку величины h_{μ} и $h_{\mu\nu}$ коммутируют с J^2 , необходимо вычислить только коммутатор, используя вибрационный гамильтониан нулевого порядка, который сам коммутирует с h_{μ} и $h_{\mu\nu}$.

где

$$(1) \quad S(\mu) = -\frac{hch_\mu}{h\omega_\mu}(p_\mu/\hbar). \quad (7.10.189)$$

$$(2) \quad S(\mu\nu) = \frac{hch_{\mu\nu}}{h(\omega_\mu\omega_\nu)^{\frac{1}{2}}(\omega_\mu^2 - \omega_\nu^2)} [(\omega_\mu^2 + \omega_\nu^2)q_\mu q_\nu + 2\omega_\mu\omega_\nu(p_\mu p_\nu/\hbar^2)], \quad (7.10.190)$$

$$(3) \quad S(\mu\nu\lambda) = \frac{hck_{\mu\nu\lambda}}{hD_{\mu\nu\lambda}} [\omega_\mu(\omega_\mu^2 - \omega_\nu^2 - \omega_\lambda^2)(p_\mu q_\nu q_\lambda/\hbar) + \omega_\nu(\omega_\nu^2 - \omega_\lambda^2 - \omega_\mu^2)(q_\mu p_\nu q_\lambda/\hbar) + \omega_\lambda(\omega_\lambda^2 - \omega_\mu^2 - \omega_\nu^2)(q_\mu q_\nu p_\lambda/\hbar) - 2\omega_\mu\omega_\nu\omega_\lambda(p_\mu p_\nu p_\lambda/\hbar^3)], \quad (7.10.191)$$

$$D_{\mu\nu\lambda} = (\omega_\mu + \omega_\nu + \omega_\lambda)(\omega_\mu + \omega_\nu - \omega_\lambda)(\omega_\mu - \omega_\nu + \omega_\lambda)(-\omega_\mu + \omega_\nu + \omega_\lambda).$$

Появление $\omega_\mu^2 - \omega_\nu^2$ и $D_{\mu\nu\lambda}$ в знаменателях $S(\mu\nu)$ и $S(\mu\nu\lambda)$ соответственно показывает, что соответствующий член $H_1(\mu\nu)$ и $H_1(\mu\nu\lambda)$ не может быть удален из H_1 при помощи преобразования (7.10.183), если $\omega_\mu = \omega_\nu$ или $D_{\mu\nu\lambda} = 0$. Случай $\omega_\mu = \omega_\nu$ ($\mu \neq \nu$) будет возникать в члене кориолисова взаимодействия (7.10.185) всякий раз, когда вырожденные моды колебаний (изотропные гармонические осцилляторы размерности два, три и выше в нормальных координатах) допускаются симметрией молекулы (см. разд. п). Члены вида (7.10.185), для которых $\omega_\mu = \omega_\nu$ и $\mu \neq \nu$ (вырожденные осцилляторы), называются *членами кориолисова взаимодействия первого рода*, и такие члены невозможно удалить из H_1 при помощи преобразования (7.10.183). В дополнение к истинно вырожденным колебаниям у многих молекул возникает явление *случайного вырождения*. Такая ситуация имеет место для кориолисова члена $H_1(\mu\nu)$ (7.10.185), когда две частоты ω_μ и ω_ν приближенно равны: $\omega_\mu \approx \omega_\nu$. В этом случае слагаемое, вносимое в H_2' посредством преобразования (7.10.183), может давать поправку к энергии уровня нулевого порядка $\hbar\omega_\mu(n_\mu + \frac{1}{2}g_\mu)$ (g_μ -вырождение) и $\hbar\omega_\nu(n_\nu + \frac{1}{2}g_\nu)$, которая велика, что указывает на неприменимость пертурбационного метода. Члены вида (7.10.185), для которых $\omega_\mu \approx \omega_\nu$ ($\mu \neq \nu$), называются *членами кориолисова взаимодействия второго рода*, и о них говорят, что они вызывают *кориолисов резонанс*. Такие случаи должны рассматриваться специально [15, 44]. Хотя вырожденные моды колебаний не могут давать нуль для знаменателя $D_{\mu\nu\lambda}$ в (7.10.191), может иметь место случайное вырождение. Это возникнет, когда две частоты ω_μ и ω_ν связаны соотношением $\omega_\mu \approx 2\omega_\nu$ или же когда для трех частот выполняется соотношение $\omega_\mu \approx \omega_\nu + \omega_\lambda$ ($\mu \neq \nu \neq \lambda$). В этом случае S -оператор (7.10.191), соответствующий кубическим ангармоническим членам $hck_{\mu\nu\nu}q_\mu q_\nu^2$ или $hck_{\mu\nu\lambda}q_\mu q_\nu q_\lambda$, может вносить большие слагаемые в H_2' , делая, таким образом, невозможным, как и в случае кориолисова резонанса, применение пертурбационного метода. Об этих взаимодействиях, происходящих за счет кубических ангармонических членов в потенциальной энергии, говорят что они вызывают *фермиевский резонанс* [45].

Специальные исследования, которые требуются, когда имеют дело с кориолисовым или фермиевским резонансами в молекулах, выходят за рамки настоящего изложения [40], и в последующем мы пренебрегаем возможностью таких

резонансных явлений. (Это ограничение является не таким жестким, как это может показаться, поскольку результирующий гамильтониан может по-прежнему применяться к областям спектров заданной молекулы типа сферического волчка, где резонансные эффекты малы.)

При ограничении, что резонансные явления не возникают или они пренебрежимы, мы видим на основе соотношений (7.10.184) — (7.10.191), что из H_1 могут быть удалены при помощи преобразования (7.10.183) все члены за исключением кориолисовых членов первого рода. Кроме того, соображения, основанные на симметрии (см. разд. р), показывают, что дважды вырожденные колебания не могут вносить кориолисов член в гамильтониан молекулы типа сферического волчка. Таким образом, преобразование (7.10.183) приводит гамильтониан H (см. формулу (7.10.165)) к виду¹⁾

$$H' = H'_0 + H'_1 + H'_2 + \dots, \quad (7.10.192)$$

где

$$H'_0 = H_0,$$

$$H'_1 = \frac{2hcB}{h^2} \sum_i \zeta^i \mathbf{K} \cdot \mathbf{L}^i. \quad (7.10.193)$$

В этом выражении $\mathbf{L}^i$ — внутренний угловой момент, ассоциированный с трехмерным изотропным осциллятором (трехкратно вырожденная нормальная мода)²⁾, а суммирование ведется по всем таким вырожденным нормальным модам ($i = 1, 2, \dots$) осцилляции молекулы. Слагаемое $\mathbf{K} \cdot \mathbf{L}^i$ обозначает $\sum_k K_i L_k^i$, где L_k^i выражается через нормальные координаты (q_1^i, q_2^i, q_3^i) и сопряженные импульсы (p_1^i, p_2^i, p_3^i) трехкратно вырожденного осциллятора при помощи

$$L_i^i = q_j^i p_k^i - q_k^i p_j^i, \quad i, j, k \text{ циклически по } 1, 2, 3. \quad (7.10.194)$$

Наконец, ζ^i обозначает ζ -коэффициент для трехмерного осциллятора, поскольку вследствие симметрии три ζ -коэффициента, ассоциированные с L_1^i, L_2^i, L_3^i в соотношении (7.10.171), равны между собой. (Теперь мы разобьем нормальные координаты q_μ ($\mu = 1, 2, \dots, 3N - 6$) на совокупности, описывающие невырожденные колебания, двукратно вырожденные колебания и трехкратно вырожденные колебания.)

Гамильтониан второго порядка, входящий в (7.10.192) вычисляется в принципе непосредственно из (7.10.183) с использованием S -оператора (суммы слагаемых вида (7.10.189) — (7.10.191)), который преобразует H_1 к виду H'_1 . Такие вычисления проведены вплоть до четвертого порядка теории возмущений Аматом и Нильсеном [46], но мы не будем их здесь обсуждать. (Задача введения высших поправок для молекул типа сферического волчка рассматривается с точки зрения симметрии и тензорных операторов в разд. р).

¹⁾ «Ватсоновский» член U (7.10.169) является суммой полиномов по нормальным координатам, и мы можем считать его включенным в потенциальную энергию.

²⁾ Мы не рассматриваем здесь возможность существования молекул, обладающих более чем трехкратно вырожденными нормальными модами (симметрия икосаэдра).

Из соотношения (7.10.194) можно видеть, что каждый из внутренних угловых моментов $\mathbf{L}' = (L'_1, L'_2, L'_3)$ удовлетворяет стандартным коммутационным соотношениям:

$$\mathbf{L}' \times \mathbf{L}' = i\hbar \mathbf{L}'. \quad (7.10.195)$$

Коммутируют также и внутренние угловые моменты, ассоциированные с различными трехкратно вырожденными колебаниями. Но сумма $\sum_i \zeta^i \mathbf{L}'$ не удовлетворяет стандартным коммутационным соотношениям при произвольных параметрах $\zeta^i (i = 1, 2, \dots)$. Этот факт делает невозможным общее аналитическое вычисление поправки за счет H'_1 к энергии нулевого порядка (7.10.175) (мы должны диагонализировать эрмитову матрицу, в которой появляются неизвестные параметры $\zeta^1, \zeta^2, \dots$). Но существует один специальный случай трудной общей проблемы, который может быть полностью исследован методами теории углового момента; в этом случае удалось добиться успеха в объяснении ограниченной области спектров молекул типа сферического волчка [47]. Мы рассмотрим этот случай в следующем разделе.

о. Энергетический спектр в первом порядке трехкратно вырожденного колебания молекулы типа сферического волчка. В этом разделе мы рассмотрим уровни энергии гамильтониана $H_0 + H'_1$ в случае, когда все колебательные квантовые числа равны нулю, за исключением одного колебательного квантового числа n , соответствующего трехкратно вырожденной моде колебаний. В этом случае в пренебрежении постоянным членом искомая энергия есть энергия гамильтониана $H'_0 \equiv H_0 + H'_1$, который имеет вид

$$H'_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} + \mathbf{q}^2 \right) + \frac{\hbar c B}{\hbar^2} \mathbf{J}^2 + \frac{2\hbar c B \zeta}{\hbar^2} \mathbf{K} \cdot \mathbf{L}, \quad (7.10.196)$$

где $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ обозначает нормальные координаты, $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ — сопряженный линейный импульс, $-\mathbf{K} = (-K_1, -K_2, -K_3)$ обозначает компоненты полного углового момента $\mathbf{J}$ относительно эккартовой системы отсчета и $\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \mathbf{p}$ — внутренний угловой момент трехкратно вырожденной нормальной моды.

Гамильтониан (7.10.196) может быть диагонализирован (потому нет необходимости рассматривать член кориолисова взаимодействия как возмущение). Вводя оператор $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3)$ с компонентами, определенными согласно¹⁾

$$R_i = L_i + K_i = L_i \otimes \mathbb{1}(2) + \mathbb{1}(1) \otimes K_i, \quad (7.10.197)$$

находим

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{L} = (\mathbf{R}^2 - \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2)/2. \quad (7.10.198)$$

¹⁾ Если ввести определение $\bar{\mathbf{R}} \equiv \sum_i R_i \hat{f}_i$, $\bar{\mathbf{L}} \equiv \sum_i L_i \hat{f}_i$ (правосторонняя система отсчета) и вспомнить, что $-\bar{\mathbf{J}} = \sum_i K_i \hat{f}_i$, то выражение (7.10.197) можно записать как $\bar{\mathbf{R}} = -\bar{\mathbf{J}} + \bar{\mathbf{L}}$, так что $-\bar{\mathbf{R}}$ есть разность между полным угловым моментом $\bar{\mathbf{J}}$ и внутренним угловым моментом $\bar{\mathbf{L}}$. Нильсен [13] называет $-\bar{\mathbf{R}}$ угловым моментом вращающегося молекулярного остова. В определенном смысле это название неудачно, поскольку мы видели, что именно полный угловой момент $\mathbf{J}$ генерирует вращения эккартовой системы отсчета.

Поскольку $\mathbf{K}$ и $\mathbf{L}$ удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям, то это же справедливо и для $\mathbf{R}$ [48]:

$$\mathbf{R} \times \mathbf{R} = i\hbar \mathbf{R}. \quad (7.10.199)$$

Таким образом, $\mathbf{R}$ есть угловой момент с собственными значениями двух операторов $\mathbf{R}^2$ и R_3 соответственно $R(R+1)\hbar^2$ и $M_R\hbar$, где¹⁾ $R = 0, 1, \dots$ (см. соотношение (7.10.201) ниже), $M_R = R, R-1, \dots, -R$. Поскольку собственные значения операторов $\mathbf{J}^2$ и $\mathbf{L}^2$ имеют вид соответственно $J(J+1)\hbar^2$ и $l(l+1)\hbar^2$, мы находим, что собственными значениями произведения $2\mathbf{K} \cdot \mathbf{L}/\hbar^2$ являются

$$R(R+1) - J(J+1) - l(l+1), \quad (7.10.200)$$

где для конкретных $J = 0, 1, 2, \dots$ и $l = 0, 1, 2, \dots$ допустимые значения R определяются правилом сложения угловых моментов (см. разд. 11 гл. 3):

$$R = |J - l|, |J - l| + 1, \dots, J + l. \quad (7.10.201)$$

Таким образом, собственные значения E'_0 гамильтониана H'_0 имеют вид

$$E'_0[n(lJ)R] = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) + \hbar c B J(J+1) + \hbar c B_\zeta [R(R+1) - J(J+1) - l(l+1)]. \quad (7.10.202)$$

В этом выражении для энергии области изменения квантовых чисел следующие: квантовое число полного углового момента J может принимать любое из значений $0, 1, 2, \dots$; колебательное квантовое число n может принимать любое из значений $0, 1, 2, \dots$; для каждого допустимого значения n внутренний угловой момент l может принимать любое из значений $n, n-2, \dots, 1$ или 0 ; для каждого допустимого значения пары (J, l) квантовое число углового момента R может принимать любое из значений, выписанных в (7.10.201).

Собственные векторы гамильтониана (7.10.196) также могут быть приведены в явном виде. Из соотношений (3.123) гл. 3 и $\mathbf{K} = -\mathcal{P}$ мы сначала замечаем, что $\mathbf{K}$ имеет стандартное действие (см. примечание на стр. 495)

$$K_\pm \Psi_{MK}^{J,\sigma} = \hbar[(J \mp K)(J \pm K + 1)]^{\frac{1}{2}} \Psi_{MK \pm 1}^{J,\sigma},$$

$$K_3 \Psi_{MK}^{J,\sigma} = \hbar K \Psi_{MK}^{J,\sigma}, \quad (7.10.203)$$

на собственные векторы $\{\Psi_{MK}^{J,\sigma}\}$, определенные согласно

$$\Psi_{MK}^{J,\sigma}(C) \equiv \left(\frac{2J+1}{8\pi^2}\right)^{\frac{1}{2}} (\det C)^\sigma (-1)^{J-K} \mathcal{D}_{M,-K}^{J*}(C). \quad (7.10.204)$$

¹⁾ В молекулярной спектроскопии принято использовать символ R для обозначения квантового числа углового момента, соответствующего $\mathbf{R}^2$ т.е. $\mathbf{R}^2 = R(R+1)$. Такое использование не следует смешивать с ортогональной (3×3) -матрицей R , которая несколько ниже появится в этом разделе.

(Компоненты (J_1, J_2, J_3) оператора $\mathbf{J}$ также имеют стандартное действие на $\{\Psi_{MK}^{J,\sigma}\}$, где M играет роль K когда $\mathbf{K}$ заменено на $\mathbf{J}$ в соотношениях (7.10.203).) Кроме того, функции трехмерного гармонического осциллятора $\{\Phi_{nlm}\}$ удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \hbar \omega \left(\frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} + \mathbf{q}^2 \right) \Phi_{nlm} &= \hbar \omega \left(n + \frac{3}{2} \right) \Phi_{nlm}, \\ L_{\pm} \Phi_{nlm} &= \hbar [(l \mp m)(l \pm m + 1)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n,l,m \pm 1}, \\ L_3 \Phi_{nlm} &= m \hbar \Phi_{nlm}. \end{aligned} \quad (7.10.205)$$

где для каждого $n = 0, 1, 2, \dots$ допустимыми значениями l являются $l = n, n - 2, \dots, 1$ или 0 , а для каждого l допустимыми значениями m являются $m = l, l - 1, \dots, -l$. Явный вид функции Φ_{nlm} есть

$$\Phi_{nlm}(\mathbf{q}) = F_n(q) \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{q}),$$

$$F_n(q) = \sqrt{2} \left[\frac{\binom{n-l}{2}}{\Gamma\left(\frac{n+l+3}{2}\right)} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}q^2} L_{\frac{n-l}{2}}^{\frac{l+1}{2}}(q^2), \quad (7.10.206)$$

где $q = (q_1^2 + q_2^2 + q_3^2)^{\frac{1}{2}}$, $\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{q})$ обозначает шаровую функцию, а $L_{\kappa}^{\alpha}(x)$ — присоединенный полином Лагерра (см. (7.4.44)). Поскольку как $\mathbf{K}$, так и $\mathbf{L}$ имеют стандартное действие на собственные векторы $\{\Psi_{MK}^{J,\sigma}\}$ и $\{\Phi_{nlm}\}$ соответственно и $\mathbf{R}$ определяется посредством $\mathbf{K}$ и $\mathbf{L}$ в смысле векторного сложения угловых моментов (см. разд. 11 гл. 3), отсюда следует, что собственные векторы гамильтониана H_0 получаются стандартным связыванием функций $\Psi_{MK}^{J,\sigma}$ и Φ_{nlm} с помощью коэффициента Вигнера¹⁾:

$$|(nM\sigma)(lJ)RM_R\rangle \equiv \sum_{K m} C_{mK M_R}^{lJ R} \Phi_{nlm} \otimes \Psi_{MK}^{J,\sigma}. \quad (7.10.207)$$

Волновые функции ротатора $\{\Psi_{MK}^{J,\sigma}\}$ и волновые функции гармонического осциллятора $\{\Phi_{nlm}\}$ в этой составной волновой функции являются ортонормированными функциями по соответствующим квантовым числам $\{\sigma JMK\}$ и $\{nlm\}$. Из этой ортонормированности следует, что сами составные волновые функции являются ортонормированными. В явном виде ортонормированность различных волновых функций, появляющихся в формуле (7.10.207), дается следующими соотношениями:

$$\langle \sigma' J' M' K' | \sigma J M K \rangle \equiv \frac{1}{2} \int d\Omega_C \Psi_{M'K'}^{J',\sigma'}(C') \Psi_{MK}^{J,\sigma}(C')$$

¹⁾ Трудностей с выбором надлежащих фазовых множителей, ассоциированных со связыванием углового момента $\mathcal{Q}$, удовлетворяющего аномальным коммутационным соотношениям, с обычным угловым моментом $\mathbf{L}$, а также «вычитанием» угловых моментов вместо «сложения», можно полностью избежать, если выдерживать все соотношения в «стандартной форме» (см. [48]).

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \int d\Omega_{C'} \Psi_{M'K'}^{J',\sigma'*}(-C') \Psi_{MK}^{J,\sigma}(-C') \\
& = \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{J'J} \delta_{M'M} \delta_{K'K}; \quad (7.10.204')
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle n'l'm'|nlm\rangle & \equiv \iiint_{-\pi}^{\pi} d^3q \Phi_{n'l'm'}^*(q) \Phi_{nlm}(q) \\
& = \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{m'm}; \quad (7.10.206')
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle (n'M'\sigma')(l'J')R'M'_R | (nM\sigma)(lJ)RM_R \rangle \\
= \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{J'J} \delta_{M'M} \delta_{R'R} \delta_{M'_R M_R} \quad (7.10.207')
\end{aligned}$$

Интегрирование в каждом слагаемом соотношения (7.10.204') следует вести по множеству всех *собственных* ортогональных матриц $\{C'\}$, где $d\Omega_{C'}$ обозначает (инвариантную)¹⁾ меру Хаара для группы $SO(3)$ в некоторой подходящей параметризации¹⁾; для параметризации посредством углов Эйлера, получаемой при $C' = R(\alpha\beta\gamma)$ (см. формулу (2.37) гл. 2), мера Хаара задается в виде $d\Omega_{C'} = d\alpha d\gamma \sin\beta d\beta$ и интегралы в (7.10.204') вычисляются исходя из определения (7.10.204) функций ротатора в терминах матричных элементов матрицы вращения $\mathcal{D}_{MK}^J(C') = (-1)^J \mathcal{D}_{MK}^J(-C') = D_{MK}^J(\alpha\beta\gamma)$ для $C' = R(\alpha\beta\gamma)$ с использованием соотношения ортогональности (3.137) гл. 3.

Задача нахождения собственных значений и собственных векторов гамильтониана H_0 (7.10.196) решается, таким образом, полностью на основе изложенных выше результатов. Непосредственное применение этих результатов к конкретным сферическим волчковым молекулам для значений n , которые не малы, необходимо проводить осторожно, так как нельзя всегда быть уверенным, что возмущение правильно учтено. Даже когда собственные значения энергии (7.10.202) являются в первом порядке хорошими приближениями, эти значения недостаточно точные, чтобы давать согласие с современными экспериментальными спектрами высокого разрешения, и должны быть приняты во внимание поправки более высоких порядков. Электрические дипольные переходы с вращательных подуровней основного колебательного состояния ($n = l = 0$) на вращательные подуровни первого возбужденного колебательного состояния ($n = l = 1$) трехкратно вырожденных колебательных уровней²⁾ (фундаментальная полоса) изучены весьма подробно для таких молекул типа сферического волчка, как метан (CH_4) и гексафторид серы (SF_6), ясно показывая богатую тонкую

¹⁾ В более общем случае внутреннее произведение, обозначаемое (F, G) , двух функций F и G , где каждая функция определяется на элементах R_{ij} ортогональной (3×3) -матрицы R , со значениями, обозначенными через $F(R)$ и $G(R)$ соответственно, определяется в виде $(F, G) = \frac{1}{2} [d\Omega_R \{F^*(R')G(R') + R^*(-R')G(-R')\}]$, где интегрирование ведется по всем собственным ортогональным матрицам R' .

²⁾ Эти фундаментальные полосы обычно называют ν_3 -, ν_4 -полосами и т.д., где нижний индекс указывает на обозначение трехкратно вырожденной моды. ν — частота в см^{-1} , т.е. ν соответствует σ (7.10.208).

структуру, выходящую за пределы предсказаний формулы (7.10.202) (см. разд. п—х).

Изучение тонкой структуры фундаментальной ν -полосы само по себе является интересным приложением методов теории углового момента. Здесь полезно привести электрические дипольные правила отбора для этих переходов, чтобы выявить спектр инфракрасного поглощения, ассоциированный с энергетическими уровнями (7.10.202). Частота σ линии поглощения в см^{-1} в ν -полосе дается боровским соотношением для частоты

$$\sigma = (E'_0[1; (1J')R'] - E'_0[0; (0J)R]) / hc, \quad (7.10.208)$$

и правилами отбора

$$\Delta J = J' - J = 0, \pm 1; \quad \Delta R = R' - R = 0. \quad (7.10.209)$$

(Этот результат обобщается с учетом четности в соотношении (7.10.346).)

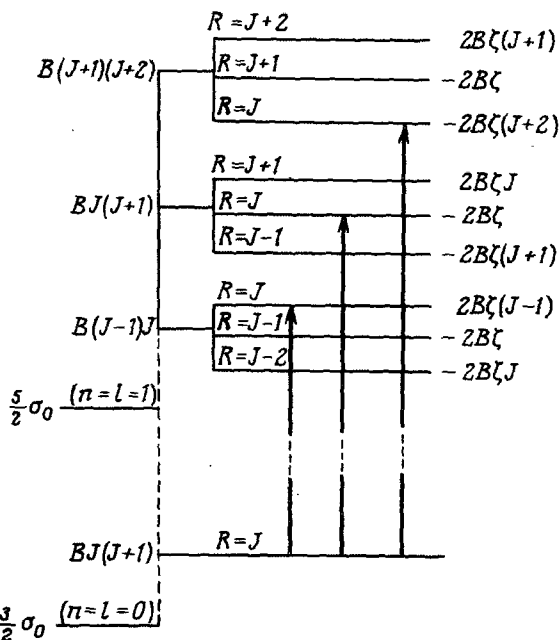


РИС. 7.6. Разрешенные электрические дипольные переходы из состояния полного углового момента J основного колебательного состояния ($n = l = 0$) трехкратно вырожденного осциллятора на корнолисовы подуровни, ассоциированные с состояниями углового момента $J' = J - 1$ (линия P -ветви), $J' = J$ (линия Q -ветви), $J' = J + 1$ (линия R -ветви) первого возбужденного колебательного состояния ($n = l = 1$).

Изложенные результаты приводят к рис. 7.6, где схематически изображены разрешенные переходы в ν -полосе. Показана энергия основного состояния $(\frac{3}{2}\sigma_0 + BJ(J+1))$, где $\sigma_0 = \hbar\omega/hc$ обозначает частоту в см^{-1} обсуждаемого

трехкратно вырожденного колебания, а также энергии трех более высоких состояний $(\frac{1}{2})\sigma_0 + BJ'(J+1)$, соответствующих допустимым значениям $J' = J-1, J, J+1$, на которые могут происходить переходы; каждый из этих трех лежащих выше уровней ($l=1$) в свою очередь расщепляется на три уровня за счет кориолисова взаимодействия ($R = J' - 1, J', J' + 1$), и кориолисова поправка к энергии на рисунке указана справа. Некоторое представление о масштабе различных частей рисунка можно получить, если заметить, что приближенные значения параметров в случае ν_3 -полосы молекулы SF_6 (см. разд. х) таковы: $\sigma_0 = 947,977$, $B = 0,0911$, $\zeta = 0,694$.

В соответствии с правилом отбора для полного углового момента J ν -полосу можно разделить на три отдельные ветви. Эти три ветви принято называть P -ветвью ($\Delta J = -1$), Q -ветвью ($\Delta J = 0$) и R -ветвью ($\Delta J = +1$). Частоты линий поглощения в см^{-1} в каждой из этих ветвей вычисляются на основе боровского соотношения для частоты (7.10.208) или же могут быть определены из рис. 7.6 (для $J=0$ и $J=1$ рис. 7.6 следует модифицировать путем выбрасывания линий, соответствующих отрицательному значению J' или R). В результате получаем

P -ветвь ($\Delta J = -1$):

$$\sigma_J = (\sigma_0 - 2B\zeta) - 2B(1 - \zeta)J, \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (7.10.210)$$

Q -ветвь ($\Delta J = 0$):

$$\sigma_J = \sigma_0 - 2B\zeta, \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (7.10.211)$$

R -ветвь ($\Delta J = +1$):

$$\sigma_J = (\sigma_0 - 2B\zeta) + 2B(1 - \zeta)(J+1), \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad (7.10.212)$$

(Следует заметить, что в этих формулах J — полный угловой момент основного колебательного состояния.) Таким образом, в приближении первого порядка ν -спектр состоит из одной линии, лежащей при $\sigma_0 - 2B\zeta$ (Q -ветвь), с линиями, появляющимися по обе стороны на равных расстояниях $2B(1 - \zeta)$; линии P -ветви находятся со стороны более низких частот и нумеруются при помощи $J = 1, 2, \dots$; линии R -ветви находятся со стороны более высоких частот и нумеруются при помощи $J = 0, 1, 2, \dots$.

Мы уже отмечали, что описанный выше «идеальный спектр» ν -полосы недостаточно точен для интерпретации экспериментального спектра ν -полосы высокого разрешения молекулы типа сферического волчка — необходимо обратиться к задаче поправок более высокого порядка. Взаимодействия высших порядков могут быть включены в теорию различными путями: 1) прямым методом, когда H'_2 (и члены более высоких порядков) вычисляются с использованием преобразования (7.10.183) [14], и 2) на основе использования симметричных методов, позволяющих выводить «форму» всех таких взаимодействий. Обратимся теперь к развитию второго метода, который требует использования точечной группы молекулы.

п. Точечная группа жесткой молекулы¹⁾. Совокупность векторов $\mathcal{A}$, задаваемых соотношением (7.10.17), которая определяет равновесную конфигурацию составляющих молекулу атомов, играет основную роль в определении так называемой точечной группы жесткой (полужесткой) молекулы. Чтобы увидеть, как это происходит, рассмотрим разбиения совокупности $\mathcal{A}$, соответствующие наборам тождественных атомов. Пусть $\mathcal{A}_k$ обозначает подмножество в $\mathcal{A}$, состоящее из векторов положения тождественных атомов «типа k ». Тогда $\mathcal{A}$ можно записать в виде объединения непересекающихся подмножеств $\{\mathcal{A}_k; k \in K\}$, где K — набор, характеризующий различные типы атомов:

$$\mathcal{A} = \bigcup_k \mathcal{A}_k. \quad (7.10.213)$$

Точечная группа G молекулы со статической моделью, задаваемой совокупностью $\mathcal{A}$, по определению есть

$$G = \{\mathcal{R}: \mathcal{A}_k \rightarrow \mathcal{A}_k, \text{ для каждого } k \in K \text{ и } \mathcal{R} \in O(3)\}, \quad (7.10.214)$$

где $O(3)$ обозначает группу вращений-инверсий пространства $\mathbb{R}^3$ (евклидова трехмерного пространства с точками (x_1, x_2, x_3) , которые мы будем описывать при помощи лабораторной системы отсчета). Таким образом, G является подгруппой группы $O(3)$ вращений и инверсии трехмерного евклидова пространства $\mathbb{R}^3$, которая в статической модели переводит тождественные атомы в тождественные атомы.

Для элемента точечной группы G мы будем использовать обозначение g .

Существуют два представления группы G , которые играют важную роль.

1. Представление собственного вращения g как линейного преобразования точек из $\mathbb{R}^3$. В векторном обозначении из соотношения (2.1) гл. 2 имеем

$$y: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3,$$

$$\vec{x} \rightarrow \vec{y} = g\vec{x} = \vec{x} \cos \phi + (\hat{n} \cdot \vec{x})\hat{n}(1 - \cos \phi) + (\hat{n} \times \vec{x}) \sin \phi. \quad (7.10.215)$$

где g — положительное вращение (правило правого винта) на угол ϕ вокруг направления, определяемого единичным вектором $\hat{n}$. Вращение g может быть также представлено собственной ортогональной матрицей 3×3 с элементом на пересечении i -й строки и j -го столбца вида

$$R_{ij}(g) = \hat{l}_i \cdot g\hat{l}_j. \quad (7.10.216)$$

Инверсия $\mathcal{I}$ пространства $\mathbb{R}^3$ определяется при помощи равенства $\mathcal{I}\vec{x} = -\vec{x}$ и представляется в виде $R(\mathcal{I}) = -\mathbb{1}_3$, где $\mathbb{1}_3$ обозначает единичную матрицу 3×3 .

2. Представление элемента g как линейного преобразования, действующего на элементы из совокупности $\mathcal{A}$. Мы можем записать

¹⁾ Более подробное описание результатов этого раздела можно найти в работах [16, 49].

$$g: \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$$

$$[\bar{a}^1 \bar{a}^2 \cdots \bar{a}^N] \rightarrow [\bar{a}^1 \bar{a}^2 \cdots \bar{a}^N] P(g), \quad (7.10.217)$$

где мы упорядочили элементы из $\mathcal{A}$ и поместили их в $(1 \times N)$ -матрицу-строку. Тогда матрица $P(g)$ является перестановочной матрицей $N \times N$.

Заметим, что свойства группового умножения выполняются:

$$g'(g\bar{x}) = (g'g)\bar{x}, \quad \text{для каждого } \bar{x} \in \mathbb{R}^3,$$

$$R(g')R(g) = R(g'g),$$

$$P(g')P(g) = P(g'g), \quad (7.10.218)$$

для всех $g, g' \in G$. Таким образом, два соответствия

$$g \rightarrow R(g) \text{ и } g \rightarrow P(g) \text{ для каждого } g \in G \quad (7.10.219)$$

являются представлениями точечной группы G .

Если обозначить через A матрицу $3 \times N$

$$A = \begin{bmatrix} a_1^1 & a_1^2 & \cdots & a_1^N \\ a_2^1 & a_2^2 & \cdots & a_2^N \\ a_3^1 & a_3^2 & \cdots & a_3^N \end{bmatrix}, \quad (7.10.220)$$

то A переплетает представления $\{P(g): g \in G\}$ и $\{R(g): g \in G\}$ группы G , т.е.

$$R(g)A = AP(g), \quad \text{для каждого } g \in G. \quad (7.10.221)$$

Соотношение (7.10.221) есть основной результат, получаемый на основе статической модели жесткой молекулы.

С целью применения точечной группы G для описания молекулы в движении необходимо определить действие группы G на общий набор $Y = \{\bar{y}^\alpha: \alpha = 1, 2, \dots, N\}$ мгновенных трансляционно инвариантных векторов положения: $\bar{y}^\alpha \equiv \bar{x}^\alpha - \bar{R}$. Рассмотрим совокупность линейных операторов

$$L(G) = \{L_g: g \in G\}, \quad (7.10.222)$$

где $L_g: Y \rightarrow Z$ — линейное отображение набора Y мгновенных трансляционно инвариантных векторов положения на другой набор Z мгновенных трансляционно инвариантных векторов положения, задаваемое согласно

$$L_g: \bar{y}^\alpha \rightarrow \bar{z}^\alpha = L_g \bar{y}^\alpha \equiv \sum_{\beta} (g \bar{y}^\beta) P_{\alpha\beta}(g), \quad (7.10.223)$$

где 1) $\{P(g): g \in G\}$ — представление группы G (7.10.217) посредством перестановочной матрицы $N \times N$; 2) $g \bar{y}^\beta$ — линейное преобразование, определяемое для произвольного вектора $\bar{y}$ согласно

$$g \bar{y} = \sum_{ij} R_{ij}(g) (\bar{y} \cdot \hat{f}_j) \hat{f}_i, \quad (7.10.224)$$

где $\{R(g): g \in G\}$ — представление группы G (7.10.216) посредством ортогональной матрицы 3×3 , а векторы эккартовой системы отсчета $\hat{f}_i (i = 1, 2, 3)$ соответствуют векторам положения $\bar{y}^1, \dots, \bar{y}^N$, т.е. $\hat{f}_i \perp \hat{f}_j (\bar{y}^1, \dots, \bar{y}^N)$.

Заметим, что $g\bar{y}^\alpha \cdot g\bar{y}^\beta = \bar{y}^\alpha \cdot \bar{y}^\beta$, так что g есть вращение-инверсия и $g'(gy) = (g'g)\bar{y}$.

Альтернативное выражение для преобразования (7.10.223) в терминах компонент $\bar{y}^\alpha \cdot \hat{f}_i$ и $(L_g \bar{y}^\alpha) \cdot \hat{f}_i$ относительно векторов эккартовой системы отсчета $\hat{f}_i = \hat{f}_i(\bar{y}^1, \dots, \bar{y}^N)$ имеет вид

$$(L_g \bar{y}^\alpha) \cdot \hat{f}_i = \sum_{\beta j} [P(g) \otimes R(g)]_{\alpha i; \beta j} (\bar{y}^\beta \cdot \hat{f}_j), \quad (7.10.225)$$

где $P(g) \otimes R(g)$ — (матричное) прямое произведение $P(g)$ на $R(g)$, а $[P(g) \otimes R(g)]_{\alpha i; \beta j} = P_{\alpha\beta}(g)R_{ij}(g)$ обозначает элемент произведения $P(g) \otimes R(g)$ на пересечении строки αi и столбца βj .

Операторы $\{L_g; g \in G\}$ удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} \text{I.} \quad & L_{g'}(L_g \bar{y}^\alpha) = L_{g'g} \bar{y}^\alpha \text{ для произвольного } \bar{y}^\alpha; \\ \text{II.} \quad & L_g \bar{u}^\alpha = \bar{u}^\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N; \\ \text{III.} \quad & L_g \hat{f}_i = \hat{f}_i, \quad i = 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (7.10.226)$$

где III обозначает свойство

$$\begin{aligned} (L_g \hat{f}_i)(\bar{y}^1, \dots, \bar{y}^N) &\equiv \hat{f}_i(L_g \bar{y}^1, \dots, L_g \bar{y}^N) \\ &= \hat{f}_i(\bar{y}^1, \dots, \bar{y}^N). \end{aligned}$$

Доказательства этих соотношений проводятся непосредственно и могут быть найдены в работе [16].

Равенство I означает, что соответствие $g \rightarrow L_g$ является *линейным представлением* группы G ; равенство II означает, что G является *группой изотропии* набора векторов $\{\bar{u}^\alpha; \alpha = 1, \dots, N\}$, которые определяют равновесную конфигурацию (равенство (7.10.221) для статической модели существенно для доказательства свойства II), а равенство III означает, что эккартова система отсчета *инвариантна* относительно действия L_g группы G (т.е. G является группой изотропии эккартовой системы отсчета).

Соотношения (7.10.226) являются *ключевыми для установления роли точечной группы в динамической молекулярной модели (молекула в движении)*.

Главный результат состоит в следующем. *Группа операторов*

$$L(G) = \{L_g; g \in G\} \quad (7.10.227)$$

может быть использована для расщепления пространства внутренних координат на подпространства, которые преобразуются неприводимо относительно $L(G)$.

Доказательство. Пусть $\{\bar{\rho}^\alpha\}$ обозначает любой набор векторов смещения для системы отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$. Из равенства $L_g \bar{y}^\alpha = \bar{u}^\alpha + L_g \bar{\rho}^\alpha$ следует, что совокупность векторов

$$\{L_g \bar{\rho}^\alpha; \alpha = 1, 2, \dots, N\} \quad (7.10.228)$$

также является набором векторов смещения для системы отсчета $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$.

Выберем теперь произвольный базисный набор $\{q_\mu; \mu = 1, \dots, 3N - 6\}$ для внутренних координат (см. разд. II). Так как

$$(L_g \bar{\rho}^\alpha) \cdot \hat{f}_i = \sum_{\beta j} [P(g) \otimes R(g)]_{\alpha i; \beta j} \rho_\beta^j, \quad (7.10.229)$$

то из соотношений (7.10.66) и (7.10.67) мы находим, что внутренними координатами $\{q'_\mu\}$, соответствующими векторам смещения $(\rho^z)' = L_g \rho^z (\alpha = 1, \dots, N)$, являются

$$q'_\mu = L_g q_\mu \equiv \sum_\alpha \dot{q}_\mu^\alpha \cdot (L_g \rho^z) = \sum_\nu M_{\mu\nu}(g) q_\nu. \quad (7.10.230)$$

где

$$M_{\mu\nu}(g) = \sum_{\alpha\beta j} m_j^{-1} q_{\mu i}^\alpha q_{\nu j}^\beta [P(g) \otimes R(g)]_{\alpha i \beta j}. \quad (7.10.231)$$

Из группового свойства¹⁾ $L_{g'} L_g = L_{g'g}$ и свойства базиса (из $\sum_\mu a_\mu q_\mu = \sum_\mu b_\mu q_\mu$ следует $a_\mu = b_\mu$) в совокупности вытекает, что множество матриц (размерности $3N - 6$)

$$\{M(g): g \in G\} \quad (7.10.232)$$

является представлением группы G . Тогда полная редукция этого представления на неприводимые представления группы G определяет внутренние координаты вида

$$q_\gamma^r = \sum_\mu a_{\gamma\mu}^r q_\mu, \quad \gamma = 1, 2, \dots, \dim \Gamma \quad (7.10.233)$$

которые преобразуются согласно неприводимому представлению Γ группы G относительно действия L_g группы G . ■

Из предыдущего обсуждения мы видим, что группа операторов $L(G)$ полностью решает задачу классификации внутренних координат в соответствии с их трансформационными свойствами относительно неприводимых представлений точечной группы G .

В последующем мы полагаем, что все внутренние координаты являются нормальными координатами, которые разбиты на множества $\{q_\gamma^r: \gamma = 1, \dots, \dim \Gamma\}$, преобразующиеся неприводимо относительно действия $L(G)$:

$$L_g: q^r \rightarrow \Gamma(g) q^r, \quad (7.10.234)$$

где $q^r = \text{col}(q_1^r, q_2^r, \dots)$, а $\Gamma = \{\Gamma(g): g \in G\}$ — неприводимое представление G . Тогда сопряженные линейные импульсы также будут обладать этим трансформационным свойством:

$$L_g: p^r \rightarrow \Gamma(g) p^r. \quad (7.10.235)$$

Гамильтониан H , задаваемый согласно (7.10.165), является функцией нормальных координат $\{q_\mu\}$ (которые теперь следует переобозначить посредством q_μ^r), сопряженных линейных импульсов $\{p_\mu\}$ (переобозначенных аналогично) и компонент $K_i = -(\det C)^{1/2} \cdot \vec{J}$ полного углового момента $\vec{J}$. Чтобы определить трансформационные свойства гамильтониана H относительно действия (7.10.223) представления $L(G)$, мы должны еще определить, как преобразуется K .

¹⁾ Проверка действия группы L_g , $(L_g q_\mu) = L_{g'} q_\mu$, где $\{q_\mu: \mu = 1, 2, \dots, 3N - 6\}$ — произвольный набор внутренних координат, выглядит следующим образом: $L_{g'}(L_g q_\mu) = \sum_\alpha \bar{q}_\mu^\alpha \cdot (L_{g'} \cdot (L_g \rho^\alpha)) = \sum_\alpha \bar{q}_\mu^\alpha \cdot (L_{g'g} \rho^\alpha) = L_{g'g} q_\mu$. Соответственно правая часть равенства (7.10.230) подвергается преобразованию $q_\mu - q'_\mu = \sum_\nu M_{\mu\nu}(g) q_\nu$, после которых следует $q'_\mu - q''_\mu = \sum_\nu M_{\mu\nu}(g') q'_\nu = \sum_\nu M_{\mu\nu}(g'g) q_\nu$.

Воспользовавшись формулой $\vec{J} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \vec{y}^{\alpha} \times \vec{p}^{\alpha}$, где $\vec{p}^{\alpha}$ — линейный импульс, сопряженный вектору положения $\vec{y}^{\alpha} = \vec{x}^{\alpha} - R$, находим из (7.10.223) и (7.10.224)

$$L_g: \vec{J} \rightarrow \det R(g) \sum_{ij} (\vec{J} \cdot \hat{f}_i) R_{ij}(g) \hat{f}_j, \quad (7.10.236)$$

где мы учли тот факт, что эккартова система отсчета инвариантна относительно действия L_g , а $R(g)$ есть матрица (7.10.216), представляющая $g \in G$. Таким образом, находим

$$L_g: K_i \rightarrow \det R(g) \sum_j R_{ij}(g) K_j. \quad (7.10.237)$$

Если обозначить $K = \text{col}(K_1, K_2, K_3)$, то это соотношение принимает в матричном обозначении следующий вид:

$$L_g: K \rightarrow R'(g)K, \quad (7.10.238)$$

где $R'(g) = [\det R(g)]R(g)$ есть представление группы G собственной ортогональной матрицей 3×3 , получаемое путем умножения «векторного» представления $R(g)$ (7.10.216) на $\det R(g)$. (Относительно действия группы $L(G)$ угловой момент K ведет себя как аксиальный вектор.)

Теперь мы можем сформулировать фундаментальное утверждение которое делается в молекулярной динамике жесткой молекулы: *гамильтониан H , задаваемый формулой (7.10.154), инвариантен относительно действия группы $L(G)$.*

Этот результат первым спектроскопистам представлялся интуитивно очевидным, но действительное его обоснование должно быть основано на законности физических приближений, лежащих в основе понятия эккартовой системы. Чтобы осознать это, необходимо сначала заметить явное различие, существующее между молекулярным гамильтонианом из «первых принципов» и эккартовым гамильтонианом (7.10.154). В любом гамильтониане, основанном на первых принципах, инвариантность относительно вращений-инверсий справедлива априори (в той области нерелятивистской квантовой механики, которой является молекулярная физика), равно как и перестановочная симметрия, связанная с перестановками тождественных частиц. Таким образом, например, для молекулы гексафторида серы SF_6 имеется априори группа из 720 элементов S_6 перестановок шести (тождественных) атомов фтора. Это не выполняется для эккартового гамильтониана (7.10.154), который ограничивается «внутренней» группой вращений-инверсий O_h , которая имеет 48 элементов (группа октаэдра с инверсиями). Следовательно, группа симметрии преобразований $L(G)$ значительно меньше чем абстрактная (априорная) группа перестановочных симметрий.

Соответственно гамильтониан для эккартовой модели жесткой молекулы (7.10.154) в общем случае не является инвариантным относительно (априорной) перестановочной симметрии тождественных атомов; такое нарушение симметрии обусловлено выбором феноменологической функции потенциальной энергии, которая удерживает (выделенные) атомы по существу в их положениях равновесия.

В молекулярной модели, которую мы описываем, предполагается, что функция потенциальной энергии V жесткой молекулы есть наиболее общая функция

нормальных координат $\{q_\mu: \mu = 1, \dots, 3N - 6\}^1$, которая аналитична в окрестности равновесной конфигурации, для которой выполняются следующие условия:

1) условия равновесия

$$\left. \frac{\partial V}{\partial q_\mu} \right|_{\text{равновесие}} = 0,$$

2) условия инвариантности

$$V(L_g q_1, \dots, L_g q_{3N-6}) = V(q_1, \dots, q_{3N-6}), \text{ для каждого } g \in G. \quad (7.10.239)$$

Таким образом, задача определения того, какие атомы в этой модели рассматриваются тождественными, состоит в определении тех перестановок атомов, которые оставляют $V(q_1, \dots, q_{3N-6})$ инвариантным. Мы увидим, что это определяет подгруппу группы S_N , ниже обозначаемую через $P(G)$, которая изоморфна $L(G)$.

Для рассмотрения данной задачи нам требуется более четкое определение «перестановок координат тождественных частиц» и соответствующие свойства внутренних координат относительно таких перестановок.

Пусть имеется n_k тождественных атомов типа k , характеризующихся различными целыми числами

$$\alpha_1(k), \alpha_2(k), \dots, \alpha_{n_k}(k),$$

и пусть векторами положения этих атомов в лабораторной системе отсчета являются векторы из совокупности X_k , задаваемой согласно

$$X_k = \{\vec{x}^\alpha: \alpha = \alpha_1(k), \dots, \alpha_{n_k}(k)\}, \quad (7.10.240)$$

где $\vec{x}^\alpha$ — вектор положения атома с номером α . Перестановкой P_k совокупности векторов положения тождественных атомов типа k является отображение X_k на X_k . Тогда произведением двух перестановок P'_k и P_k является обычная композиция отображений. Множество всех таких отображений образует группу, изоморфную симметрической группе S_{n_k} . Обозначая «типы» тождественных атомов индексом $k = 1, 2, \dots, m$ ($\sum_{k=1}^m n_k = N$), мы видим, что $P_k P_{k'} = P_{k'} P_k$ ($k' \neq k$) на множестве $X = \cup X_k$ и каждая перестановка $P: X \rightarrow X$ векторов положения тождественных атомов в молекуле имеет вид

$$P = \prod_{k=1}^m P_k, \quad P_k \in S_{n_k}. \quad (7.10.241)$$

Рассмотрим затем линейное отображение L_g , определяемое согласно (7.10.223). Тогда линейное отображение $P_g: Y \rightarrow Y$, определяемое в виде

$$P_g = g L_{g^{-1}}, \quad \text{для каждого } g \in G. \quad (7.10.242)$$

является перестановкой совокупности трансляционно инвариантных векторов положения тождественных атомов:

¹⁾ В последующем обсуждении $\{q_\mu\}$ может быть фактически любым набором внутренних координат.

$$P_g: \tilde{y}^z \rightarrow P_g \tilde{y}^z = \sum_{\beta} \tilde{y}^{\beta} P_{\beta z}(g). \quad (7.10.243)$$

Кроме того, множество перестановок

$$P(G) = \{P_g: g \in G\} \quad (7.10.244)$$

отображающих $\tilde{Y}$ на Y , образует группу относительно композиции отображений, следовательно,

$$P_{g'}(P_g \tilde{y}^z) = P_{g'g} \tilde{y}^z. \quad (7.10.245)$$

Действие группы перестановок $P(G)$ на векторы положений равновесия $\{\tilde{u}^{\alpha}: \alpha = 1, \dots, N\}$ и на совокупность векторов смещения $\{\tilde{\rho}^{\alpha}: \alpha = 1, \dots, N\}$ задается согласно

$$P_g \tilde{u}^{\alpha} = g \tilde{u}^{\alpha} = \sum_{\beta} \tilde{u}^{\beta} P_{\beta \alpha}(g), \quad (7.10.246)$$

$$P_g \tilde{\rho}^z = g L_{g^{-1}} \tilde{\rho}^z = \sum_{\beta} \tilde{\rho}^{\beta} P_{\beta z}(g). \quad (7.10.247)$$

Заметим, что равенство (7.10.245) справедливо также и в том случае, когда $\tilde{y}^z$ заменено на $\tilde{u}^{\alpha}$ или $\tilde{\rho}^z$.

Из определения (7.10.242) или (7.10.243) могут быть также выведены следующие три полезных свойства перестановок (7.10.244)

$$(1) \quad \hat{f}_i(P_g \tilde{y}^1, \dots, P_g \tilde{y}^N) = g[\hat{f}_i(\tilde{y}^1, \dots, \tilde{y}^N)]. \quad (7.10.248)$$

Этот результат утверждает, что экартова система отсчета, соответствующая переставленным векторам положения $P(g)\tilde{y}^1, \dots, P(g)\tilde{y}^N$, есть результат вращения-инверсии g системы отсчета F , соответствующей векторам положения $\tilde{y}^1, \dots, \tilde{y}^N$.

$$(2) \quad P_g q_{\mu} = L_{g^{-1}} q_{\mu}. \quad (7.10.249)$$

В этом равенстве $P_g q_{\mu}$ определено как результат, получаемый из q_{μ} путем применения перестановки (7.10.243) к векторам смещения $\{\tilde{\rho}^z\}$. Таким образом,

$$\begin{aligned} P_g q_{\mu} &= \sum_{\alpha i} q_{\mu i}^{\alpha} (g \hat{f}_i) \cdot (P_g \tilde{\rho}^z) \\ &= \sum_{\alpha i} q_{\mu i}^{\alpha} \hat{f}_i \cdot (g^{-1} P_g \tilde{\rho}^z) = \sum_{\alpha} \tilde{q}_{\mu}^{\alpha} \cdot L_{g^{-1}} \tilde{\rho}^z = L_{g^{-1}} q_{\mu}. \end{aligned} \quad (7.10.250)$$

$$(3) \quad P_{g'}(P_g q_{\mu}) = P_{g'g} q_{\mu} = (g'^{-1} L_{g'^{-1}g})(L_{g^{-1}} q_{\mu}). \quad (7.10.251)$$

Последнее соотношение доказывается следующим образом:

$$\begin{aligned} P_{g'}(P_g q_{\mu}) &= \sum_{\alpha i} q_{\mu i}^{\alpha} [g'(\hat{f}_i)] \cdot [P_{g'}(P_g \tilde{\rho}^z)] = P_{g'g} q_{\mu} \\ &= \sum_{\alpha} \tilde{q}_{\mu}^{\alpha} \cdot g'^{-1} g'^{-1} P_{g'}(P_g \tilde{\rho}^z) = \sum_{\alpha} \tilde{q}_{\mu}^{\alpha} \cdot (g'^{-1} L_{g'^{-1}g})(L_{g^{-1}} \tilde{\rho}^z) \\ &= (g'^{-1} L_{g'^{-1}g})(L_{g^{-1}} q_{\mu}). \end{aligned}$$

Теперь мы можем установить важный факт относительно перестановочной симметрии функции потенциальной энергии $V(q_1, \dots, q_{3N-6})$ жесткой моле-

кулы: функция потенциальной энергии $V(q_1, \dots, q_{3N-6})$ инвариантна относительно группы $P(G)$:

$$V(P_g q_1, \dots, P_g q_{3N-6}) = V(q_1, \dots, q_{3N-6}), \text{ для каждого } g \in G. \quad (7.10.251)$$

Доказательство. См. соотношения (7.10.249) и (7.10.239). ■

Из равенства (7.10.248), инвариантности гамильтониана H по отношению к вращениям и инверсиям $\mathbb{R}^3$, а также из равенства (7.10.251) следует, что *экартова модель гамильтониана* (7.10.154) для жесткой молекулы инвариантна относительно действия группы $P(G)$. Этот факт позволяет нам заключить: *атомы, рассматриваемые в этой модели как тождественные, есть в точности те атомы, которые преобразуются друг в друга под действием точечной группы G на статическую модель.* (Этот результат важен для вычисления так называемого статистического веса уровня (см. разд. ф).)

Из приведенных утверждений ясно, что свойства симметрии гамильтониана жесткой молекулы можно вывести, исходя из соответствующей группы перестановок тождественных частиц¹⁾, игнорируя понятие точечной группы. Основной является задача определения того, какие атомы в модели следует рассматривать как тождественные (проблема выбора функции потенциальной энергии, которая предсказывает с надлежащей точностью требуемое явление). Преимущество использования группы $P(G)$ состоит в том, что она более тесно согласуется с нашими понятиями об основных симметриях в природе; преимущество использования $L(G)$ состоит в том, что она является истинной группой инвариантности внутренних движений ($L(G)$ оставляет экартову систему отсчета инвариантной, тогда как изоморфная группа $P(G)$ не оставляет (см. соотношение (7.10.248)).

После этого краткого описания свойств инвариантности гамильтониана жесткой молекулы мы теперь снова обратимся к задаче о поправках второго порядка к гамильтониану (7.10.196).

р. Поправки высшего порядка: феноменологический гамильтониан. Заметим сначала, что гамильтониан (7.10.196) инвариантен относительно преобразований²⁾

$$K \rightarrow (\det R)RK, \quad q \rightarrow Rq, \text{ для каждого } R \in O(3), \quad (7.10.252)$$

поскольку второе преобразование означает также

$$L \rightarrow (\det R)RL. \quad (7.10.253)$$

Эти результаты следует сравнить с преобразованиями $L(G)$, индуцируемыми точечной группой G :

¹⁾ Эта точка зрения была развита и обобщена на нежесткие молекулы в основном Лонге-Хиггенсом [50], Хоугеном [51, 52] и Банкером [53, 54]. Несколько более общая точка зрения была также развита Хартером и др. [55 — 55б].

²⁾ Заметим, что эти «внутренние» вращения-инверсии независимы от вращений-инверсий молекулы относительно лабораторной системы отсчета (два типа вращений коммутируют). Это свойство более подробно обсуждается в работе [16].

Для нашего случая все тензорные операторы T_μ^* имеют составной вид (см. соотношение (3.233) гл. 3), задаваемый согласно

$$T_\mu^k = T_\mu^{(k_1 k_2)k} = \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1 \mu_2 \mu}^{k_1 k_2 k} T_{k_1 \mu_1}(\text{vib}) T_{k_2 \mu_2}(\text{rot}). \quad (7.10.261)$$

В последнем выражении $T_{k\mu}(\text{rot})$ обозначает $O(3)$ -тензорный оператор

$$T_{k\mu}(\text{rot}) \equiv [k!k!/(2k)!]^{\frac{1}{2}} \mathcal{T}_{k\mu}(\mathbf{K}). \quad (7.10.262)$$

В этой части обсуждения $T_{k\mu}(\text{vib})$ обозначает $O(3)$ -тензорный оператор

$$T_{k\mu}(\text{vib}) \equiv (-2)^k \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} \left[\frac{k!k!}{(2k)!} \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{Y}_{k\mu}(\mathbf{q}), \quad (7.10.263)$$

но впоследствии он будет обобщен, чтобы включить более общие неприводимые тензорные операторы, построенные из колебательных величин. (Нормировка в определениях (7.10.262) и (7.10.263) такова, что $T_{kk}(\text{rot}) = (-K_+)^k$ и $T_{kk}(\text{vib}) = q_+^k$. Эта нормировка дает согласование с введенными Хехтом [47] тензорными операторами, как это показано ниже в (7.10.268).)

G -инвариантная линейная комбинация (7.10.260) $O(3)$ -тензорных операторов имеет теперь вид

$$G^{(k_1 k_2)4} \equiv \frac{5}{4} \left(\sqrt{\frac{14}{5}} T_0^{(k_1 k_2)4} + T_4^{(k_1 k_2)4} + T_{-4}^{(k_1 k_2)4} \right). \quad (7.10.264)$$

Член кубического взаимодействия $T_2^3 - T_{-2}^3$, построенный из определенных соотношениями (7.10.261) — (7.10.263) тензорных операторов $T_\mu^{(2)3}$ (это единственные кубические члены, которые квадратичны по $\mathbf{q}$), не может появляться в гамильтониане (7.10.192). Это можно видеть с помощью преобразования (7.10.254): для построения такого G -инварианта мы должны построить три величины $\Lambda_k = \sum_{ij} a_{ij}^{(k)} q_i q_j$ ($k = 1, 2, 3$), квадратичные по компонентам $\mathbf{q}$, такие, что Λ преобразуется как вектор относительно действия группы G (преобразуется так же, как $\mathbf{K}$). Тогда и только тогда мы можем построить G -инвариант из Λ и $\mathbf{K}$. Но единственной величиной Λ с требуемым свойством преобразования является $\Lambda = \mathbf{q} \times \mathbf{q} = 0$.

Тензорные операторы четвертой степени (7.10.261), которые имеют четную степень по $\mathbf{q}$ и определяют G -инвариантные взаимодействия (7.10.264), имеют вид

$$T_\mu^{(40)4} = \frac{16}{3} \sqrt{\frac{4\pi}{70}} \mathcal{Y}_{4,\mu}(\mathbf{q}),$$

$$T_\mu^{(04)4} = \frac{1}{\sqrt{70}} \mathcal{T}_{4,\mu}(\mathbf{K}),$$

$$T_\mu^{(22)4} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1 \mu_2 \mu}^{224} \mathcal{Y}_{2,\mu_1}(\mathbf{q}) \mathcal{T}_{2,\mu_2}(\mathbf{K}). \quad (7.10.265)$$

Тензорные операторы пятой степени, которые имеют четную степень по $\mathbf{q}$ и $\mathbf{p}$ и определяют G -инвариантные взаимодействия, получаются снова из соотно-

шения (7.10.261). Имеются два таких оператора $T_{\mu}^{(13)4}$ и $T_{\mu}^{(31)4}$, которые определяют на основе (7.10.261) при помощи выбора

$$T_{1,\mu_1}(\text{vib}) \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{T}_{1,\mu_1}(\mathbf{L}),$$

$$T_{3,\mu_1}(\text{vib}) \equiv -2 \sqrt{\frac{4\pi}{15}} \sum_{\nu_1 \nu_2} C_{\nu_1 \nu_2 \mu_1}^{123} \mathcal{T}_{1,\nu_1}(\mathbf{L}) \mathcal{Y}_{2,\nu_2}(\mathbf{q}). \quad (7.10.266)$$

Тогда G -инвариантные операторы $G^{(13)4}$ и $G^{(31)4}$ определяются равенством (7.10.264) через $T_{\mu}^{(13)4}$ и $T_{\mu}^{(31)4}$.

Как и раньше, необходимо доказать, что пять G -инвариантных взаимодействий

$$\{G^{(k_1 k_2)4} : (k_1 k_2) = (40), (04), (22), (13), (31)\} \quad (7.10.267)$$

включают все $O(3)$ -тензорные взаимодействия вплоть до степени 5^1 , которые имеют диагональные по n независимые матричные элементы. (Мы опускаем это доказательство, которое можно провести путем перебора всех случаев.)

G -инвариантные взаимодействия (7.10.267) выбраны такими, что справедливы следующие соотношения с определениями Хехта [47]:

$$\begin{aligned} O_{33} (\text{тензор}) &= G^{(40)4}, \\ O_{PPPP} (\text{тензор}) &= G^{(04)4}, \\ O_{PPPP3} (\text{тензор}) &= G^{(13)4}, \\ O_{PP33} (\text{тензор}) &= G^{(22)4}, \\ O_{P333} (\text{тензор}) &= G^{(31)4}. \end{aligned}$$

Тензорные операторы Хехта записаны через компоненты q_i , L_i и $K_i = -\mathcal{P}_i$. Эта форма весьма полезна для явной проверки их инвариантности относительно G .)

Эффективные вращательные параметры колебательно-вращательной полосы²⁾ определяются скалярным возмущением. Для гамильтониана H'_0 (7.10.196) скалярное возмущение (в рассматриваемом приближении) является линейной комбинацией $O(3)$ -инвариантных взаимодействий (7.10.258) с вещественными числовыми коэффициентами. Действие этого скалярного возмущения сво-

¹⁾ Гамильтониан (7.10.154) инвариантен относительно преобразования обращения времени $f_i \rightarrow f_i$, $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}$, $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$, $\mathbf{K} \rightarrow -\mathbf{K}$ и эта инвариантность исключает члены взаимодействия, которые содержат тензоры типа $T^{(23)4}$ нечетной степени по $\mathbf{K}$.

²⁾ Для наших целей колебательную полосу поглощения можно определить как набор всех наблюдаемых частот излучения, которые молекула поглощает в процессе переходов из любого вращательного подсостояния состояния с фиксированной чисто колебательной энергией $E_n(\text{vib})$ в любое вращательное подсостояние другого состояния фиксированной чисто колебательной энергии $E_{n'}(\text{vib})$ ($n' > n$).

дится к небольшому сдвигу уровней первого порядка, задаваемых равенством (7.10.202), т.е. $E_0' [n(lJ)R]$ заменяется на ¹⁾

$$\begin{aligned} \frac{E_s[n(lJ)R]}{hc} &= \frac{E_{nl}(\text{vib})}{hc} + \left[B' + e \left(n + \frac{3}{2} \right) \right] J(J+1) \\ &+ \left[(B\zeta)' + aJ(J+1) + b \left(n + \frac{3}{2} \right) \right] \\ &\times [R(R+1) - J(J+1) - l(l+1)] \\ &- d[J(J+1)]^2 + f \langle n(lJ)R || T_0^{(22)0} || n(lJ)R \rangle, \\ \frac{E_{nl}(\text{vib})}{hc} &= \sigma' \left(n + \frac{3}{2} \right) + g \left(n + \frac{3}{2} \right)^2 + ul(l+1). \end{aligned} \quad (7.10.269)$$

В этих двух выражениях σ' , B' и $(B\zeta)'$ обозначают смещенные (на небольшие величины) значения параметров $\sigma = \omega/2\pi c$, B и $B\zeta$, появляющихся в выражении (7.10.202) для энергии в первом порядке; причем эти сдвиги обусловлены $O(3)$ -инвариантными взаимодействиями $\lambda^2 h_{\text{osc}}$, $\lambda^2 J^2$ и $\lambda^2 (\mathbf{K} \cdot \mathbf{L})$, возникающими из матричных элементов по основному состоянию от других мод колебаний. Параметры a , b , d , e , f , g и u являются коэффициентами остальных $O(3)$ -инвариантных взаимодействий (7.10.258); они очевидно малы по сравнению с соответствующими значениями σ' , B' или $(B\zeta)'$.

Скалярное слагаемое в энергии выявляется в результате вычисления диагональных матричных элементов $O(3)$ -инварианта $T_0^{(22)0}$ в связанном представлении (7.10.207). В этом находит свое стандартное применение соотношение (3.260) гл. 3. Более поучительно, однако, заметить, что диагональные матричные элементы ²⁾ $T_0^{(22)0}$ те же самые, что и для $O(3)$ -инварианта, и определяются выражением

$$T_0^{(22)0}(\text{eff}) \equiv -\frac{8}{15} h_{\text{osc}} \frac{[3\mathbf{K} \cdot \mathbf{L}(2\mathbf{K} \cdot \mathbf{L} + 1) - 2J^2 L^2]}{4L^2 - 3}. \quad (7.10.270)$$

¹⁾ Эти энергетические уровни независимы от квантовых чисел M и σ вследствие инвариантности полного гамильтониана по отношению к вращениям-инверсиям евклидова трехмерного пространства; они независимы от квантового числа M_R вследствие инвариантности *приближенного гамильтониана* H_0' (7.10.196) плюс линейные комбинации $O(3)$ -инвариантов (7.10.258) по отношению к *внутренним* $O(3)$ -преобразованиям (7.10.252). Именно эта последняя внутренняя симметрия (соответствующая вырождению внутреннего квантового числа M_R) нарушается до уровня точечной группы G $O(3)$ -тензорными G -инвариантными взаимодействиями (см. разд. с). Подчеркиваем еще раз, что «внутренние симметрии» являются следствием модели и иногда их называют приближенными симметриями — обычно они выводятся из эмпирических свойств конкретных физических систем. (В обозначении для матричных элементов мы часто опускаем характеристики σ , M и M_R .)

²⁾ Инвариант $T_0^{(22)0}$ имеет также и недиагональные по l матричные элементы (конечное состояние может иметь $l' = l + 2, l, l - 2$), однако возможное смешивание состояний с одинаковым n и различными l здесь рассматриваться не будет.

Мы находим, таким образом, еще один тип инвариантного оператора: числовой множитель в выражении (7.10.270) есть «полиномиальная часть» инвариантного оператора Рака

$$\left\{ \begin{array}{cc} 2 & \\ 4 & 0 \\ & 2 \end{array} \right\}$$

(см. разд. 21 гл. 3 и оператор P_0^2 в табл. 7 приложения таблиц). (Результат (7.10.270) может быть проверен непосредственным вычислением с помощью соотношения (3.260) редуцированных матричных элементов, приведенных в табл. 8 приложения таблиц, и соответствующего $6j$ -коэффициента из табл. 2.)

Замечание. Можно дать общий вид скалярной части гамильтониана. Как обсуждалось в конце разд. 9 (см. также разд. 21 гл. 3), совокупность коммутирующих эрмитовых операторов Рака

$$\left\{ \left\{ \begin{array}{cc} k & \\ 2k & 0 \\ & k \end{array} \right\} : k = 0, 1, \dots, 2R \right\},$$

является базисом в множестве всех инвариантных операторных отображений (операторов, коммутирующих с $\mathbf{R}$) пространства, натянутого на ортонормированный базис $\{|(nMo)(lJ)RM_R\rangle : R = |l - J|, \dots, l + J\}$, в себя. Этот факт означает, что наиболее общим видом скалярного гамильтониана является

$$H_{\text{scalar}} = \sum_{k=0}^{2R} A_k(h_{\text{osc}}, \mathbf{L}^2, \mathbf{J}^2) \left\{ \begin{array}{cc} k & \\ 2k & 0 \\ & k \end{array} \right\},$$

где A_k — в общем случае рациональная функция операторов h_{osc} , $\mathbf{L}^2$ и $\mathbf{J}^2$. (Заметим, что, поскольку фигурирующие выше операторы Рака не вызывают никакого сдвига величин n , l и J , они коммутируют с h_{osc} , $\mathbf{L}^2$ и $\mathbf{J}^2$.) Насколько нам известно, этот подход к молекулярной спектроскопии, использующий операторы Рака, в литературе отсутствует.

Мы не будем дальше обсуждать подробно искажения относительно простого в первом порядке спектра (7.10.202), которые вносят рассмотренные выше $O(3)$ -инвариантные взаимодействия, хотя это составляет важную задачу анализа значений молекулярных параметров, полученных из экспериментальных спектров, детально рассмотренную в работах [47, 59, 60].

Перейдем теперь к рассмотрению влияния на фиксированный уровень $E_s[n(lJ)R]$, оказываемого $O(3)$ -тензорными G -инвариантными взаимодействиями $G^{(k_1 k_2)4}$.

с. Схемы расщепления. В общем случае $O(3)$ -тензорное G -инвариантное взаимодействие $[O(3) \supset G]$ расщепляет собственное значение (уровень) гамильтониана, обладающего только $O(3)$ -инвариантностью, на несколько отдельных собственных значений (подуровней). Нашей целью в этом разделе является обсуждение того, каким образом $O(3)$ -тензорное G -инвариантное взаимодействие

$$V \equiv \sum_{k_1 k_2} t_{k_1 k_2 4} G^{(k_1 k_2)4} \quad (7.10.271)$$

расщепляет конкретный уровень скалярной энергии $E_S[n(I)R]$ на подуровни, обладающие G -симметрией. (Суммирование в формуле (7.10.271) следует вести по парам (40), (04), (22), (13), (31); $t_{k_1 k_2 4}$ — числовые коэффициенты.)

В обсуждении ниже удобно пользоваться «бра-кет»-обозначениями гл. 3, поскольку излагаемые результаты носят общий характер.

Основные черты таких схем расщепления хорошо известны и могут быть сформулированы при помощи редукции неприводимого представления $\mathcal{D}^{j,\sigma}$ ($j = 0, 1, \dots$; $\sigma = 0, 1$)

$$\mathcal{D}^{j,\sigma} = \{(\det R)^\sigma \mathcal{D}^j(R) : R \in O(3)\},$$

группы $O(3)$ на неприводимые представления Γ^α ($\alpha = 1, 2, \dots, k$)

$$\Gamma^\alpha = \{\Gamma^\alpha(g) : g \in G\}, \quad (7.10.272)$$

точечной группы G . Эта редукция абстрактно описывается посредством редукционных рядов типа группа — подгруппа (прямой суммы):

$$\mathcal{D}^{j,\sigma} = \sum_\alpha \oplus m_j(\Gamma^\alpha) \Gamma^\alpha, \quad (7.10.273)$$

где $m_j(\Gamma^\alpha)$ обозначает кратность (число появлений) Γ^α в представлении $\mathcal{D}^{j,\sigma}$. В соответствии с этой редукцией имеем также формулу размерности

$$2j + 1 = \sum_\alpha m_j(\Gamma^\alpha) \dim \Gamma^\alpha. \quad (7.10.274)$$

Во многих физических приложениях требуется более подробное описание процесса редукции с группы на подгруппу. Пусть $\{|jm\rangle : m = j, j-1, \dots, -j\}$ обозначает совокупность ортонормированных базисных векторов в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_{j,\sigma}$, которая преобразуется неприводимо относительно конкретного действия группы $O(3)$ (для простоты мы опускаем σ в обозначении для базисных векторов):

$$R : |jm\rangle \rightarrow \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{j,\sigma}(R) |jm'\rangle, \text{ для каждого } R \in O(3) \quad (7.10.275)$$

Тогда задача редукции для $O(3) \supset G$ сводится к определению всех линейных комбинаций вида

$$|\kappa; \Gamma^\alpha \gamma\rangle = \sum_m \langle jm | \Gamma^\alpha \gamma \rangle_\kappa |jm\rangle \quad (7.10.276)$$

таких, что функции и коэффициенты в этом соотношении имеют следующие свойства.

1. Индексы γ и κ пробегает значения

$$\gamma = 1, 2, \dots, \dim \Gamma^\alpha; \quad \kappa = 1, 2, \dots, m_j(\Gamma^\alpha) \quad (7.10.277)$$

и нумеруют линейно независимые функции для каждого неприводимого представления Γ^α ($\alpha = 1, 2, \dots, k$). Эти функции обычно выбирают ортонормированными:

$$\langle \kappa'; \Gamma^\alpha \gamma' | \kappa; \Gamma^\alpha \gamma \rangle = \delta_{\alpha'\alpha} \delta_{\gamma'\gamma} \delta_{\kappa'\kappa}. \quad (7.10.278)$$

2. Множество функций

$$\{|\kappa; \Gamma^\alpha \gamma\rangle : \gamma = 1, 2, \dots, \dim \Gamma^\alpha\} \quad (7.10.279)$$

преобразуется неприводимо относительно действия группы G :

$$g: |\kappa; \Gamma^\alpha \gamma\rangle \rightarrow \sum_{\gamma'} \Gamma_{\gamma\gamma'}^\alpha(g) |\kappa; \Gamma^\alpha \gamma'\rangle, \text{ для каждого } g \in G, \quad (7.10.280)$$

3. Коэффициенты $\{\langle jm | \Gamma^\alpha \gamma \rangle\}$ называются коэффициентами приведения для редукции группы $O(3)$ на G и являются элементами унитарной матрицы размерности $2j + 1$. Таким образом, равенство (7.10.276) есть унитарное преобразование пространства $\mathcal{H}_{j,\sigma}$, такое, что на новом базисе $\{|\kappa; \Gamma^\alpha \gamma\rangle\}$ реализуется унитарное неприводимое представление группы $O(3)$, эквивалентное $\mathcal{D}_{j,\sigma}$, и такое, что пространство $\mathcal{H}_{j,\sigma}$ разложено на подпространства, в которых реализуются неприводимые представления группы G .

Появление индекса кратности κ в линейных комбинациях (7.10.276) означает, что имеется $m_j(\Gamma^\alpha)$ ортогональных подпространств пространства $\mathcal{H}_{j,\sigma}$, каждое из которых реализует неприводимое представление Γ^α группы G . Нельзя получить в явном виде редукцию неприводимого представления $\mathcal{D}_{j,\sigma}$ группы $O(3)$ на неприводимые представления Γ^α подгруппы G без одновременного уточнения того, как следует нарушать кратность, характеризуемую индексом κ , поскольку произвольное унитарное преобразование вида $U = (u_{\kappa'\kappa})$

$$U: |\kappa; \Gamma^\alpha \gamma\rangle \rightarrow \sum_{\kappa'} u_{\kappa'\kappa} |\kappa'; \Gamma^\alpha \gamma\rangle, \quad (7.10.281)$$

будет давать новый базис пространства $\mathcal{H}_{j,\sigma}$, с такими же трансформационными свойствами относительно g , как и старый базис. Методы разрешения этой общей «проблемы кратностей» рассмотрены в литературе (см. [61, 62] и цитируемые там работы).

В физических задачах описанное выше «вырождение» по κ обычно нарушается посредством введения оператора A со следующими свойствами:

- 1) $A: \mathcal{H}_{j,\sigma} \rightarrow \mathcal{H}_{j,\sigma}$,
- 2) A эрмитов на $\mathcal{H}_{j,\sigma}$,
- 3) A инвариантен относительно G .

Из этих свойств следует, что A можно диагонализировать на пространстве $\mathcal{H}_{j,\sigma}$, и каждое отдельное собственное значение определяет подпространство пространства $\mathcal{H}_{j,\sigma}$, инвариантное относительно действия группы G . При благоприятных обстоятельствах эти инвариантные подпространства являются также неприводимыми. В таких случаях A играет такую же роль в редукции с группы $O(3)$ на подгруппу G , какую играет J_3 в стандартной редукции $O(3) \supset O(2)$. (Классическим примером этой структуры в молекулярной физике является диагонализация оператора Гамильтона для асимметричного ротатора $A = aJ_1^2 + bJ_2^2 + cJ_3^2$ на пространстве $\mathcal{H}_{j,\sigma}$; в этом случае G изоморфна клейновской четверной группе и имеет инвариантное действие $J_i - \lambda_i J_i$, $\lambda_i = \pm 1$, $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1$ на оператор A . Задача об асимметричном ротаторе рассмотрена со всевозможных точек зрения (см. [13, 15, 40] и цитированные там работы). Рассмотрение, в котором подчеркнута описанная нами точка зрения, проведено недавно в работе [63].)

Молекулярная задача с возмущением (7.10.271) относится к описанному выше типу. Покажем это. Пусть G^4 определено равенством (7.10.260), где в настоя-

шем рассмотрении T_μ^4 может обозначать любой неприводимый тензорный оператор, действующий на гильбертово пространство физической системы, которое разлагается полным угловым моментом J и четностью σ в прямую сумму пространств $\{\mathcal{H}_{j,\sigma}\}$. Мы требуем лишь, чтобы G^4 был эрмитовым оператором с не исчезающими матричными элементами, диагональными по j : $\langle j, m + \mu | G^4 | j m \rangle \neq 0$. Оператор A , определяемый в виде

$$A | j m \rangle = \sum_m \langle j m' | G^4 | j m \rangle | j m' \rangle \quad (7.10.283)$$

удовлетворяет условиям (7.10.282) для кубических групп $G = O_h, O, T_d$. Заметим, что с точностью до несущественного мультипликативного редуцированного матричного элемента оператор A есть

$$A = \sqrt{\frac{14}{5}} \mathcal{T}_{4,0}(\mathbf{J}) + \mathcal{T}_{4,4}(\mathbf{J}) + \mathcal{T}_{4,-4}(\mathbf{J}). \quad (7.10.284)$$

Ключевой результат, который нам теперь потребуются, доказан Крамером и Мошинским [64]: *собственные значения оператора A различны и каждое собственное значение определяет подпространство в $\mathcal{H}_{j,\sigma}$, которое неприводимо относительно действия группы G (G -неприводимо) для $G = O_h, O$ или T_d^1 .*

Свяжем теперь описанные результаты с молекулярной задачей с возмущением (7.10.271). Вычисление матричных элементов возмущения T (7.10.271) в связанном базисе (7.10.207) представляет собой стандартное приложение теоремы Вигнера — Эккарта (разд. 15 гл. 3) с использованием редуцированных матричных элементов, выписанных в (3.248). В результате имеем (опуская квантовые числа M и σ)

$$\begin{aligned} \langle n(l'J')R'M_R' | V | n(lJ)RM_R \rangle &= \delta_{J'J} \langle n(l'J)R' || V || n(lJ)R \rangle \\ &\times \left(\sqrt{\frac{14}{5}} C_{M_R'0M_R}^{R+R'} + C_{M_R'4M_R}^{R+R'} + C_{M_R'-4M_R}^{R+R'} \right), \end{aligned} \quad (7.10.285)$$

¹⁾ Взаимодействие A инвариантно относительно действия O_h — это взаимодействие нарушает $O(3)$ -симметрию только до уровня группы O_h . Но оно расщепляет пространства $\mathcal{H}_{j,0}$ и $\mathcal{H}_{j,1}$ в точности одинаково (мы предполагаем, что σ всегда является точным квантовым числом для рассматриваемой системы). Таким образом, для изучения самих схем расщепления мы можем принять без потери общности, что $j + \sigma$ является четным, т.е. мы имеем дело с $SO(3) \supset O$. Поскольку неприводимые представления группы O_h неприводимы при сужении на подгруппу O (или T_d), то неприводимые представления O_h , содержащиеся в неприводимом представлении $\mathcal{D}^{j,\sigma}$ группы $O(3)$, получаются из неприводимых представлений O , содержащихся в неприводимом представлении $\mathcal{D}^j$ группы $SO(3)$, приписыванием дополнительного индекса g (gerade — четный) или u (ungerade — нечетный) в соответствии с тем, является ли $j + \sigma$ четным либо нечетным. Более того, поскольку только неприводимые 2×2 -представления E -типа группы O_h являются приводимыми при сужении O_h на любую из подгрупп T или T_h , а редукция на два одномерных неприводимых представления единственна, мы также видим, что редукция $O(3)$ -неприводимого представления на неприводимые представления подгруппы T и T_h также по существу решается диагонализацией оператора A .

где редуцированный матричный элемент дается формулой

$$\langle n(l'J)R' \| V \| n(lJ)R \rangle = \frac{5}{4} \sum_{k_1 k_2} t_{k_1 k_2 4} \langle n(l'J)R' \| T^{(k_1 k_2)4} \| n(lJ)R \rangle, \quad (7.10.286)$$

в которой

$$\begin{aligned} & \langle n(l'J)R' \| T^{(k_1 k_2)4} \| n(lJ)R \rangle \\ &= [9(2l' + 1)(2J + 1)(2R + 1)]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} l & J & R \\ k_1 & k_2 & 4 \\ l' & J & R' \end{matrix} \right\} \\ & \times \langle nl' \| T_{k_1}(\text{vib}) \| nl \rangle \langle J \| T_{k_2}(\text{rot}) \| J \rangle. \end{aligned} \quad (7.10.287)$$

Снова в духе теории возмущений первого порядка (гамильтониан (7.10.196) и $O(3)$ -инвариантные взаимодействия (7.10.258), за исключением $T_0^{(22)0}$, диагональны в связанном базисе (7.10.207)) мы вначале рассматриваем только те матричные элементы (7.10.285), которые диагональны по l и R ($l' = l, R' = R$). (Такое приближение называется доминантным приближением.) Следовательно, в доминантном приближении, которое включает все $O(3)$ -тензорные G -инвариантные взаимодействия вплоть до пятой степени, мы получаем следующую энергию для трехкратно вырожденной осцилляциии во взаимодействии с вращательным движением в сферической волчковой молекуле:

$$E[n(lJ)R; \Gamma^2 \kappa] = E_s[n(lJ)R] + t[n(lJ)R] E(R \Gamma^2 \kappa), \quad (7.10.288)$$

где

$$t[n(lJ)R] \equiv \left[\frac{24}{5} (2R + 1) \right]^{\frac{1}{2}} \langle n(lJ)R \| V \| n(lJ)R \rangle, \quad (7.10.289)$$

а $E(R \Gamma^2 \kappa)$ — собственное значение вещественной симметрической $(2R + 1) \times (2R + 1)$ -матрицы A с элементами

$$A_{M_R M_R} = \left[\frac{5}{24(2R + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{14}{5}} C_{M_R 0 M_R}^{R 4 R} + C_{M_R 4 M_R}^{R 4 R} + C_{M_R, -4, M_R}^{R 4 R} \right). \quad (7.10.290)$$

Полагая для краткости

$$|RM_R\rangle = |(nM\sigma)(lJ)RM_R\rangle, \quad M_R = R, \dots, -R, \quad (7.10.291)$$

мы видим теперь, что элементами матрицы A являются

$$A_{M_R M_R} = \langle RM'_R | T | RM_R \rangle, \quad (7.10.292)$$

где¹⁾

¹⁾ Здесь $(x)_a = x(x + 1) \dots (x + a - 1)$.

Поскольку $R = L + K$, из соотношений (7.10.253) и (7.10.254) вытекает, что действием точечной группы G на R является $L_g: R \rightarrow [\det R(g)]R(g)R$ для каждого $g \in G$. В частности, векторное представление группы O_h (см. примечание на стр. 543) дает явные преобразования вектора R в виде $(\sigma_1 R_{i_1}, \sigma_2 R_{i_2}, \sigma_3 R_{i_3})$, причем (i_1, i_2, i_3) четная или нечетная, а $\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 = +1$ или -1 соответственно. Поскольку оператор T может быть записан в декартовой форме как $R_1^4 + R_2^4 + R_3^4$ с точностью до умножения на постоянную и суммы $O(3)$ -инвариантов, инвариантность T относительно O_h легко проверить в явном виде. Заметим также, что преобразование $R \rightarrow -R$ есть следствие обращения времени, а не преобразования внутренних координат.

$$T \equiv \left[\frac{5}{24(2R-3)_9} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{14}{5}} \mathcal{T}_{40}(\mathbf{R}) + \mathcal{T}_{44}(\mathbf{R}) + \mathcal{T}_{4,-4}(\mathbf{R}) \right) \quad (7.10.293)$$

В последнем выражении $\mathcal{T}_{k\mu}(\mathbf{R})$ — тензорная гармоника (табл. 5 в приложении таблиц при $\mathbf{J} = \mathbf{R}$). Таким образом, задача диагонализации A эквивалентна задаче диагонализации эрмитового оператора T на $(2R+1)$ -мерном пространстве, натянутом на базисные векторы (7.10.291). (Оператор T определен таким образом, что он в точности совпадает с оператором T работы [58], если положить $\mathbf{R} = \mathbf{J}$; собственные значения T табулированы Кроном [65] для всех значений $R = 1, 2, \dots, 100$; с точностью до фазы $(-1)^R$ они совпадают с $F^{(4)}$ -коэффициентами, введенными Море-Байи [60].)

Воспользовавшись теперь результатом Крамера — Мошинского, сформулированным выше, мы заключаем: $O(3)$ -тензорное G -инвариантное взаимодействие V , задаваемое формулой (7.10.271), расщепляет каждый уровень $E_S[n(IJ)R]$ на единственный набор подуровней, и каждый подуровень описывается линейной комбинацией базисных векторов $\{|RM_R\rangle: M_R = R, \dots, -R\}$, которые являются G -неприводимыми для $G = O_h, O$, или T_d .

Этот результат означает, что собственные значения оператора T можно однозначно описывать с помощью обозначения $E(R\Gamma^\alpha_k)$, где k характеризует кратность неприводимого представления Γ^α группы G в неприводимом представлении $\mathcal{R}^{R,\sigma}$ группы $O(3)$, причем каждое такое неприводимое представление отличается теперь самим собственным значением $E(R\Gamma^\alpha_k)$.

Из равенства (7.10.288) мы видим теперь, что каждый скалярный уровень $E_S[n(IJ)R]$ расщепляется на подуровни точно таким же образом при помощи набора собственных значений

$$\{E(R\Gamma^\alpha_k): \alpha = 1, 2, \dots, k; k = 1, 2, \dots, m_R(\Gamma^\alpha)\}, \quad (7.10.294)$$

причем расщепление для различных J и I пропорционально тому же самому базисному набору собственных значений¹⁾.

Таким образом основное внимание необходимо уделить определению собственных значений матрицы A , а эта задача сама по себе (см. соотношение (7.10.290)) является чисто алгебраической и основывается на свойствах коэффициентов Вигнера и редукции с группы на подгруппу $O(3) \supset G$ (дальнейшее обсуждение этой последней теоретико-групповой задачи см. в приложении Б.)

Поскольку вначале не было каких-либо оснований ожидать значительной регулярности в спектре (7.10.294), вызывает удивление, что численный расчет этих уровней выявляет большую степень регулярности не только в размещении этих

¹⁾ Интерпретация полученных с помощью лазера колебательно-вращательных полос поглощения требует подробного знания масштабного множителя $\{n(IJ)R\}$, который, как видно из соотношений (7.10.289) и (7.10.286), зависит от известных редуцированных матричных элементов (см. табл. 8 в приложении таблиц). Именно значения этих множителей $\{n(IJ)R\}$ подлежат определению из данных эксперимента [47] (см. разд.х). Изложение этих подробностей выходит за рамки настоящего обсуждения.

уровней (кластеры почти вырожденных уровней), но также и в их порядке. В табл. 7.2 дан спектр оператора T (собственные значения матрицы A) для $R (= j) = 100$, где A_1, A_2, E, F_1 и F_2 — характеристики¹⁾ неприводимых представлений $\{\Gamma^\alpha: \alpha = 1, \dots, 5\}$ группы октаэдра O (см. примечание на стр. 550). Читая табл. 7.2 сверху вниз, можно видеть, что уровни объединяются в шесть групп почти вырожденных уровней четырех типов симметрии (прямая сумма)

$$A_1 + F_1 + E, \quad F_2 + F_1, \quad E + F_2 + A_2, \quad F_2 + F_1, \quad (7.10.295)$$

причем эта группировка уровней по общему приближенному собственному значению заметно ухудшается после примерно пяти повторений этих четырех уровней (7.10.295) группы O . С другой стороны, читая табл. 7.2 снизу вверх, видим, что уровни объединяются в восемь почти вырожденных уровней трех типов симметрии

$$F_2 + E + F_1, \quad A_1 + F_1 + F_2 + A_2, \quad F_2 + E + F_1, \quad (7.10.296)$$

причем эта группировка уровней по общему приближенному собственному значению заметно ухудшается после двух полных повторений этих трех уровней (7.10.296) группы O , и частичное повторение заключается в двух первых (приближенных) уровнях (7.10.296). Заметим также, что сумма неприводимых представлений, появляющихся либо в (7.10.295), либо в (7.10.296), есть не что иное, как регулярное представление группы O .

Изучение этого явления образования кластеров для различных значений $j(R)$ показывает, что «квазивырождение» в данном кластере улучшается с увеличением j , но, очевидно, уже для $j = 10$ [58]. Кластерные вырождения типа того, которое иллюстрирует табл. 7.2, было впервые замечено в компьютерных вычислениях для $j = 2, 5/2, \dots, 8$ в работе Ли и др. [66] и повторно Дорни и Ватсоном [67] ($j = 1, \dots, 20$) (кластеры можно получить также и из таблицы ($j = 1, \dots, 21$), которую приводят Море-Байи и др. [62], но в явном виде ими кластеры замечены не были). Ставшие недавно доступными спектры высокого разрешения молекул типа сферического волчка [68] и интерпретация таких спектров [69, 70] впервые потребовали понимания спектра оператора T для больших значений углового момента j . Таким образом, возобновился интерес к более детальному пониманию явления образования кластеров. (Самые многочисленные компьютерные вычисления были осуществлены Кроном [65].)

Как подчеркнули Хартер и Паттерсон [71], физическое объяснение образования кластеров сводится к *локализации значений векторов состояний кластера вокруг классически стабильной оси симметрии молекулы*. Предположение о том, что молекулы в состояниях с большим значением углового момента стремятся вращаться вокруг устойчивой оси симметрии молекулы, было сделано Дорни и Ватсоном [67] (классический результат принадлежит Клейну и Зоммерфельду [72]; устойчивой осью для возмущенного ротатора является направление из начала координат в точку, которая минимизирует или максимизирует возмущение). Эту идею развили и превратили в полезный вычислительный метод Хартер и Паттерсон [73, 74] а также Гэлбрейт и др. [75]. Общая применимость

¹⁾ Связь этих характеристик неприводимого представления группы O с характеристиками представлений для изоморфной симметрической группы S_4 дана в примечании на стр. 563.

Таблица 7.2.

Собственные значения (умноженные на 100) оператора T при $j = 100$. Тип симметрии обозначен буквой слева от каждого собственного значения

A_1	5.125 690 090 113 115 680 256 257 41	F_2	- 0.747 916 422 095 131 911 371 734 66
F_1	5.125 690 090 113 115 680 256 246 55	F_1	- 0.748 829 443 283 038 391 070 882 10
E	5.125 690 090 113 115 680 256 241 11	E	- 0.921 740 940 781 814 669 346 563 49
F_2	4.613 143 588 753 669 695 986 086 41	F_2	- 0.923 367 440 228 536 798 770 416 95
F_1	4.613 143 588 753 669 695 984 526 12	A_2	- 0.926 750 544 469 145 034 187 247 51
E	4.123 813 565 974 013 576 249 958 69	F_2	- 1.073 780 721 465 328 536 413 833 16
F_2	4.123 813 565 974 013 576 195 545 78	F_1	- 1.083 217 941 412 453 593 557 705 35
A_2	4.123 813 565 974 013 576 086 719 95	A_1	- 1.190 130 139 104 612 221 122 307 78
F_2	3.657 180 034 191 149 605 188 983 55	F_1	- 1.211 465 541 115 730 083 575 430 55
F_1	3.657 180 034 191 149 600 281 883 37	E	- 1.223 807 792 495 174 406 634 504 30
A_1	3.212 732 649 388 184 644 879 787 44	F_2	- 1.298 669 531 856 416 780 417 344 07
F_1	3.212 732 649 388 184 484 121 005 93	F_1	- 1.357 463 645 331 767 352 225 532 58
E	3.212 732 649 388 184 403 741 615 18	E	- 1.398 953 665 318 508 955 615 312 30
F_2	2.789 971 626 892 359 674 156 371 85	F_2	- 1.413 942 186 561 829 616 697 199 63
F_1	2.789 971 626 892 355 597 481 874 43	A_2	- 1.530 407 059 651 272 556 104 560 10
E	2.388 408 909 335 097 267 599 682 75	F_2	- 1.542 737 626 348 819 454 833 532 19
F_2	2.388 408 909 335 055 641 500 819 30	F_1	- 1.552 860 244 399 062 344 812 493 06
A_2	2.388 408 909 334 972 389 303 092 32	A_1	- 1.561 835 047 007 528 733 480 626 01
F_2	2.007 569 673 405 330 918 805 171 95	F_1	- 1.735 872 930 017 428 548 567 057 65
F_1	2.007 569 673 403 924 645 927 347 27	E	- 1.738 329 462 409 720 394 247 929 18
A_1	1.646 994 299 230 227 427 363 868 59	F_2	- 1.740 792 637 826 024 220 948 537 19
F_1	1.646 994 299 210 200 870 576 139 99	F_1	- 1.958 800 917 925 736 438 246 769 67
E	1.646 994 299 200 187 592 180 041 52	E	- 1.959 211 917 221 652 421 431 964 77
F_2	1.306 240 983 446 697 745 268 577 70	F_2	- 1.959 617 474 398 551 574 555 539 92
F_1	1.306 240 983 202 868 013 774 524 95	A_2	- 2.205 690 537 106 250 549 362 472 70
E	0.984 889 268 710 685 073 571 903 90	F_2	- 2.205 740 107 216 926 575 826 673 52
F_2	0.984 889 267 428 308 849 092 921 45	F_1	- 2.205 789 633 426 881 222 180 206 50
A_2	0.984 889 264 863 556 326 927 654 06	A_1	- 2.205 839 115 846 819 559 087 037 52
F_2	0.682 544 915 774 415 105 086 555 01	F_1	- 2.475 887 153 282 221 645 230 334 37
F_1	0.682 544 892 285 740 302 042 659 88	E	- 2.475 891 508 594 447 061 256 675 41
A_1	0.398 846 926 458 295 844 008 468 22	F_2	- 2.475 895 863 794 787 859 379 167 96
F_1	0.398 846 738 104 829 771 571 132 97	F_1	- 2.768 492 514 561 974 034 171 497 12
E	0.398 846 643 927 897 998 386 189 49	E	- 2.768 492 779 390 955 664 450 115 70
F_2	0.133 477 415 121 653 930 832 118 01	F_2	- 2.768 493 044 217 690 926 871 150 73
F_1	0.133 476 087 600 358 713 277 347 41	A_2	- 3.082 960 347 082 066 430 850 404 83
		F_2	- 3.082 960 357 090 862 681 561 542 41
		F_1	- 3.082 960 367 099 656 707 919 444 58
		A_1	- 3.082 960 377 108 448 509 925 335 12

$$E = 0.113\,820\,550\,714\,971\,537\,012\,721\,75$$

$$F_2 = 0.113\,824\,670\,725\,801\,047\,764\,678\,17$$

$$A_2 = 0.113\,832\,911\,516\,736\,218\,647\,037\,97$$

$$F_2 = 0.343\,211\,700\,124\,708\,016\,123\,815\,95$$

$$F_1 = 0.343\,256\,749\,021\,544\,314\,879\,348\,59$$

$$A_1 = 0.554\,586\,765\,960\,791\,560\,014\,224\,37$$

$$F_1 = 0.554\,802\,947\,346\,126\,586\,805\,606\,85$$

$$E = 0.554\,911\,306\,144\,353\,572\,766\,778\,27$$

$$F_1 = 3.418\,969\,545\,015\,500\,357\,195\,826\,09$$

$$E = 3.418\,969\,545\,193\,238\,111\,742\,763\,24$$

$$F_2 = 3.418\,969\,545\,370\,975\,865\,769\,605\,86$$

этой концепции к другим областям физических явлений (теория кристаллического поля и т.п.) также подчеркивалась Хартером и Паттерсоном [73] и Джаддом [73а].

т. Оси симметрии и индуцированные представления. Математическое описание физически интуитивной картины, описанной выше, требует рассмотрения векторов состояния углового момента физической системы, соответствующих различным выборам осей квантования (различным z -осям). Если через $\{|jm\rangle\}$ обозначить стандартные векторы состояния углового момента физической системы относительно произвольной декартовой системы отсчета $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$ ($J_3 = m$), то векторы состояния углового момента $\{|jm; \hat{a}\rangle: m = j, \dots, -j\}$ той же физической системы по отношению к оси квантования $\hat{a}$ даются в виде

$$|jm; \hat{a}\rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^j(R^{\hat{a}}) |jm'\rangle, \quad (7.10.297)$$

где $R^{\hat{a}} = (R_{ij}^{\hat{a}})$ — ортогональная матрица, которая списывает ориентацию оси $\hat{a}$ относительно системы отсчета $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$:

$$\hat{a} = R_{13}^{\hat{a}} \hat{e}_1 + R_{23}^{\hat{a}} \hat{e}_2 + R_{33}^{\hat{a}} \hat{e}_3. \quad (7.10.298)$$

Например, в молекулярной задаче $|jm\rangle$ обозначает вектор состояния $|RM_R\rangle$ (7.10.291), система отсчета $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$ есть движущаяся эккартова система отсчета (f_1, f_2, f_3) (именно внутренние оси квантования представляют интерес), а $\hat{a}$ — ось симметрии молекулы, имеющей фиксированную (числовую) ориентацию относительно эккартовой системы отсчета.

Вернемся теперь к общему обозначению углового момента, чтобы подчеркнуть общность результатов. Как будет показано ниже, объяснение регулярностей в спектре оператора T объединяет методы теории углового момента (трансформационные свойства, асимптотические свойства и т.д.), теорию индуцированных представлений Фробениуса и физическую интуицию. (Наше изложение основано на работах Хартера и Паттерсона [73, 74].)

Чтобы фиксировать обозначения, целесообразно напомнить некоторые элементарные свойства осей симметрии точечной группы G (с тождественным элементом e). (Группа G в последующем обсуждении может быть любой подгруппой группы $O(3)$, где элементы из $O(3)$ имеют действие, определенное на евклидовом трехмерном пространстве.)

Оси симметрии группы G . Ось $\hat{a}$ называют осью симметрии точечной группы G , если существует по крайней мере одно $g \in G$, $g \neq e$, такое, что $g\hat{a} = \hat{a}$. Следовательно, множество A осей симметрии группы G имеет вид

$$A = \{\hat{a}: g\hat{a} = \hat{a} \text{ хотя бы для одного } g \in G, g \neq e\}. \quad (7.10.299)$$

Тогда группа G является группой преобразований на A ; иначе говоря $g: A \rightarrow A$ для каждого $g \in G$ (множество A является G -пространством).

Эквивалентность осей симметрии. Две оси симметрии $\hat{a}$ и $\hat{b}$ эквивалентны $\hat{a} \sim \hat{b}$, если существует элемент $g \in G$, такой, что $g\hat{a} = \hat{b}$.

G -орбиты множества A . G -орбитой, содержащей $\hat{a}$, является подмножество множества A , определяемое согласно

$$G_{\text{orb}}(\hat{a}) = \{\text{все различные оси } g\hat{a}: g \in G\}. \quad (7.10.300)$$

Таким образом, $G_{\text{orb}}(\hat{a})$ содержит все оси симметрии группы G , которые эквивалентны оси $\hat{a}$.

Группа изотропии $G^{\hat{a}}$. Группой изотропии $G^{\hat{a}}$ оси $\hat{a}$ является подгруппа группы G , определенная согласно

$$G^{\hat{a}} = \{g \in G: g\hat{a} = \hat{a}\}. \quad (7.10.301)$$

Смежный класс подгруппы H . Пусть H есть подгруппа в G . Левым смежным классом подгруппы H в G является множество элементов группы G , задаваемых в виде

$$gH = \{gh: h \in H\}.$$

Два смежных класса либо совпадают, либо не пересекаются; в соответствии с этим группа G может быть (единственным образом) разложена на непересекающиеся между собой левые смежные классы $S_1, S_2, \dots, S_\sigma$, где $S_i = g_i H$, $g_i \in G$, $S_i \neq S_j$ и $\sigma = |G|/|H|$, причем $|S|$ обозначает число элементов в множестве S . Через G/H обозначено множество, элементами которого являются левые смежные классы подгруппы H в G :

$$G/H = \{S_1, S_2, \dots, S_\sigma\}. \quad (7.10.302)$$

(Аналогичные результаты справедливы для правых смежных классов.)

При обсуждении осей квантования важными являются следующие три принципиальных результата, связывающие введенные выше множества.

1. Если g преобразует ось симметрии $\hat{a}$ в ось симметрии $\hat{b}$, т.е. $\hat{b} = g\hat{a}$, то (см. разд. 2 гл. 2)

$$gG^{\hat{a}}g^{-1} = G^{\hat{b}} = G^{g\hat{a}}. \quad (7.10.303)$$

Таким образом, оси в одной и той же G -орбите имеют сопряженные, а следовательно, изоморфные, группы изотропии.

2. Число левых смежных классов в множестве $G/G^{\hat{a}}$ равно числу (эквивалентных) осей в G -орбите $G_{\text{orb}}(\hat{a})$, содержащей $\hat{a}$. Из этого результата следует, что смежные классы $S_1^{\hat{a}}, S_2^{\hat{a}}, \dots$ в множестве $G/G^{\hat{a}}$ могут быть перенумерованы с помощью обозначения

$$G/G^{\hat{a}} = \{S_b^{\hat{a}}: \hat{b} \in G_{\text{orb}}(\hat{a})\}. \quad (7.10.304)$$

Следовательно, число элементов в $G_{\text{orb}}(\hat{a})$ равно $|G|/|G^{\hat{a}}|$.

3. Пусть s_b — фиксированный представитель смежного класса $S_b^{\hat{a}}$ группы $G^{\hat{a}}$. Тогда

$$\phi_b: g \rightarrow (s_b)^{-1} g s_b \equiv \phi_b(g) \quad (7.10.305)$$

есть отображение группы G в подгруппу $G^{\hat{a}}$ для каждой $b \in G_{\text{orb}}(\hat{a})$. Более того, это отображение удовлетворяет соотношению

$$\phi_b(g') \phi_b(g) = \phi_b(g'g). \quad (7.10.306)$$

Рассмотрим теперь «проблему выбора оси квантования» для случая, когда в качестве осей квантования выбраны элементы множества A осей симметрии точечной группы G . Используя взаимно-однозначное соответствие между элементами из $G_{\text{orb}}(\hat{a})$ и $G/G^{\hat{a}}$, задаваемое описанным выше результатом 2, теперь удобно обозначить совокупность векторов состояния углового момента типа (7.10.297), соответствующих эквивалентным осям, следующим образом:

$$|jm; S_b^{\hat{a}}\rangle \equiv |jm; \hat{b}\rangle, \quad (7.10.307)$$

для каждой $b \in G_{\text{orb}}(\hat{a})$ и, следовательно, каждого $S_b^{\hat{a}} \in G/G^{\hat{a}}$. Скалярное произведение двух базисных векторов (7.10.307) получается из определения (7.10.297) и свойства $R^{g\hat{a}} = R^{\hat{a}}\tilde{R}(g)$:

$$\langle jm'; S_{g\hat{a}}^{\hat{a}} | jm; S_{\hat{a}}^{\hat{a}} \rangle = \mathcal{D}_{m'm}^j(\tilde{R}(g')R(g)). \quad (7.10.308)$$

Таким образом, совокупность базисных векторов

$$\{|jm; S_b^{\hat{a}}\rangle: b \in G_{\text{orb}}(\hat{a})\}, \quad j, m \text{ и } \hat{a} \text{ фиксированы}, \quad (7.10.309)$$

не является ортонормированной. Но мы будем предполагать, что векторы в этой совокупности являются линейно независимыми.

Затем мы построим представление группы G с помощью векторов состояния углового момента (7.10.307) и представления подгруппы изотропии $G^{\hat{a}}$. Но для простоты предположим, что $G = G_+$ есть группа чистых вращений. В этом случае группой изотропии оси $\hat{a}$ всегда является одна из циклических абелевых групп, обозначаемых через C_n , с элементами, порождаемыми вращением $\mathcal{R}_n \equiv \mathcal{R}(2\pi/n, \hat{a})$ вокруг $\hat{a}$ на угол $2\pi/n$.

Более конкретно группой изотропии $G^{\hat{a}}$ является группа $C_n(\hat{a})$ вращений вокруг направления $\hat{a}$ на углы $2\pi s/n$ ($s = 0, 1, \dots, n-1$):

$$G^{\hat{a}} = C_n(\hat{a}) = \left\{ \mathcal{R}_n^s = \left[\mathcal{R}\left(\frac{2\pi}{n}, \hat{a}\right) \right]^s : s = 0, 1, \dots, n-1 \right\}. \quad (7.10.310)$$

Относительно действия $\mathcal{R}_n^s$ вектор состояния углового момента подвергается унитарному преобразованию:

$$\begin{aligned} |jm; \hat{a}\rangle &\rightarrow \exp \left[-\frac{2\pi i s}{n} (\hat{a} \cdot \mathbf{J}) \right] |jm; \hat{a}\rangle \\ &= (e^{-2\pi i m n})^s |jm; \hat{a}\rangle. \end{aligned} \quad (7.10.311)$$

Таким образом, вектор состояния $|jm; \hat{a}\rangle$ преобразуется согласно неприводимому представлению k_n группы $C_n(\hat{a})$, задаваемому соотношением

$$k_n \equiv \{(e^{-2\pi i k/n})^s : s = 0, 1, \dots, n-1\}, \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \quad (7.10.312)$$

тогда и только тогда, когда

$$m \equiv k \pmod{n}, \quad m \geq 0. \quad (7.10.313)$$

Используя базис (7.10.309), мы можем теперь получить представление G_+ при помощи следующей хорошо известной процедуры. Определяем линейный оператор $L(g)$ для каждого $g \in G_+$, задавая его действие на каждый базисный вектор из множества (7.10.309):

$$L(g)|jm; S_b^{\hat{a}}\rangle = \chi_{k_n}(\phi_b(g))|jm; gS_b^{\hat{a}}\rangle, \quad (7.10.314)$$

для каждого $b \in G_{\text{orb}}(\hat{a})$. В данном определении m может быть любым целым числом $m \equiv k \pmod{n}$, где k — фиксированное целое число из набора $\{0, 1, \dots, n-1\}$, а $\chi_{k_n}(\mathcal{R}_n^s)$ обозначает характер вращения $\mathcal{R}_n^s$ в неприводимом представлении k_n . Таким образом,

$$\chi_{k_n}(\mathcal{R}_n^s) = (e^{-2\pi i k/n})^s \in k_n. \quad (7.10.315)$$

Заметим, что, поскольку $\phi_b(g) \in C_n(\hat{a})$, появляющийся в (7.10.314) характер принадлежит неприводимому представлению k_n группы $C_n(\hat{a})$, так что $\chi_{k_n}(\phi_b(g))$ определено.

Групповое умножение для представлений

$$L(g')L(g) = L(g'g), \quad \text{для всех } g', g \in G_+ \quad (7.10.316)$$

можно теперь проверить из равенства (7.10.314), если воспользоваться следующими свойствами смежных классов и характеров:

$$gS_b^{\hat{a}} = S_{gb}^{\hat{a}}, \quad (7.10.317)$$

$$\begin{aligned} \chi_{k_n}(\phi_{gb}(g'))\chi_{k_n}(\phi_b(g)) &= \chi_{k_n}(\phi_{gb}(g')\phi_b(g)) \\ &= \chi_{k_n}(\phi_b(g'g)). \end{aligned} \quad (7.10.318)$$

Следовательно,

$$L(G_+) = \{L(g) : g \in G_+\} \quad (7.10.319)$$

есть представление группы G_+ . Размерность $L(G_+)$ равна $|G_+|/|G_+^{\hat{a}}|$, поскольку в преобразование $L(g)$ входят только базисные векторы в совокупности (7.10.309) с фиксированным $m \equiv k \pmod{n}$.

Представление группы G_+ , полученное выше с помощью неприводимого представления k_n группы C_n , часто обозначается в виде

$$L(G_+) = k_n \uparrow G_+. \quad (7.10.320)$$

Заметим, что $L(G_+)$ не зависит от того, какая из изоморфных групп изотропии $G_+^{\hat{a}} \cong G_+^{\hat{b}}$ $\hat{b} \in G_{\text{orb}}(\hat{a})$, используется при построении: в преобразование $L(g)$ входят оди и те же базисные векторы $\{|jm; \hat{b}\rangle : \hat{b} \in G_{\text{orb}}(\hat{a})\}$ с одинаковыми коэффициентами. Общий метод построения представления группы G , исходя из представления $\Delta(H)$ подгруппы H , был найден Фробениусом. Представление $\Delta(H)|G$ называется представлением группы G , индуцированным при помощи представления $\Delta(H)$ подгруппы H .

Одним из наиболее важных результатов для представлений группы, получаемых посредством индуцирования с подгруппы, является *теорема взаимности Фробениуса*, которая утверждает следующее. *Кратность неприводимого представления Γ^α группы G в представлении $\Delta(H) \uparrow G$ группы G , индуцированном неприводимым представлением $\Delta(H)$ подгруппы H , равна кратности неприводимого представления $\Delta(H)$ в редукции Γ^α на неприводимые представления H .*

Поскольку базисные векторы (7.10.309) образуются из линейных комбинаций состояний исходного углового момента $\{|jm\rangle: m = j, \dots, -j\}$ (см. соотношение (7.10.297)), предыдущее построение, использующее теорию индуцированных представлений, позволяет строить многочисленные подпространства в $\mathcal{H}_{j,\sigma}$ (см. (7.10.275)), которые инвариантны относительно G_+ . Такое подпространство мы можем построить не только для каждого неприводимого представления любой из групп изотропии C_n , но также и для каждого значения $m \equiv k \pmod{n}$. Ясно, что таких пространств существует слишком много — они не могут быть независимыми. Выделение тех из этих подпространств, которые важны в физической задаче, осуществляется с помощью физической интуиции и будет здесь обосновано при помощи асимптотических свойств коэффициентов Вигнера.

Эта физическая интуиция обсуждалась выше, но теперь мы можем сформулировать более точно: 1) любое физическое G_+ -инвариантное взаимодействие V определяет различные классически устойчивые оси вращения, 2) векторы состояния углового момента $|jm; \hat{a}_0\rangle$ для каждой такой устойчивой оси $\hat{a}_0$ при больших j и при таких m , что $\cos\theta_m = m/\sqrt{j(j+1)}$ приближенно равен единице, имеют значения, локализованные в окрестности оси $\hat{a}_0$, и 3) каждый вектор состояния из совокупности

$$\{|jm; \hat{a}\rangle: \hat{a} \in G_{\text{orb}}(\hat{a}_0)\}, \quad j, m \text{ фиксированы; } \cos\theta_m = 1, \quad (7.10.321)$$

является приближенным собственным состоянием оператора V с собственным значением E , которое независимо от $\hat{a} \in G_{\text{orb}}(\hat{a}_0)$:

$$V|jm; \hat{a}\rangle \simeq E|jm; \hat{a}\rangle. \quad (7.10.322)$$

(Собственное значение E может, конечно, зависеть от j , m , а также от выбора устойчивой оси $\hat{a}_0$.)

Можно ожидать, что именно подпространства типа (7.10.321), ассоциированные с классически устойчивыми осями вращения и значениями m , близкими к j , будут полезны при построении G_+ -инвариантных подпространств для физической задачи.

Для применимости описанного выше в общих чертах метода необходимо иметь форму $V(\hat{a})$ взаимодействия V , отнесенного к произвольной оси симметрии. Обозначая через $\mathcal{U}(\hat{a})$ унитарное преобразование (7.10.297), т.е. $\mathcal{U}(\hat{a})|jm\rangle = |jm; \hat{a}\rangle$, имеем

$$V(\hat{a}) = \mathcal{U}(\hat{a})V\mathcal{U}^{-1}(\hat{a}). \quad (7.10.323)$$

В частности, поскольку V имеет общий вид

$$V = \sum_{k\mu} \alpha_{k\mu} T_{\mu}^k, \quad (7.10.324)$$

$V(\hat{a})$ имеет форму

$$V(\hat{a}) = \sum_{k\mu} \alpha_{k\mu} T_{\mu}^k(\hat{a}), \quad (7.10.325)$$

где матричными элементами в исходном базисе $\{|jm\rangle\}$ тензорного оператора $T_{\mu}^k(\hat{a})$, отнесенного к оси $\hat{a}$, являются

$$\langle j'm'|T_{\mu}^k(\hat{a})|jm\rangle = \mathcal{D}_{m'-m,\mu}^{\cdot}(R^{\hat{a}}) \langle j'm'|T_{m'-m}^k|jm\rangle. \quad (7.10.326)$$

Важность формулы (7.10.323) для настоящей задачи состоит в том, что поскольку V и $V(\hat{a})$ унитарно эквивалентны, они имеют один и тот же спектр. Следовательно, при определении собственных значений и собственных векторов оператора V можно воспользоваться любой из форм $V(\hat{a})$, $\hat{a} \in A$. Ниже мы увидим, что для получения приближенных собственных значений и собственных векторов оператора V при больших j необходимо использовать все формы $V(\hat{a})$, где $\hat{a}$ — устойчивая ось вращения. В качестве примера, мы имеем следующие результаты для взаимодействия T (соотношение (7.10.293), $R = J$). Устойчивые оси для этого взаимодействия определяются при помощи математически эквивалентной формулировки пертурбационной задачи, которая заменяет тензорные гармоники $\mathcal{T}_{k\mu}(J)$ на шаровые функции $\mathcal{Y}_{k\mu}(\mathbf{x})$. С точностью до $O(3)$ -инвариантного слагаемого взаимодействие T заменяется, таким образом, на $f(\mathbf{x}) = x_1^4 + x_2^4 + x_3^4$. Устойчивыми осями вращения возмущения T являются оси, соответствующие экстремальным точкам функции $f(\mathbf{x})$ при условии $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$. Так, устойчивые оси симметрии октаэдрически инвариантного (относительно группы октаэдра O) взаимодействия T определены в виде

$$O_{\text{orb}} \equiv \{\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3, -\hat{e}_1, -\hat{e}_2, -\hat{e}_3\}, \quad (7.10.327)$$

что соответствует точкам, которые максимизируют $f(\mathbf{x})$, и

$$O'_{\text{orb}} \equiv \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} (\alpha \hat{e}_1 + \beta \hat{e}_2 + \gamma \hat{e}_3) : \alpha, \beta, \gamma = \pm 1 \right\}, \quad (7.10.328)$$

что соответствует точкам, минимизирующим $f(\mathbf{x})$.

Взаимодействие T , задаваемое соотношением (7.10.293) (с заменой R на J), уже отнесено к любой из O -эквивалентных осей, принадлежащих максимизирующей орбите O_{orb} ; его формой относительно любой из эквивалентных осей, принадлежащих минимизирующей орбите O'_{orb} , является

$$T' = -\frac{2}{3} \left[\frac{5}{24(2j-3)_0} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{14}{5}} \mathcal{T}_{40}(J) - 2\mathcal{T}_{4,3}(J) + 2\mathcal{T}_{4,-3}(J) \right) \quad (7.10.329)$$

с матричными элементами

$$\langle jm'|T'|jm\rangle = \frac{-2}{3} \left[\frac{5}{24(2j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{14}{5}} C_{m0m'}^{j4j} - 2C_{m3m'}^{j4j} + 2C_{m,-3,m'}^{j4j} \right). \quad (7.10.330)$$

у. Эффекты при больших угловых моментах¹⁾. Важным результатом для изучения физических явлений при больших значениях углового момента j является асимптотическое соотношение (см. разд. 8 гл. 5)

$$C_{m,\mu,m+\mu}^{jkj+\Delta} \sim d_{\mu\Delta}^k(\theta), \quad (7.10.331)$$

где $\cos\theta = m/\sqrt{j(j+1)}$. Если положить $m = j - \alpha$ и взять предел при бесконечном j , то получим (см. соотношение (3.305) гл.3)

$$\lim_{j \rightarrow \infty} C_{j-\alpha,\mu,j-\alpha+\mu}^{jkj+\Delta} = \delta_{\mu\Delta}, \quad (7.10.332)$$

где мы использовали $\cos\theta \rightarrow 1$, $d_{\mu\Delta}^k(0) = \delta_{\mu\Delta}$.

Применяя эти результаты к коэффициентам Вигнера, появляющимся во взаимодействии T (см. формулы (7.10.290) и (7.10.293)), и к коэффициентам Вигнера, появляющимся в T' (см. соотношения (7.10.329) и (7.10.330)), находим

$$C_{m0m}^{j4j} \sim d_{00}^4(\theta) = P_4(\cos\theta_m) \simeq 1.$$

$$C_{m,\mu,m+\mu}^{j4j} \sim d_{0\mu}^4(\theta_m) \simeq 0, \quad \cos\theta_m \simeq 1, \mu \neq 0. \quad (7.10.333)$$

Таким образом, можно ожидать, что для больших j приближенные собственные значения взаимодействия T даются диагональными матричными элементами самого T и его унитарно эквивалентной формы T' :

$$A_{mm} = \sqrt{\frac{7}{24(2j+1)}} C_{m0m}^{j4j},$$

$$A'_{mm} = -\frac{2}{3} A_{mm}, \quad (7.10.334)$$

где $m = j, j-1, j-2, \dots, j_0$ для некоторого неопределенного значения $m = j_0$, такого, что $j_0/\sqrt{j(j+1)} = 1$. (Выше в обсуждении на стр. 552 точные собственные значения оператора T мы обозначали через $E(R\Gamma^{\alpha\kappa})$).

Для состояний вращения вокруг «жестких» осей, принадлежащих максимизирующей орбите O_{orb} (см. соотношение (7.10.327)), ожидается, что соответствующие энергии наибольшие, тогда как для «мягких» осей, принадлежащих минимизирующей орбите O'_{orb} (см. соотношение (7.10.328)), соответствующие энергии должны быть наименьшими. Кроме того, поскольку $P_4(\cos\theta_m)$ монотонно убывает при $m = j, j-1, \dots$ в окрестности $\cos\theta_m = 1$, значения A_{mm} , $m = j, j-1, j-2, \dots$, должны аппроксимировать собственные значения оператора T в верхней части спектра (верхняя часть табл. 7.2), а значения A'_{mm} , $m = j, j-1, j-2, \dots$, должны аппроксимировать собственные значения T в нижней части спектра (внизу в табл. 7.2). Эти качественные черты спектра взаимодействия T проверялись при помощи явных вычислений [74], причем значения величин A_{mm} и A'_{mm} для $m = j, j-1, \dots$ нумеровали по порядку энергии кластеров в верхней и нижней частях спектра соответственно (например, 5,125, 4,613, 4,123, ... вверху и -3,418, -3,082, -2,768, ... внизу в табл. 7.2).

¹⁾ Ввиду общей справедливости результатов этого раздела, мы формулируем их в квантовых числах общего углового момента $j(=R)$ и $m(=M_R)$.

Можно также оценить ту точку в спектре оператора T , где происходит «переход» между значениями, задаваемыми посредством A_{mm} (жесткие оси), и значениями, задаваемыми посредством A'_{mm} (мягкие оси) [67, 74]. Такой переход происходит вблизи значения диагональных матричных элементов взаимодействия T , отнесенного к одной из осей двойной симметрии (седловая точка для $x_1^4 + x_2^4 + x_3^4$):

$$O''_{orb} = \{(\alpha\hat{e}_i + \beta\hat{e}_j)/\sqrt{2}: \alpha, \beta = \pm 1; (i, j) = (1, 2), (1, 3), (2, 3)\}. \quad (7.10.335)$$

Форма взаимодействия T по отношению к оси, принадлежащей переходной орбите O''_{orb} , имеет вид

$$T'' = -\frac{1}{4} \left[\frac{5}{24(2j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{14}{5}} \mathcal{T}_{40}(\mathbf{J}) - 2\sqrt{7} [\mathcal{T}_{4,2}(\mathbf{J}) + \mathcal{T}_{4,-2}(\mathbf{J})] - 3[\mathcal{T}_{4,4}(\mathbf{J}) + \mathcal{T}_{4,-4}(\mathbf{J})] \right) \quad (7.10.336)$$

с диагональным матричным элементом

$$A''_{mm} = -\frac{1}{4} A_{mm}. \quad (7.10.337)$$

При больших j переход происходит приближенно, но при $A''_{jj} = -1/4 A_{jj}$.

Описание приближенных векторов состояния, имеющих собственные значения A_{mm} и A'_{mm} , также можно дать, используя конструкцию из последнего раздела. Ниже мы перечисляем базисные состояния, которые образуют базисы пространств (см. построение (7.10.314)), в которых реализуются представления группы O обозначаемые посредством $k_4 \uparrow O$ (верхняя часть спектра) и $k_3 \uparrow O$ (нижняя часть спектра):

► Состояния для уровней в верхней части спектра оператора T :

$$\begin{aligned} k_4 \uparrow O [j \equiv k(\bmod 4)]: \{ |jj\rangle; \hat{a}\rangle: \hat{a} \in O_{orb} \} \\ k'_4 \uparrow O [j-1 \equiv k'(\bmod 4)]: \{ |jj-1\rangle; \hat{a}\rangle: \hat{a} \in O_{orb} \} \\ k''_4 \uparrow O [j-2 \equiv k''(\bmod 4)]: \{ |jj-2\rangle; \hat{a}\rangle: \hat{a} \in O_{orb} \} \\ k'''_4 \uparrow O [j-3 \equiv k'''(\bmod 4)]: \{ |jj-3\rangle; \hat{a}\rangle: \hat{a} \in O_{orb} \} \\ \vdots \end{aligned}$$

► Состояния для уровней в нижней части спектра оператора T :

$$\begin{aligned} k_3 \uparrow O [j \equiv k(\bmod 3)]: \{ |jj\rangle; \hat{a}\rangle: \hat{a} \in O'_{orb} \} \\ k'_3 \uparrow O [j-1 \equiv k'(\bmod 3)]: \{ |jj-1\rangle; \hat{a}\rangle: \hat{a} \in O'_{orb} \} \\ k''_3 \uparrow O [j-2 \equiv k''(\bmod 3)]: \{ |jj-2\rangle; \hat{a}\rangle: \hat{a} \in O'_{orb} \} \\ \vdots \end{aligned}$$

Например, для $j = 100$, представлениями группы O , ассоциированными с кластерами в верхней части спектра, являются по порядку $0_4 \uparrow O$, $3_4 \uparrow O$, $2_4 \uparrow O$, $1_4 \uparrow O$; $0_4 \uparrow O$, $3_4 \uparrow O$, $2_4 \uparrow O$, $1_4 \uparrow O$; ... Аналогично представлениями, ассоциированными с кластерами в нижней части спектра, являются по порядку $1_3 \uparrow O$,

$0_3 \uparrow O, 2_3 \uparrow O; 1_3 \uparrow O, 0_3 \uparrow O, 2_3 \uparrow O; \dots$ Теорема взаимности Фробениуса немедленно дает результаты¹⁾:

$$\begin{array}{ll} 0_4 \uparrow O = A_1 + E + F_1 & \vdots \\ 1_4 \uparrow O = F_1 + F_2 & 0_3 \uparrow O = A_1 + A_2 + F_1 + F_2 \\ 2_4 \uparrow O = A_2 + E + F_2 & 1_3 \uparrow O = E + F_1 + F_2 \\ 3_4 \uparrow O = F_1 + F_2 & 2_3 \uparrow O = E + F_1 + F_2. \\ \vdots & \end{array} \quad (7.10.338)$$

Отметим полное согласие с результатами, приведенными в табл. 7.2.

Качественное объяснение расщепления уровней, основанное на индуцированных представлениях, которое излагается в этом и предыдущем разделах, не предсказывает порядок и относительное расщепление *внутри* данного кластера. Кроме того, описанные здесь приближенные собственные значения и собственные векторы нуждаются в уточнении для достижения высокой точности разрешения, требуемой для интерпретации спектров (такой спектр обсуждается в разд. X). Модель, основанная на туннелировании между состояниями углового момента с локальными осями, $\{ |jm; \hat{a}\rangle : \hat{a} \in G_{\text{orb}}(\hat{a}) \}$ предложена в работе [73]. Эта модель объясняет качественно наблюдаемые относительные расщепления внутри кластера [58]. Физическая картина такова: молекула вращается вокруг одной внутренней оси, «перекидывается» к другой осн, вращается некоторое время, снова «перекидывается», вращается и т.д. [71].

Выражения для собственных значений (7.10.334) и соответствующих собственных векторов могут быть еще улучшены путем рассмотрения недиагональных членов во взаимодействиях (7.10.293) и (7.10.329) в качестве возмущения [74, 75]. Вычисления такого рода дают выражения для частот переходов в трехкратно вырожденной фундаментальной ν -полосе «тяжелой» молекулы типа сферического волчка, которые имеют точность, отвечающую современному разрешению в спектроскопии. В случае больших угловых моментов этот результат исключает необходимость вычисления коэффициентов кубической векторной связи (соотношение (7.10.276)) и диагонализации больших матриц [75].

Мы заключаем, что *понятия теории углового момента приводят к истолкованию некоторых аспектов прецизионной лазерной спектроскопии в несколько неожиданной и интуитивно удовлетворительной форме.*

ф. Правила отбора и статистические веса. Основное выражение для интенсивности линии поглощения для перехода из состояния с энергией E в состояние

¹⁾ Символы A, E, F для неприводимых представлений приняты в молекулярной спектроскопии; в обозначениях стандартных диаграмм для неприводимых представлений симметрической группы соответствие между неприводимыми представлениями группы октаэдра O (или группы тетраэдра T_d) и симметрической группы S_4 имеет следующий вид:

$$A \leftrightarrow \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & & \\ \hline \end{array}, \quad A_2 \leftrightarrow \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}, \quad E \leftrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \end{array}, \quad F_1 \leftrightarrow \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array}, \quad F_2 \leftrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \end{array}.$$

с энергией E' ($E' > E$), когда образец газа из молекул облучается светом, зависит от нескольких параметров: частоты падающего излучения, боровской формулы для частоты, температурного фактора Больцмана, плотности газа, амплитуды перехода и статистического веса (вырождения состояния) [32, 76]. Из всех этих факторов здесь нас будут интересовать лишь последние два: амплитуда перехода и статистический вес.

Вероятность перехода $B(E \rightarrow E')$ для электрических дипольных переходов дается выражением

$$B(E \rightarrow E') \equiv \sum_{i=1}^3 \sum_{\gamma' \gamma} |\langle E'; \gamma' | D_i | E; \gamma \rangle|^2. \quad (7.10.339)$$

В этом выражении $|E; \gamma\rangle$ обозначает собственный вектор рассматриваемого состояния с энергией E , в котором γ — совокупность квантовых чисел, нумерующих вырождение уровня E , а D_i — компонента электрического дипольного момента $\bar{D}$ молекулы вдоль лабораторной оси $\hat{i}$, т.е. $D_i = \hat{i} \cdot \bar{D}$. Условие отличия от нуля амплитуды перехода $\langle E'; \gamma' | D_i | E; \gamma \rangle$ определяет *правила отбора для электрических дипольных переходов из состояния с энергией E в состояние с энергией E'* .

Для молекулы, где состояния описываются относительно внутренней системы отсчета (экартова система отсчета в нашем изложении), компоненты электрического дипольного момента по отношению к движущейся системе отсчета $d_i = \hat{j}_i \cdot \bar{D}$ являются функциями внутренних координат, в качестве которых мы выбираем нормальные координаты q . Два набора компонент связаны равенством

$$D_i(q) = \sum_j C_{ij} d_j(q), \quad (7.10.340)$$

где C — матрица направляющих косинусов, определяющая ориентацию экартовой системы отсчета относительно лабораторной системы отсчета. Равенство (7.10.340) можно также выразить через сферические компоненты вектора (см. приложение Г, гл. 3) в виде

$$D_\mu(q) = \sum_\nu \mathcal{D}_{\mu\nu}^{1*}(C) d_\nu(q). \quad (7.10.341)$$

Первый шаг при вычислении амплитуды перехода электрического дипольного момента состоит в вычислении матричных элементов $\mathcal{D}_{\mu\nu}^{1*}$ по отношению к состояниям ротатора

$$\langle C | \sigma J M K \rangle \equiv \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} (\det C)^\sigma (-1)^{J-K} \mathcal{D}_{M, -K}^{J*}(C). \quad (7.10.342)$$

Эти матричные элементы получают из соотношения (3.189) гл. 3 с помощью нормировки, задаваемой равенством (3.137), и соотношения симметрии (3.331)¹⁾:

¹⁾ Эти матричные элементы вычисляются при помощи внутреннего произведений, определенного в примечании на стр. 531.

$$\langle \sigma' J' M' K' | \mathcal{D}_{\mu\nu}^{1*} | \sigma J M K \rangle = (-1)^{\nu-1} \frac{1}{2} [1 - (-1)^{J'+\sigma'+J+\sigma}] \sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}} C_{M\mu M'}^{J1J'} C_{K,-\nu K'}^{J1J'}. \quad (7.10.343)$$

Для общих колебательно-вращательных состояний вида

$$|(\text{vib})\sigma J M\rangle \equiv \sum_K A_K |(\text{vib})K\rangle \otimes |\sigma J M K\rangle, \quad (7.10.344)$$

таким образом, находим

$$\begin{aligned} \langle (\text{vib})\sigma' J' M' | D_{\mu} | (\text{vib})\sigma J M \rangle &= \frac{1}{2} [1 - (-1)^{J'+\sigma'+J+\sigma}] \\ &\times \sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}} C_{M\mu M'}^{J1J'} \sum_{K\nu} (-1)^{\nu-1} A_K A_{K+\nu}^* \\ &\times C_{K,\nu,K+\nu}^{J1J'} \langle (\text{vib})'K + \nu | d_{-\nu} | (\text{vib})K \rangle. \end{aligned} \quad (7.10.345)$$

Последнее соотношение показывает, что правила отбора по полному угловому моменту и четности имеют вид

$$\Delta J = 0, \quad \Delta \sigma = \pm 1; \quad \Delta J = \pm 1, \quad \Delta \sigma = 0, \quad (7.10.346)$$

где $\Delta J = J' - J$ и $\Delta \sigma = \sigma' - \sigma$. Эти правила отбора независимы от внутренних состояний. Их можно получить более непосредственно, исходя из того факта, что $\vec{D}$ является векторным оператором по отношению к вращениям физического пространства, генерируемым посредством полного углового момента $\vec{J}$ и меняет знак при пространственной инверсии.

Без дальнейших предположений относительно внутренних состояний $|(\text{vib})K\rangle$ едва ли можно сказать еще что-нибудь о вероятности перехода (7.10.339). Для случая трехкратно вырожденной моды колебаний (волновые функции задаются выражением (7.10.207)) можно дать явное вычисление амплитуды перехода. Хотя это вычисление является частным случаем соотношения (7.10.345), мы повторяем его с целью непосредственной иллюстрации привлекаемых понятий теории углового момента.

Перепишем равенство (7.10.341) в виде

$$D_{\mu}(\text{vib}, \text{rot}) = \sum_{\nu} (-1)^{\nu-1} T_{\nu}^1(\text{vib}) T_{\mu;-\nu}^1(\text{rot}). \quad (7.10.347)$$

В последнем соотношении мы определили

$$T_{\nu}^1(\text{vib}) = d_{\nu}(\mathbf{q}),$$

$$T_{\mu;\nu}^1(\text{rot}) = (-1)^{1-\nu} \mathcal{D}_{\mu,-\nu}^{1*}(C), \quad (7.10.348)$$

где $d_\nu(\mathbf{q})$ является теперь функцией нормальных координат $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ трехкратно вырожденного колебания. Как указывает обозначение, $T_\nu^1(\text{vib})$ является тензорным оператором ранга 1 по отношению к внутреннему угловому моменту $\mathbf{L}$, а $T_{\mu;\nu}^1(\text{rot})$ является тензорным оператором ранга 1 по индексу ν относительно углового момента $\mathbf{K} = (K_1, K_2, K_3)$. Следовательно, $D_\mu(\text{vib}, \text{rot})$ есть инвариант относительно $\mathbf{R} = \mathbf{L} + \mathbf{K}$. (Это наблюдение уже предсказывает правило отбора $\Delta R = 0$, которое будет получено ниже [77].)

Вычисление матричных элементов для $D_\mu(\text{vib}, \text{rot})$ есть теперь не что иное, как стандартное применение теоремы Вигнера — Экарта (соотношение (3.260) гл. 3):

$$\begin{aligned} & \langle (n'M'\sigma')(l'J')R'M'_R | D_\mu | (nM\sigma)(lJ)RM_R \rangle \\ &= \delta_{R'R} \delta_{M'_R M_R} (-1)^{J'+l+R} \frac{1}{2} [(-1)^{J'+\sigma'+J+\sigma} - 1] \\ & \times [(2l'+1)(2J+1)]^{\frac{1}{2}} \langle n'l' || T^1(\text{vib}) || nl \rangle C_{M_\mu M'}^{J1J'} \begin{Bmatrix} l & J & R \\ J' & l' & 1 \end{Bmatrix}. \quad (7.10.349) \end{aligned}$$

При получении этого результата мы воспользовались тем фактором (см. равенство (7.10.343)), что редуцированный матричный элемент оператора $T_{\mu;\nu}^1$, который является тензорным оператором ранга 1 (по индексу ν) по отношению к $\mathbf{K}$, дается выражением $\frac{1}{2} [1 - (-1)^{J'+\sigma'+J+\sigma}] \times [(2J+1)/(2J'+1)]^{1/2} C_{M_\mu M'}^{J1J'}$.

Рассмотрим затем вычисление редуцированных колебательных матричных элементов в выражении (7.10.349). Компоненты $d_\nu(\mathbf{q})$ электрического дипольного момента должны преобразовываться по отношению к внутреннему угловому моменту $\mathbf{L}$ как вектор ([15], стр. 157). Отсюда следуют два результата: 1) трехкратно вырожденная нормальная мода $\mathbf{q}$ имеет ассоциированный электрический дипольный момент только в том случае, когда $\mathbf{q}$ преобразуется согласно векторному представлению точечной группы G (см. примечание на стр. 000; этими векторными представлениями являются неприводимые представления F_{1u} группы O_h , F_2 группы T_d , F_1 группы O , F группы T , F_u группы T_h); 2) разложение $d_\nu(\mathbf{q})$ по нормальным координатам (q_1, q_2, q_3) трехкратно вырожденной (векторной) моды имеет общий вид $d_\nu(\mathbf{q}) = I(q^2)q_\nu$, где (q_+, q_0, q_-) — сферические компоненты вектора $\mathbf{q}$, а $I(q^2)$ — аналитическая функция (полиномиальная, если она дается обрывающимся рядом) от инварианта $q^2 = \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}$ (инвариант по отношению к $\mathbf{L}$). Используя формулу $\mathcal{Y}_{1\nu}(\mathbf{q}) = (\pi/\pi)^{1/2} q_\nu$ и равенство (7.10.206) для волновых функций гармонического осциллятора, а также соотношения (3.226) и (3.437), получаем следующее выражение для редуцированных колебательных матричных элементов в (7.10.349):

$$\begin{aligned} \langle n'l' || T^1(\text{vib}) || nl \rangle &= \langle n'l' || \mathbf{d} || nl \rangle \\ &= [(2l+1)/(2l'+1)]^{\frac{1}{2}} C_{000}^{11l'} \int_0^\infty q^2 dq R_{n'l'}(q) q I(q^2) R_n(q), \quad (7.10.349') \end{aligned}$$

где $R_n(q) = q^l F_n(q)$ (и аналогично для $n'l'$).

Если аппроксимировать $I(q^2)$ полиномом степени k от q^2 , то радиальный интеграл¹⁾ в редуцированном матричном элементе (7.10.349') обращается в нуль, если не выполняется условие $\Delta n = n' - n = \pm 1, \pm 3, \dots, \pm(2k + 1)$.

Из соотношений (7.10.349) и (7.10.349') мы получаем теперь правила отбора для электрических дипольных переходов из состояния с кориолисовой энергией $E_0[n(I)R]$ в состояние с кориолисовой энергией $E_0[n'(I'J')R'] > E_0[n(I)R]$ для трехкратно вырожденного колебания (векторного типа):

$$\begin{aligned} \Delta n = 1, 3, \dots; \quad \Delta I = \pm 1; \quad \Delta J = 0, \quad \Delta \sigma = \pm 1; \quad \Delta R = 0 \\ \Delta J = \pm 1, \quad \Delta \sigma = 0; \end{aligned} \quad (7.10.350)$$

Поскольку ведущий (постоянный) член в разложении $I(q^2)$ обычно гораздо больше, чем остальные члены, то именно переходы с $\Delta n = 1$ являются наиболее интенсивными (и, следовательно, наблюдаемыми). Ниже в разд.х мы рассматриваем фундаментальную полосу молекулы SF_6 (гексафторида серы), в которой правила отбора (7.10.350) выполняются экспериментально. (Общие переходы с $\Delta n = 1$ рассмотрены Гэлбрейтом [77]; переходы из основных колебательных состояний ($n = 0$) в колебательные состояния $n' = 3$ ($\Delta n = 3$) в SF_6 (так называемый $3\nu_3$ -спектр поглощения) также были недавно проанализированы Аккерхальтом и др. [77а] и Паттерсоном и др. [77б]).

Мы еще раз подчеркиваем, что для электрических дипольных переходов правила отбора (7.10.346) для квантового числа углового момента J и квантового числа четности σ являются *точными* — общий молекулярный гамильтониан H (7.10.154) инвариантен относительно вращений-инверсий физического пространства и каждое собственное значение H соответственно $2(2J + 1)$ -кратно вырождено; дополнительные правила отбора (7.10.350), хотя и точные для электрических дипольных переходов между кориолисовыми уровнями (7.10.202), применимы фактически только в том случае, когда эти уровни представляют собой достаточно точное описание действительных энергетических состояний молекулы. Даже если эти уровни справедливы (что мы будем предполагать), спектры высокого разрешения могут проявлять более тонкие детали, соответствующие электрическим дипольным переходам между (сверхтонкими) уровнями, которые даются соотношением (7.10.288), или между кластерными уровнями.

Чтобы проверить справедливость модельного гамильтониана (7.10.196) с поправками на взаимодействия высших порядков, которые приведены в разд. р, возникает необходимость модифицировать правила отбора (7.10.350) посредством включения «квантовых чисел» Γ^α и κ , появляющихся в выражении для энергии $E[n(I)R; \Gamma^\alpha \kappa]$, представленном формулой (7.10.288). Эти правила отбора определяются из симметрии уровней относительно точечной группы следующим образом: электрические дипольные переходы между двумя уровнями $E[n'(I'J')R'; \Gamma^{\alpha'} \kappa'] > E[n(I)R; \Gamma^\alpha \kappa]$ происходят только в том случае, если квантовые числа этих уровней удовлетворяют правилам отбора (7.10.350) и, кроме того, прямое произведение представлений точечной группы G вида $\Gamma^\alpha \otimes \Gamma_{\text{вектор}}$

¹⁾ Интересно заметить, что вычисление этих радиальных интегралов можно провести методами теории углового момента. Это сделано в работе [83].

⊗ Γ^α содержит тождественное неприводимое представление (здесь $\Gamma_{\text{вектор}}(g) = R(g)$ — векторное представление группы G). Используя этот результат, можно также при помощи суперпозиции определить правила отбора для переходов между кластерными уровнями.

Весьма объемной является задача детального построения волновых функций для уровней $E[n(I)R; \Gamma^\alpha \kappa]$ — или даже волновых функций для кластерных уровней — и определения их симметрии. Относительно этих подробностей мы отсылаем читателя к недавней (уже цитированной нами) литературе.

Обратимся теперь ко второму фактору в вероятности перехода, который представляет интерес для иллюстрации метода углового момента, — статистическому весу.

Множитель статистического веса, входящий в формулу для интенсивности поглощения, представляет собой вырождение нижнего уровня молекулярной энергии с учетом ядерного спина и принципа запрета Паули [78]. При применении принципа Паули важно иметь в виду, что в гамильтониане, построенном нами для описания жесткой молекулы, рассматриваются как эквивалентные только те ядра, которые под действием точечной группы G превращаются один в другой, как это обсуждалось на стр. 541. Эта группа в разд. II была обозначена через $P(G)$; она представляет собой группу инвариантности молекулярного гамильтониана. Именно эти перестановки ядер следует рассматривать, когда применяется принцип Паули. Если ядра вначале нумеруются числами $1, 2, \dots, N$, а перестановка $1 \rightarrow 1', 2 \rightarrow 2', \dots, N \rightarrow N'$ не является элементом группы $P(G)$, то получается новый гамильтониан и новая перестановочная группа $P'(G)$, которая приводит к эквивалентному описанию молекулы и к понятию остова [78].

Для целей настоящего обсуждения будем предполагать, что наименьшее состояние есть основное электронное и основное колебательное состояние и, кроме того, что эти состояния инвариантны относительно всех перестановок $P_g \in P(G)$. Наша задача сводится тогда к определению трансформационных свойств относительно перестановок P_g произведения состояний

$$|\sigma JMK\rangle \otimes |SK_S\rangle, \quad (7.10.351)$$

в котором $|\sigma JMK\rangle$ обозначает вектор состояния ротатора (7.10.204)

$$\langle C|\sigma JMK\rangle \equiv \Psi_{MK}^{J,\sigma}(C), \quad (7.10.352)$$

а $|SK_S\rangle$ — состояние полного спина, которое мы теперь опишем¹⁾ (см. примечание на стр. 571).

¹⁾ Мы выбираем ось эккартовой системы отсчета f_3 в качестве оси квантования для спиновых состояний, которые обозначаются $|SK_S\rangle$. Это удобно при построении состояний ротатора-спина, для которых выполняется принцип Паули, поскольку группа перестановок $P(G)$ индуцирует преобразования (см. формулу (7.10.360)), действующие на внутреннее квантовое число K , которое также отнесено к оси квантования f_3 . Спиновые состояния $|SM_S\rangle_{\text{lab}}$, которые имеют лабораторную ось f_3 в качестве оси квантования, связаны с внутренними спиновыми состояниями равенством $|SM_S\rangle_{\text{lab}} = \sum_{K_S} D_{K_S M_S}^S(U) |SK_S\rangle$, где $\pm U - (\det C)C$ есть гомоморфизм группы $SU(2)$ на группу $SO(3)$ (см. соотношение (7.10.297)).

Пусть $S = (S_1, S_2, S_3)$ обозначает полный спин с компонентами S_i ($i = 1, 2, 3$) относительно лабораторной (инерциальной) системы отсчета (l_1, l_2, l_3) . Тогда эти операторы удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям

$$[S_i, S_j] = ie_{ijk} S_k. \quad (7.10.353)$$

Определение (см. примечание на стр. 514) спиновых операторов относительно связанной с телом системы отсчета (f_1, f_2, f_3) имеет вид

$$T_i = +(\det C) \hat{f}_i \cdot S, \quad i = 1, 2, 3. \quad (7.10.354)$$

Тогда операторы $\{T_i\}$ удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям

$$[T_i, T_j] = ie_{ijk} T_k, \quad (7.10.355)$$

поскольку каждый из операторов спина S_i коммутирует с каждым из векторов системы отсчета $\hat{f}_j$. Более того, каждый оператор T_i является инвариантом вращений-инверсий (так как $S \rightarrow S$ при инверсии) и меняет знак при обращении времени (так как $S \rightarrow -S$ при обращении времени). (Заметим, что операторы $\{S_i\}$ не коммутируют с операторами $\{T_i\}$ — функции полного спина не обладают структурой функций ротатора, см. примечание на стр. 568.) Базисные векторы $\{|SK_S\rangle: K_S = S, S-1, \dots, -S\}$ являются одновременными собственными векторами операторов $S^2 = T^2 = T_1^2 + T_2^2 + T_3^2$ и T_3 , а операторы $\{T_i\}$ имеют стандартное действие на эти базисные векторы:

$$\begin{aligned} T_{\pm} |SK_S\rangle &= [(S \mp K_S)(S \pm K_S + 1)]^{\frac{1}{2}} |S, K_S \pm 1\rangle, \\ T_3 |SK_S\rangle &= K_S |SK_S\rangle. \end{aligned} \quad (7.10.356)$$

Таким образом, S описывает полный спин, а K_S — квантовое число проекции, ассоциированное с оператором T_3 , который отнесен к оси эккартовой системы отсчета $\hat{f}_3$ как оси квантования.

Рассмотрим теперь действие группы перестановок $P(G)$ на произведение векторов состояния (7.10.351). Из соотношений (7.10.248) и (7.10.243) имеем, что эккартова система отсчета подвергается преобразованию

$$P_g: \hat{f}_i \rightarrow \sum_j R_{ji}(g) \hat{f}_j, \quad \text{при каждом } P_g \in P(G), \quad (7.10.357)$$

где $R(g)$ — ортогональная матрица, заданная формулой (7.10.216) и определяемая статической молекулярной моделью. Имеем, следовательно,

$$P_g: C \rightarrow CR(g). \quad (7.10.358)$$

Таким образом, относительно действия каждого $P_g \in P(G)$ мы имеем следующие матричные преобразования компонент углового момента и спина:

$$\begin{aligned} P_g: K &\rightarrow [\det R(g)] \tilde{R}(g) K, \\ T &\rightarrow [\det R(g)] \tilde{R}(g) T, \end{aligned} \quad (7.10.359)$$

где $K = \text{col}(K_1, K_2, K_3)$ и $T = \text{col}(T_1, T_2, T_3)$.

Итак, мы находим, что относительно действия перестановки $P_g \in P(G)$ функции ротатора подвергаются преобразованию

$$P_g: |\sigma JMK\rangle \rightarrow [\det R(g)]^\sigma \sum_{K'} \mathcal{D}_{K'K}^J(R(g)) |\sigma JMK'\rangle. \quad (7.10.360)$$

Базис ротатора реализует, таким образом, приводимое представление

$$P_g \rightarrow [\det R(g)]^a \mathcal{D}^J(R(g)) \quad (7.10.361)$$

группы перестановок $P(G)$. Обозначим это представление группы $P(G) \cong G$ через $\Gamma^{J,\sigma}(G)$.

Напомним теперь, что группа перестановок $P(G)$ и (изоморфная ей) трансформационная группа $L(G)$ обе являются группами инвариантности молекулярного гамильтониана (и, в частности, гамильтониана (7.10.196), включающего все взаимодействия высших порядков). Из этого факта следует, что подпространство векторов состояния, соответствующих заданному уровню энергии $E[n(IJ)R; \Gamma^\alpha \kappa]$ (см. соотношение (7.10.288)), неприводимо относительно действия группы перестановок $P(G)$, равно как и действия трансформационной группы $L(G)$. В частности, ортогональная матрица, которая диагонализует матрицу взаимодействия A (см. формулу (7.10.290)), для $R=J$ должна давать полное приведение представления $\Gamma^{J,\sigma}(G)$. (Действительно, представление группы $P(G)$ и представление группы $L(G)$, реализуемые на функциях ротатора (7.10.352), тождественны; чтобы получить это, достаточно положить $l=0$, $R=J$ и $A(g)=1$ в соотношении (Б.5) приложения Б и сравнить результат с соотношением (7.10.361).)

Предположим, что в явном виде приведение представления $\Gamma^{J,\sigma}(G)$ группы $P(G)$ уже осуществлено. Для последующего использования (см. соотношения (7.10.371) — (7.10.373)) удобно записать соответствующее абстрактное разложение в виде

$$\Gamma^{J,\sigma}(G) = A_\sigma \otimes \left(\sum_x \oplus k_x \Gamma^x \right), \quad (7.10.361')$$

где A_σ обозначает одномерное неприводимое представление группы G , определенное согласно $A_\sigma(g) = [\det R(g)]^\sigma$, $\sigma = 0, 1$. Соответственно слагаемое $\sum_x \oplus k_x \Gamma^x$ есть редукционный ряд для представления $\Gamma^{J,0}(G) = \{ \mathcal{D}^J(R(g)) : g \in G \}$, в котором $\sigma = 0$.

Рассмотрим затем трансформационные свойства спинового базиса

$$\{|SK_S\rangle : K_S = S, S-1, \dots, -S\} \quad (7.10.362)$$

относительно перестановок. В общем случае эти функции будут линейными комбинациями базисных векторов в тензорном произведении пространств:

$$\{ |s\mu_1\rangle \otimes |s\mu_2\rangle \otimes \dots \otimes |s\mu_n\rangle : \text{каждое } \mu_k = s, s-1, \dots, -s \}, \quad (7.10.363)$$

где s — спин ядра в совокупности n тождественных ядер, а μ_i — квантовое число проекции относительно оси $\hat{f}_3$ экартовой системы отсчета. Таким образом, явное построение спиновых состояний в (7.10.351) потребовало бы нахождения тех линейных комбинаций базисных векторов (7.10.363), которые преобразуются неприводимо относительно действия операторов полного спина (T_1, T_2, T_3) и относительно действия перестановок P_g спинных состояний.

В общем случае действие перестановки $P \in S_n$ на вектор состояния из совокупности (7.10.363) состоит в перестановке спинных состояний отдельного ядра на

всевозможные позиции в тензорном произведении. В данном случае, однако, действие перестановки P_g не только перемещает спинные состояния отдельного ядра на различные позиции в тензорном произведении, но также преобразует компоненты индивидуального спина согласно формуле (7.10.359). Таким образом, действие перестановки

$$P_g = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ i_1(g) & i_2(g) & \cdots & i_n(g) \end{pmatrix} \quad (7.10.364)$$

на базисный вектор из множества (7.10.363) имеет вид

$$P_g: |s\mu_1\rangle \otimes |s\mu_2\rangle \otimes \cdots \otimes |s\mu_n\rangle \rightarrow \mathcal{U}_g |s\mu_{i_1(g)}\rangle \otimes \mathcal{U}_g |s\mu_{i_2(g)}\rangle \otimes \cdots \otimes \mathcal{U}_g |s\mu_{i_n(g)}\rangle, \quad (7.10.365)$$

где $\mathcal{U}_g$ — унитарное преобразование спинных состояний отдельного ядра, задаваемое формулой

$$\mathcal{U}_g |s\mu\rangle = \sum_{\mu'} D_{\mu'\mu}^s(U(g)) |s\mu'\rangle. \quad (7.10.366)$$

В последнем равенстве $\pm U(g)$ — унитарная матрица, соответствующая собственному ортогональному преобразованию $[\det R(g)] R(g)$, появляющемуся в соотношении (7.10.359) (см. формулу (2.40) гл. 2).

В общем случае первой задачей при явном построении ядерных спинных функций является определение тех линейных комбинаций базисных векторов (7.10.363), которые преобразуются неприводимо относительно действия P_g . Проиллюстрируем это построение в случае спина $s = 1/2$.

В случае спина $1/2$ в приложении к разд. 5 мы дали явное построение спинных состояний, которые преобразуются неприводимо относительно действия перестановки $P \in S_n$. Ими являются базисные векторы двойной стандартной диаграммы, соответствующие схеме Юнга вида

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & \cdots & & \cdots & \\ \hline & & \cdots & & & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{l} \frac{n}{2} + S \\ \frac{n}{2} - S \end{array}$$

Эти базисные векторы обозначаются как

$$|(T_{U_2} | T_{S_n})\rangle = |(y_1, y_2 \cdots y_n) S K_S\rangle, \quad (7.10.367)$$

где (S, K_S) — спинные квантовые числа стандартной диаграммы T_{U_2} , а $(y_1, y_2 \cdots y_n)$ — символ Яманучи для стандартной диаграммы $T_{S_n}^{(1)}$.

Под действием перестановки P_g базисные векторы (7.10.367) преобразуются согласно

$$P_g: |(y) S K_S\rangle \rightarrow \sum_{(y') K'_S} D_{K'_S K_S}^S(U(g)) I_{(y') y}^{1(n/2) + S, (n/2) - S}(P_g) |(y') S K'_S\rangle. \quad (7.10.368)$$

Таким образом, в векторном пространстве, натянутом на базис двойных стандартных диаграмм при фиксированном S (фиксированный вид схемы Юнга), реализуется (приводимое) представление

¹⁾ Заметим, что для n ядер со спином $1/2$ каждый спинный вектор в (7.10.351) также будет характеризоваться символом Яманучи.

$$P_g \rightarrow D^S(U(g)) \otimes \Gamma^{[(n,2) + S, (n,2) - S]}(P_g), \quad \text{для каждого } g \in G \quad (7.10.369)$$

группы перестановок $P(G) \cong G$. Таким образом, задача построения явных спинных состояний ($s = 1/2$), которые преобразуются неприводимо относительно группы перестановок $P(G) \cong G$, состоит в приведении прямого произведения представлений (7.10.369) группы $P(G)$ на неприводимые представления точечной группы G . Понятно, что эту процедуру необходимо проделать для каждого значения спина $S = n/2, n/2 - 1, \dots, 1$ или 0.

(Для случаев ядер, имеющих спин, отличный от $1/2$, такая процедура аналогична описанной выше, но более сложна, и мы не будем здесь ее обсуждать.)

Пусть $\Gamma^{n,S}(G)$ обозначает представление (7.10.369) точечной группы G , которое реализуется на спинных функциях (7.10.367) под действием группы перестановок $P(G)$ (размерность представления $\Gamma^{n,S}(G)$ равна $(2S + 1) \times \dim [n/2 + S, n/2 - S]$; см. соотношение (А. 18) из приложения А к разд. 5). Редукционный ряд для представления $\Gamma^{n,S}(G)$ имеет вид

$$\Gamma^{n,S}(G) = \sum_x \oplus d_x \Gamma^x. \quad (7.10.370)$$

Для общих n и S трудно дать построение явных спинных состояний, которые преобразуются в соответствии с каждым из неприводимых представлений Γ^α группы G , фигурирующих в редукционном разложении (7.10.370), хотя в принципе это можно сделать. Для нашего обсуждения мы предполагаем, что такая редукция уже осуществлена.

Объединение расщепления векторного пространства состояний ротатора (соотношение (7.10.361')) в подпространства, на которых реализуется неприводимое представление $A_\sigma \otimes \Gamma^\alpha$ группы $P(G)$, с расщеплением векторного пространства спинных состояний (соотношение (7.10.370)) в подпространства, на которых реализуется неприводимое представление $\Gamma^{\alpha'}$ группы $P(G)$, приводит к множествам прямых произведений векторов вида

$$|(\sigma JM)\kappa; \Gamma^\alpha \gamma\rangle \otimes |(nS)\lambda; \Gamma^{\alpha'} \gamma'\rangle, \quad (7.10.371)$$

где векторы, нумеруемые при помощи $\gamma = 1, \dots, \dim \Gamma^\alpha$ и $\gamma' = 1, \dots, \dim \Gamma^{\alpha'}$, составляют базис пространства, в котором реализуется неприводимое представление

$$A_\sigma \otimes \Gamma^\alpha \otimes \Gamma^{\alpha'} \quad (7.10.372)$$

группы перестановок $P(G) \cong G$. (Индекс κ нумерует собственные значения $E(\Gamma^\alpha \kappa)$ в соотношении (7.10.294), а λ — индекс «кратности», нумерующий число повторений $d_{\alpha'}$ неприводимого представления $\Gamma^{\alpha'}$ в редукционном ряде (7.10.370).) Затем завершается построение состояний ротатора-спина, преобразующихся неприводимо относительно действия $P(G)$, путем приведения представления (7.10.372) при помощи образования соответствующих линейных комбинаций (по индексам γ и γ') базисных векторов (7.10.371). (Как будет рассмотрено ниже, единственными состояниями, представляющими физический интерес в этой редукции, являются «паулиевские состояния», которые преобразуются как одномерное «антисимметричное» неприводимое представление группы G .)

Выше было дано достаточно подробное обсуждение трансформационных свойств базисных векторов ротатора и спина относительно действия группы пе-

перестановок $P(G)$ и редукции соответствующих матричных представлений, поскольку в литературе по этому вопросу наблюдается значительная путаница.

Рассмотрим теперь применение принципа Паули (для ядер со спином $1/2$). Пусть $\Gamma_{\text{Паули}}(G)$ обозначает одномерное представление точечной группы G , определенное таким образом, что $\Gamma_{\text{Паули}}(g) = +1$ или -1 в соответствии с тем, четна или нечетна перестановка $P_g \rightarrow g$. Паулиевское состояние точного углового момента (J, M) , точной четности $J + \sigma$ и точного спина S мы определяем как линейную комбинацию прямого произведения состояний $|\sigma JKM\rangle \otimes |(\nu)SK_S\rangle$, которая преобразуется по неприводимому представлению $\Gamma_{\text{Паули}}(G)$ относительно действия группы перестановок $P(G)$. (Общая линейная комбинация берется по всем $2J + 1$ значениям K , по всем $2S + 1$ значениям K_S и по всем символам Яманучи, соответствующим стандартной диаграмме Юнга вида $[n/2 + S^{n/2 - S}]$.)

Статистический вес основного колебательного (сверхтонкого) уровня $E[0(0)0; \Gamma^\alpha \kappa]$ (см. соотношение (7.10.288)) равен числу ортогональных паулиевских состояний, которые обладают этим собственным значением энергии, учитывая все значения спина $S = n/2, n/2 - 1, \dots, 1/2$ или 0 , а также два значения четности $\sigma = 0, 1$ (так как собственное значение энергии независимо от обоих этих квантовых чисел). Поэтому статистический вес уровня $E[0(0)0; \Gamma^\alpha \kappa]$ равен полному числу состояний, которые будут принадлежать неприводимому представлению $\Gamma_{\text{Паули}}(G)$ в конце процедуры редукции, описанной на стр. 570. Для подсчета числа (ортогональных) паулиевских состояний необязательно явно осуществлять процедуру редукции. Если определить

$$\Gamma_{\text{spin}} = \sum_S \Gamma^{n,S}(G). \quad (7.10.373)$$

то статистический вес уровня $E[0(0)0; \Gamma^\alpha \kappa]$ равен, очевидно, числу появлений представления $\Gamma_{\text{Паули}}(G)$ в двух прямых произведениях

$$A_\sigma \otimes \Gamma^\alpha \otimes \Gamma_{\text{spin}}, \quad \sigma = 0, 1. \quad (7.10.374)$$

где A_σ обозначает одномерное неприводимое представление группы G , задаваемое равенством $A_\sigma(g) = [\det R(g)]^\sigma$, а Γ^α — неприводимое представление группы G , содержащееся в $\Gamma^{J,0}$.

Изложенные выше результаты применим теперь к определению статистических весов октаэдрически (т.е. относительно группы O_h) симметричной молекулы XY_6 , у которой ядра Y имеют спин $1/2$, а $\Gamma_{\text{Паули}}(G) = A_{2g}$. Статистический вес каждого O_h -неприводимого уровня энергии $E(\Gamma^\alpha)$, где Γ^α обозначает неприводимое представление группы O_h , получается по правилу [79]: *статистический вес уровня $E(\Gamma^\alpha)$ равен числу неприводимых представлений A_{2g} , которые появляются в редукции прямых произведений*

$$A_{1g} \otimes \Gamma^\alpha \otimes \Gamma_{\text{spin}} \quad \text{и} \quad A_{1u} \otimes \Gamma^\alpha \otimes \Gamma_{\text{spin}}.$$

$$[\Gamma^\alpha = A_{1g}, A_{2g}, E_g, F_{1g}, F_{2g}; \tau = g \text{ (четный)} \text{ и } \tau = u \text{ (нечетный)}].$$

$$(7.10.375)$$

Редукция 2^6 спиновых волновых функций на неприводимые представления группы O_h дается в виде (см. [80], где дано обобщение этого результата на произвольный спин, а также [80a], где даны подробные таблицы статистических весов)

$$\Gamma_{\text{spin}} = 10A_{1g} + A_{2g} + A_{2u} + 8E_g + 6F_{1u} + 3F_{2g} + 3F_{2u}.$$

Число представлений A_{2u} , появляющихся в прямых произведениях (7.10.375), легко определить при помощи таблицы умножения для неприводимых представлений (алгебра представлений), которая имеет вид

	A_1	A_2	E	F_1	F_2
A_1	A_1	A_2	E	F_1	F_2
A_2	A_2	A_1	E	F_2	F_1
E	E	E	$A_1 + A_2 + E$	$F_1 + F_2$	$F_1 + F_2$
F_1	F_1	F_2	$F_1 + F_2$	$A_1 + E + F_1 + F_2$	$A_2 + E + F_1 + F_2$
F_2	F_2	F_1	$F_1 + F_2$	$A_2 + E + F_1 + F_2$	$A_1 + E + F_1 + F_2$

$g \times g = g, \quad g \times u = u \times g = u, \quad u \times u = g.$

Результаты этого вычисления следующие [79]:

Уровень $E(\Gamma^\alpha)$:	A_1	A_2	E	F_1	F_2
Статистический вес:	2	10	8	6	6

(Статистический вес не зависит от индексов g и u .)

Поскольку подуровни в кластере не разрешены, полезно также выписать статистические веса для кластерных уровней:

Симметрия кластера	Статистический вес
$A_1 + E + F_1$	16
$F_1 + F_2$	12
$A_2 + E + F_2$	24
$A_1 + A_2 + F_1 + F_2$	24
$E + F_1 + F_2$	20

х. *Спектры фундаментальных переходов молекулы SF_6 .* Мы завершаем этот раздел краткой иллюстрацией применимости приведенных здесь понятий к реальным спектрам отмечая, в частности, точность согласия между теоретическими предсказаниями и экспериментальными наблюдениями.

В доминантном приближении к взаимодействию между трехкратно вырожденным колебанием и вращением молекулы типа сферического волчка частоты переходов в фундаментальной полосе получаются из соотношения (7.10.288). Для P -, Q - и R -ветвей стандартные формы [60] выражений для этих слагаемых энергии (в см^{-1}) имеют вид

$$P(J) = m - nJ + pJ^2 - qJ^3 + t_{JJ} F_{A_1 pp}^{(4JJ)},$$

$$Q(J) = m + vJ(J+1) + t_{JJ} F_{A_1 pp}^{(4JJ)},$$

$$R(J) = m + n(J + 1) + p(J + 1)^2 + q(J + 1)^3 + t_{JJ} F_{A,pp}^{(4JJ)} \quad (7.10.376)$$

где $(-1)^J F_{A,pp}^{(4JJ)}$ нумерует для различных значений дискретного индекса p собственные значения оператора T (7.10.293). Значение полного углового момента основного состояния равно J . Тензорный множитель t_{JJ} различен для разных ветвей. Три параметра t_{JJ} связаны с двумя числовыми параметрами, обозначаемыми g и h , и с зависящими от J множителями следующим образом:

$$(-1)^J t_{JJ} = \begin{cases} (g + hJ)[(2J - 3)_9]^{\frac{1}{2}}/2J(2J - 1), & (P) \\ -2g[(2J - 3)_9]^{\frac{1}{2}}/2J(2J + 2), & (Q) \\ [g - h(J + 1)][(2J - 3)_9]^{\frac{1}{2}}/(2J + 2)(2J + 3) & (R). \end{cases} \quad (7.10.377)$$

Для фундаментальной ν_3 -полосы молекулы SF_6 семь параметров, появляющихся в этих выражениях, известны [75, 81]. Выраженные в см^{-1} , они равны

$$\begin{aligned} m &= 947.976\,5759 \pm 0.000\,004\,3 & v &= (-6.998\,70 \pm 0.000\,18)10^{-5} \\ n &= (5.581\,760 \pm 0.000\,014)10^{-2} & g &= (-2.458\,283 \pm 0.000\,082)10^{-5} \\ p &= (-1.618\,642 \pm 0.000\,022)10^{-4} & h &= (-5.63 \pm 0.12)10^{-10} \\ q &= (1.038\,9 \pm 0.003\,8)10^{-8} \end{aligned}$$

Эти данные для ν_3 -полосы молекулы SF_6 были получены в насыщенном поглощении с применением CO_2 -лазеров. Такие методы являются субдоплеровскими и ограничиваются только одиородной шириной линии.

Для фундаментальной ν_4 -полосы молекулы SF_6 были определены те же семь параметров [82]. Они равны

$$\begin{aligned} m &= 615.024\,7 \pm 0.000\,4 & v &= (-1.91 \pm 0.02)10^{-5} \\ n &= 0.221\,514 \pm 0.000\,013 & g &= (2.79 \pm 0.02)10^{-6} \\ p &= (-2.414 \pm 0.014)10^{-5} & h &= (6.3 \pm 0.3)10^{-9} \\ q &= (-4.4 \pm 0.3)10^{-8} \end{aligned}$$

Эти данные могут быть использованы для получения приближенных значений факторов B и ζ , приведенных в работе [82]:

$$\begin{aligned} B &= (0.09111 \pm 0.00005), \\ \zeta_3 &= 0.6937 \pm 0.0002, \\ \zeta_4 &= -0.2156 \pm 0.0007. \end{aligned}$$

Данные для ν_4 -полосы получены методом прямого поглощения с использованием лазерных диодов и спектрометров с длиной пути порядка 1 км. Метод определения постоянных состоит в подгонке (методом наименьших квадратов) выражений (7.10.376) к большому количеству измеренных частот линий, имеющих однозначные резкие пики.

Для иллюстрации этих последних данных для фундаментальной ν_4 -полосы молекулы SF_6 мы приводим рис. 7.7, на котором изображен спектр высокого разрешения. Линии, обозначенные целыми числами 12, 16, 20 и 24, являются линиями поглощения для переходов из основного колебательного состояния с полным угловым моментом $J = 88$ на кластерные подуровни, на которые рас-

щепляется посредством октаэдрически инвариантного взаимодействия T верхний ($l = 1$) кориолисов уровень (см. рис. 7.6), который имеет $R = 88$ и полный угловой момент $J' = 87$ (P -ветвь, $\Delta J = -1$). Сами целые числа 12, 16, 20 и 24 являются статистическими весами кластеров (см. разд. ф). Поскольку $88 \equiv 1 \pmod{3}$ и $88 \equiv 0 \pmod{4}$, то предсказывается, что кластеры имеют относительные интенсивности, появляющиеся в последовательности 20, 24, 20 (повторяется), . . . , если читать слева направо в левом (низкоэнергетическом) конце спектра (рис. 7.7), и в последовательности 16, 12, 24, 12 (повторяется), . . . , если читать справа налево в правом (высокоэнергетическом) конце спектра. «Переходная» область должна находиться на расстоянии от левого края спектра, которое равно примерно одной четвертой длины спектра. Следует отметить замечательное согласие.

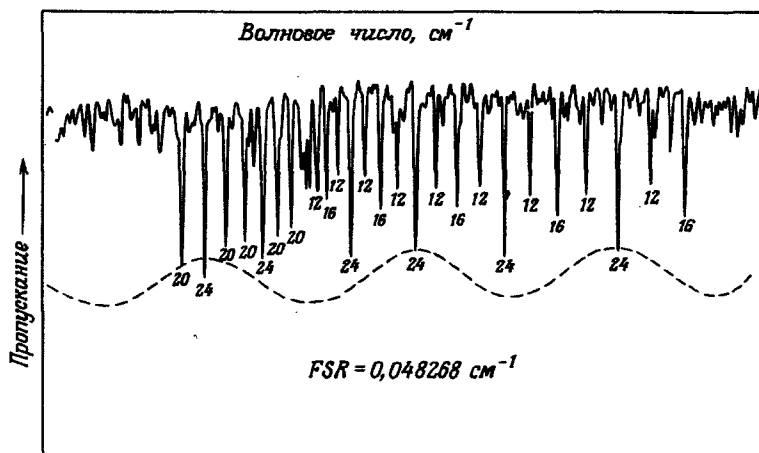


РИС. 7.7. Диодный спектр P (88)-перехода в ν_4 -полосе молекул SF_6 при $595,4 \text{ см}^{-1}$. При резонансах указаны спинные статистические веса для кластерных уровней (см. (3.74)). Штриховая линия представляет кривую интерференции, взятую для однодюймового германиевого эталона, используемого для калибровки волнового числа; периодичность соответствует свободной спектральной области [82].

ч. Приложения.

Приложение А. Вычисление $\bar{\Omega}_i^\alpha$. В этом приложении выводится матричное выражение (7.10.123) для Ω^α .

Решение уравнения (7.10.111), которое определяет $\bar{\Omega}_i^\alpha$, в компонентной форме имеет вид

$$\Omega_{ij}^\alpha \equiv \bar{\Omega}_i^\alpha \cdot \hat{f}_j = \hat{f}_k \cdot \frac{\partial \hat{f}_i}{\partial x_i^\alpha} = -\hat{f}_i \cdot \frac{\partial \hat{f}_k}{\partial x_i^\alpha}, \quad (\text{A-1})$$

где j, k, l цикличны по числам 1, 2, 3.

Чтобы вычислить правую часть равенства (А.1), мы используем соотношение (7.10.45) для случая эккартовой системы отсчета и соотношение (7.10.15) для случая главных осей.

► *Эккартова система отсчета.* Перепишем соотношение (7.10.45) в виде

$$\sum_k \hat{f}_k G_{jk} = \bar{F}_j = \sum_\beta m_\beta a_j^\beta \bar{x}^\beta, \quad (\text{A-2})$$

продифференцировав его, получаем

$$\sum_k \frac{\partial \hat{f}_k}{\partial x_i^\alpha} G_{jk} + \sum_k \hat{f}_k \frac{\partial G_{jk}}{\partial x_i^\alpha} = m_\alpha a_j^\alpha \hat{l}_i, \quad (\text{A-3})$$

откуда имеем

$$\sum_k \hat{f}_l \cdot \frac{\partial \hat{f}_k}{\partial x_i^\alpha} G_{jk} + \frac{\partial G_{jl}}{\partial x_i^\alpha} = m_\alpha a_j^\alpha C_{il}. \quad (\text{A-4})$$

Второе уравнение мы получим из (А.4), поменяв в нем местами j и l и учитывая, что $G_{jl} = G_{lj}$. Вычитая это новое уравнение из (А.4), получаем соотношение без производной от G_{jl}

$$\sum_k \hat{f}_l \cdot \frac{\partial \hat{f}_k}{\partial x_i^\alpha} G_{jk} - \sum_k \hat{f}_j \cdot \frac{\partial \hat{f}_k}{\partial x_i^\alpha} G_{lk} = m_\alpha (a_j^\alpha C_{il} - a_l^\alpha C_{ij}). \quad (\text{A-5})$$

С помощью (А.1) последнее соотношение приводим к матричному виду

$$\begin{pmatrix} -G_{11} + \text{tr } G & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & -G_{22} + \text{tr } G & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & -G_{33} + \text{tr } G \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Omega_{i1}^\alpha \\ \Omega_{i2}^\alpha \\ \Omega_{i3}^\alpha \end{pmatrix} = -(A^\alpha \tilde{C})_i. \quad (\text{A-6})$$

где индекс i справа обозначает i -й столбец матричного произведения $A^\alpha \tilde{C}$.

Полагая в соотношении (А.6) $i = 1, 2, 3$, получаем

$$[-G + (\text{tr } G) \mathbb{1}_3] \tilde{\Omega}^\alpha = -A^\alpha \tilde{C}, \quad (\text{A-7})$$

где Ω^α — матрица 3×3 , которая имеет Ω_{ij}^α в i -й строке и j -м столбце. Находим, таким образом

$$\Omega^\alpha = CA^\alpha M, \quad (\text{A-8})$$

где M — симметрическая матрица

$$M = [-G + (\text{tr } G) \mathbb{1}_3]^{-1}. \quad (\text{A-9})$$

► *Система главных осей.* Используя $\hat{f}_l = \sum_m C_{lm} \hat{f}_m$ и определение (А.1), получаем

$$\Omega_{ij}^\alpha = \left(\tilde{C} \frac{\partial C}{\partial x_i^\alpha} \right)_{kl}, \quad (\text{A-10})$$

где j, k, l цикличны по числам 1, 2, 3. Дифференцирование определяющего соотношения $QC = SA$, $A = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$, и умножение получающегося выражения слева на $\tilde{C}$ дают

$$\tilde{C} \frac{\partial Q}{\partial x_i^\alpha} C - \frac{\partial A}{\partial x_i^\alpha} = \tilde{C} \frac{\partial C}{\partial x_i^\alpha} A - A \tilde{C} \frac{\partial C}{\partial x_i^\alpha}. \quad (\text{A-11})$$

Комбинируя равенства (A.10) и (A.11), получаем

$$\Omega_{ij}^z = (\lambda_k - \lambda_l)^{-1} \left(\tilde{C} \frac{\partial Q}{\partial x_i^z} C \right)_{kl}, \quad (\text{A-12})$$

где j, k, l цикличны по числам 1, 2, 3. Воспользовавшись формулой $Q_{jk} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} (x_j^{\alpha} - R_j)(x_k^{\alpha} - R_k)$ и преобразованием внутренних координат (7.10.106), находим

$$\frac{\partial Q_{jk}}{\partial x_i^z} = \delta_{ij} \sum_l C_{kl} \mu_l \zeta_l^z + \delta_{ik} \sum_l C_{jl} \mu_l \zeta_l^z. \quad (\text{A-13})$$

Подстановка этого результата в равенство (A.12) приводит теперь к

$$\Omega^z = C A^z M, \quad (\text{A-14})$$

где A^{α} и M определяются соответственно соотношениями (7.10.135) и (7.10.136).

Приложение Б. Глобальная формулировка редукционной задачи $O(3) \supset G$ для молекул типа сферического волчка. Полезно привести явный вид неприводимого представления внутренней трансформационной группы $O(3)$, которое реализуется в базисе $|RM_R\rangle = |(nM\sigma)(J)RM_R\rangle$, $M_R = R, \dots, -R$ (см. соотношение (7.10.207)). Мы имеем¹⁾

$$\langle S^{-1} \mathbf{q}; CS | RM_R \rangle = (\det S)^{\sigma + l + J + R} \sum_{M_R} \mathcal{D}_{M_R M_R}^R(S) | RM'_R \rangle, \quad (\text{Б.1})$$

для каждого $S \in O(3)$. Для $S \in SO(3)$ эта формула следует из того факта, что L, K и $R = L + K$ имеют стандартное действие на несвязанный и связанный базисы $\{\Phi_{nlm} \otimes \Psi_{MK}^{J,\sigma}\}$ и $\{|RM_R\rangle\}$; для $S \in O(3)$ этот результат следует из однородно-полиномиальных свойств шаровых функций и функций $\Psi_{MK}^{J,\sigma}$ и из того, что $S \in SO(3)$. Предыдущий результат можно установить также, если осуществить явно преобразования $S^{-1} \mathbf{q}$ и CS в выражении

$$\sum_{mk} C_{mkM_R}^{J,R} \Phi_{nlm}(S^{-1} \mathbf{q}) \Psi_{MK}^{J,\sigma}(CS) \quad (\text{Б.2})$$

и воспользоваться трансформационными свойствами шаровых функций и функций $O(3)$ -представлений, которые задаются соотношениями (6.23), (7.10.204), (6.182), (6.32) и (3.188). Мы находим, таким образом, искомое преобразование базиса $\{|RM_R\rangle\}$ под действием любого $S \in O(3)$:

$$S: |RM_R\rangle \rightarrow \sum_{M_R'} \mathcal{D}_{M_R' M_R}^{R,\tau}(S) |RM'_R\rangle. \quad (\text{Б.3})$$

где $\tau \equiv (\sigma + l + J + R) \pmod{2}$ и

$$\mathcal{D}_{M_R' M_R}^{R,\tau}(S) = (\det S)^{\tau} \mathcal{D}_{M_R' M_R}^R(S). \quad (\text{Б.4})$$

Из формул (7.10.254) следует, что пространство с базисом $\{|RM_R\rangle: M_R = R, \dots, -R\}$ является пространством, в котором реализуется приводимое представление

¹⁾ В данном приложении символ S обозначает ортогональную матрицу 3×3 .

$$\{\mathcal{L}^{R,\tau}(A(g)R(g)): g \in G\} \quad (\text{Б.5})$$

кубической группы $G = O_h, O, T_d, T_h$ или T . Полная редукция этого представления группы G осуществляется при помощи ортогональной матрицы, которая диагонализует матрицу A , заданную равенством (7.10.290) для $G = O_h, O$ или T_d , и почти полная для $G = T_h$ или T (см. примечание на стр. 550).

Представление группы G , заданное в (Б.5), можно далее упростить с помощью свойства $\mathcal{R}^R(\lambda S) = \lambda^R \mathcal{R}^R(S)$ функций $O(3)$ -представлений. Используя $R(g) = [\det R(g)] R'(g)$, где $R'(g) = [\det R(g)] R(g) \in SO(3)$, и тот факт, что $A(g)$ есть одномерное представление группы G , находим

$$\mathcal{L}^{R,\tau}(A(g)R(g)) = A'(g)\mathcal{L}^R(R'(g)), \quad (\text{Б.6})$$

где $A'(g) = [A(g) \det R(g)]^{R+\tau} = \pm A(g) \det R(g)$ снова является одномерным неприводимым представлением группы G (каждое $A'(g)$ равно $+1$ или -1). Используя редукцию представления $\mathcal{R}^R(R'(g))$ на неприводимые представления группы G , определяемые оператором A , мы можем воспользоваться формулой (Б.6) и умножением неприводимых представлений группы G , чтобы определить соответствующую редукцию неприводимых представлений $\mathcal{R}^{R,\tau}(S)$ группы $O(3)$ на неприводимые представления группы G .

Литература

1. Born M., Oppenheimer J., Ann. Physik, **84**, 457 (1927).
К квантовой теории молекул.
2. Brester J. C., Kristallsymmetrie und Reststrahlen, Dissertation, Utrecht, 1923; Z. Physik, **24**, 324 (1924).
Симметрия кристалла и остаточные лучи.
3. Wigner E. P., Göttinger Nachrichten, **133**, (1930).
Об упругих собственных колебаниях симметричной системы. Английский перевод и обсуждение этой статьи имеется в монографии:
Cracknell A. P., Applied Group Theory, Pergamon, New York, 1968..
Прикладная теория групп.
4. Wilson E. B., J. Chem. Phys., **2**, 432 (1934).
Вырождение, правила отбора и другие свойства нормальных колебаний некоторых многоатомных молекул.
5. Eckart C., Phys. Rev., **46**, 383 (1934).
Кинетическая энергия многоатомных молекул.
6. Eckart C., Phys. Rev., **47**, 552 (1935).
Некоторые исследования вращающихся осей и многоатомных молекул.
7. Casimir H. B. G., Koninkl. Ned. Akad. Wetenschap. Proc., **34**, 844 (1931).
Вращение жесткого тела в квантовой механике.
8. Hirschfelder J. O., Wigner E. P., Proc. Amer. Acad. Sci., **21**, 113 (1935).
Разделение вращательных координат из уравнения Шредингера для n частиц.
9. Van Vleck J. H., Phys. Rev., **47**, 487 (1935).
Разделение вращательных координат из уравнения Шредингера для n частиц.
10. Buck V., Biedenharn L. C., Cusson R. V., Nucl. Phys., **A317**, 205 (1979).
Коллективные координаты для описания вращательного движения в многочастичных системах.
11. Jorgensen F., On the Molecular Vibration-Rotation Problem, Thesis, University of Copenhagen, 1978.
О молекулярной колебательно-вращательной проблеме.

12. *Wilson E. B., Howard J. B.*, J. Chem. Phys., **4**, 260 (1936).
Колебательно-вращательные уровни энергий многоатомных молекул.
13. *Nielsen H. H.*, Rev. Mod. Phys., **23**, 90 (1951).
Колебательно-вращательные энергии молекул.
14. *Shaffer W. H., Nielsen H. H., Thomas L. H.*, Phys. Rev., **56**, 895 (1939).
Колебательно-вращательные энергии пятиатомных молекул, симметричных относительно группы тетраэдра.
15. *Wilson E. B., Decius J. C., Cross P. C.*, Molecular Vibrations. The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra, McGraw-Hill, New York, 1955.
Молекулярные колебания. Теория инфракрасного и рамановского колебательных спектров.
16. *Louck J. D., Galbraith H. W.*, Rev. Mod. Phys., **48**, 69 (1976).
Эккартовы векторы, эккартовы системы отсчета и многоатомные молекулы.
17. *Schweinger H. C., Wigner E. P.*, J. Math. Phys., **11**, 1693 (1970).
Методы ортогонализации.
18. *Landshoff R.*, Z. Physik, **102**, 201 (1936).
Квантовомеханический расчет характера решеточной энергии кристалла NaCl в зависимости от постоянной решетки.
19. *Löwdin P.-O.*, J. Chem. Phys., **18**, 365 (1950).
О проблеме неортогональности, связанной с использованием атомных волновых функций в теории молекул и кристаллов.
Löwdin P.-O. — in: Advances in Chemical Physics, I. Prigogine, ed., Interscience New York, 1970, pp. 207 — 322.
Корреляционная задача в квантовой механике многих электронов. I.
Обзор различных подходов и обсуждение некоторых современных идей.
20. *Jorgensen F.*, Int. J. Quant. Chem., **14**, 55 (1978).
Ориентация эккартовой системы отсчета в многоатомной молекуле посредством симметрической ортонормировки.
- 20а. *Гантмахер Ф. Р.* Теория матриц. — М.: Наука, 1967.
- 20б. *MacDuffee C. C.*, The Theory of Matrices, Chelsea, New York, 1946.
Теория матриц.
- 20в. *Auoune L.*, Bull. Societe Math. France, **30**, 121 (1902).
О линейных, вещественных и ортогональных группах.
21. *Ferigle S. M., Weber A.*, Amer. J. Phys., **21**, 102 (1953).
Эккартовы условия для многоатомной молекулы.
22. *Curtiss C. F., Hirschfelder J. O., Adler F. T.*, J. Chem. Phys., **18**, 1638 (1950).
Разделение вращательных координат из n -частичного уравнения Шредингера.
23. *Pack R. T., Hirschfelder J. O.*, J. Chem. Phys., **49**, 4009 (1968).
Разделение вращательных координат из n -электронного двухатомного уравнения Шредингера.
24. *Pack R. T.*, J. Chem. Phys., **60**, 633 (1974).
Сравнение осей, связанных с пространством, с осями, жестко связанными с телом, в рассеянии атомов на двухатомных молекулах. Мгновенное приближение.
25. *Weyl H.*, The Classical Groups, Princeton Univ. Press, Princeton, N. J., 1946. [Имеется перевод: Вейль Г. Классические группы. Их инварианты и представления. — М.: ИЛ, 1947.]
26. *Malhot R. J., Ferigle S. M.*, J. Chem. Phys., **22**, 717 (1954).
Условия Эккарта в вильсоновском рассмотрении молекулярных колебаний.
27. *Perlis S.*, Theory of Matrices, Addison-Wesley, Cambridge, Mass., 1952.
Теория матриц.
28. *Намансон Г. А., Адамов М. Н.* — Вестник ЛГУ, сер. физ. и хим., 1973, т. 4, с. 28; 1974, т. 2, с. 24.

29. *Louck J. D.*, *J. Molecular Spectrosc.*, **61**, 107 (1976).
Вывод молекулярного колебательно-вращательного гамильтониана из уравнения Шредингера для молекулярной модели.
30. *Макушкин Ю. С., Улеников О.Н.*, *J. Mol. Spectrosc.* **68**, 1 (1977).
О преобразовании полного электрон-ядерного гамильтониана многоатомной молекулы к внутримолекулярным координатам.
31. *Seiler R.*, presented at Conference on Mathematical Properties of Wave Functions, Bielefeld, Germany, 1978.
Приближение Борна — Оппенгеймера. Доклад на конференции по математическим свойствам волновых функций.
32. *Dennison D. M.*, *Rev. Mod. Phys.*, **3**, 280 (1931); **12**, 175 (1940).
Инфракрасные спектры многоатомных молекул.
33. *Darling B. T., Dennison D. M.*, *Phys. Rev.*, **57**, 128 (1940).
Молекула водяного пара.
34. *Darling B. T.*, *J. Mol. Spectrosc.*, **11**, 67 (1963).
Квантовомеханический гамильтониан в операторно-групповой форме и молекулярный гамильтониан.
35. *Margenau H., Murphy G. M.*, *The Mathematics of Physics and Chemistry*, Van Nostrand, New York, 1943.
Математические методы в физике и химии.
36. *Podolsky B.*, *Phys. Rev.*, **32**, 812 (1928).
Квантовомеханически корректная форма гамильтоновой функции для консервативных систем.
37. *Kemble E. C.*, *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1937.
Фундаментальные принципы квантовой механики.
38. *Watson J. K. G.*, *Mol. Phys.*, **15**, 479 (1968).
Упрощение молекулярного колебательно-вращательного гамильтониана.
39. *Meal J. H., Polo S. R.*, *J. Chem. Phys.*, **24**, 119; 1126 (1956).
Колебания и вращения в многоатомных молекулах. I. Дзета-матрицы. II. Определение коэффициентов кориолисовой связи.
40. *Amat G., Nielsen H. H., Tarrago G.*, *Rotation-Vibration Spectra of Polyatomic Molecules*, Dekker, New York, 1971.
Колебательно-вращательные спектры многоатомных молекул.
41. *Born M., Jordan P.*, *Z. Physik*, **34**, 858 (1925).
К квантовой механике.
42. *Van Vleck J. H.*, *Phys. Rev.*, **35**, 467 (1929).
Об удвоении σ -типа и спине электрона в спектрах двухатомных молекул.
43. *Herman R. C., Shaffer W. H.*, *J. Chem. Phys.*, **16**, 453 (1948).
Вычисление пертурбационных энергий в колебательно-вращательных многоатомных молекулах.
44. *Jahn H. A.*, *Proc. Roy. Soc.*, **A128**, 469; 495 (1938).
Новое кориолисово возмущение в спектре метана. I. Колебательно-вращательный гамильтониан и волновые функции. II. Уровни энергии.
45. *Fermi E.*, *Z. Physik*, **71**, 250 (1931).
Об эффекте Рамана в двуокиси углерода.
46. *Amat G., Nielsen H. H.*, *J. Chem. Phys.*, **29**, 665 (1958).
Колебательно-вращательные энергии молекул в высших порядках.
47. *Hecht K. T.*, *J. Mol. Spectrosc.*, **5**, 355; 390 (1960).
Колебательно-вращательные энергии тетраэдрических молекул XY_4 . Часть I. Теория молекул типа сферического волчка. Часть II. Фундаментальная ν_3 -полоса молекулы CH_4 .

48. *Van Vleck J. H.*, *Rev. Mod. Phys.*, **23**, 213 (1951).
Связывание угловых моментов в молекулах.
49. *Louck J. D.*, Relationship between the Feasible Group and the Point Group of a Rigid Molecule, *Lecture Notes in Chemistry* (J. Hinze, ed.), Vol. V, Springer, Berlin, 1979, p. 57.
Связь между вероятной группой и точечной группой жесткой молекулы.
50. *Longuet-Higgins H. C.*, *Mol. Phys.*, **6**, 445, (1963).
Группы симметрии деформируемых молекул.
51. *Hougen J. T.*, *J. Chem. Phys.*, **37**, 1433 (1962).
Вычисление вращательных уровней энергии для молекул типа симметричного волчка.
52. *Hougen J. T.*, *J. Chem. Phys.*, **39**, 358 (1963).
Вычисление вращательных уровней. II.
53. *Bunker P. R.*, Practically Everything You Ought to Know about the Molecular Symmetry Group. — in: *Vibrational Spectra and Structure* (J. R. Durig, ed.), Vol. III, Dekker, New York, 1975.
Практически все, что вы должны знать о группе молекулярной симметрии.
54. *Bunker P. R.*, *Molecular Symmetry and Spectroscopy*, Academic Press, New York, 1979.
Молекулярная симметрия и спектроскопия.
55. *Harter W. G.*, *Patterson C. W.*, *da Paixano F. J.*, *Rev. Mod. Phys.*, **50**, 37 (1978).
Трансформационные соотношения для систем отсчета и мультипольные переходы в симметричных многоатомных молекулах.
- 55a. *Harter W. G.*, *Phys. Rev.*, **A19**, 2277 (1979).
Теория уровней сверхтонкой и сверхсверхтонкой структуры в симметричных многоатомных молекулах. Треугольные и тетраэдральные молекулы.
- 55b. *Bauder A.*, *Meyer R.*, *Günthard H. H.*, *Mol. Phys.*, **28**, 1305 (1974).
Изометрическая группа деформируемых молекул. Новый подход к группам симметрии деформируемых молекул.
56. *Biedenharn L. C.*, *Gamba A.*, *Rev. Bras. Fis.*, **2**, 319 (1972).
Расщепление вырожденного уровня под действием гамильтониана, нарушающего симметрию.
- 56a. *De Vries E.*, *van Zanten A. J.*, *J. Phys.*, **A7**, 807 (1974).
Расщепление вырожденного уровня под действием гамильтониана, нарушающего симметрию.
57. *Louck J. D.*, *Phys. Rev.*, **A9**, 2273 (1974).
Алгебра расщепления уровней.
58. *Fox K. et al.*, *Phys. Rev.*, **A15**, 1363 (1977).
Теория расщепления уровней: спектр октаэдрически инвариантного тензорного оператора четвертого ранга.
59. *Fox K.*, *J. Mol. Spectrosc.*, **9**, 381 (1962).
Колебательно-вращательные взаимодействия в инфракрасно-активных обертоновых уровнях молекул типа сферического волчка; полосы $2\nu_3$ и $2\nu_4$ для молекулы CH_4 ; $2\nu_3$ для CD_4 .
60. *Moret-Bailly J.*, *Cah. Phys.*, **15**, 237 (1961); *J. Mol. Spectrosc.*, **15**, 344 (1965).
Об интерпретации колебательно-вращательных спектров молекул с симметрией тетраэдра или октаэдра.
Вычисление частот линий в трехкратно вырожденной фундаментальной полосе молекулы типа сферического волчка.
61. *Fox K.*, *Ozier I.*, *J. Chem. Phys.*, **52**, 5044 (1970).
Построение тетраэдрических гармоник.
62. *Moret-Bailly J.*, *Gautier L.*, *Montagutelli J.*, *J. Mol. Spectrosc.*, **15**, 355 (1965).
Коэффициенты Клебша — Гордана для кубической симметрии.
63. *Patera J.*, *Winternitz P.*, *J. Math. Phys.*, **14**, 1130 (1973).
Новый базис для представлений группы вращений. Полиномы Ламе и Гойна.

64. *Kramer P., Moshinsky M.*, Nucl. Phys., **82**, 241 (1966).
Теория групп и гармонические осцилляторы. III. Состояния с перестановочной симметрией.
65. *Krohn B. J.*, Los Alamos Scient. Lab. Report LA-6554-MS, Oct. 1976.
Диагональные коэффициенты $F^{(4)}$ и $F^{(6)}$ для молекул типа сферического волчка в состояниях углового момента вплоть до $J = 100$.
66. *Lea K. R., Leask M. J., Wolf W. P.*, J. Phys. Chem. Solids, **23**, 1381 (1962).
Снятие вырождения углового момента f -электронных термов при помощи полей кубических кристаллов.
67. *Dorney A. J., Watson J. K. G.*, J. Mol. Spectrosc., **42**, 135 (1972).
Запрещенные вращательные спектры многоатомных молекул.
68. *Aldridge J. P. et al.*, J. Mol. Spectrosc., **58**, 165 (1975).
Октаэдрическое расщепление тонкой структуры в ν_3 -полосе молекулы SF_6 .
69. *McDowell R. S. et al.*, Optics Commun., **17**, 178 (1976).
Идентификация переходов в молекулах SF_6 , накачиваемых лазером на CO_2 .
70. *McDowell R. S. et al.*, J. Mol. Spectrosc., **68**, 288 (1977).
 Q -ветвь ν_3 -полосы молекулы SF_6 при высоком разрешении: отождествление уровней, накачиваемых при помощи лазера $P(16)$ на CO_2 .
71. *Harter W. G., Patterson C. W.*, Dimension, **62**, No. 6, 23 (1978).
Успехи, достигнутые в понимании лазерных спектров симметричных молекул.
72. *Klein F., Sommerfeld A.*, Über die Theorie des Kreisels, Teubner, Stuttgart, 1965, Heft I, Kapitel II, § 8.
К теории волчков.
73. *Harter W. G., Patterson C. W.*, J. Chem. Phys., **66**, 4872 (1977).
Расщепление оптических уровней в октаэдрической симметрии и вращательные спектры молекул SF_6 . I. Качественные черты уровней с большими J .
- 73а *Judd B. R.* — in: Symmetries in Science (B. Gruber, R. S. Millman, eds.), Plenum, New York, 1980, pp. 151 — 160.
Теория групп в атомной и молекулярной физике.
74. *Patterson C. W., Harter W. G.*, J. Chem. Phys., **66**, 4886 (1977).
Расщепление орбитальных уровней в октаэдрической симметрии и вращательные спектры молекул SF_6 . II. Качественное рассмотрение уровней с большими J .
75. *Galbraith H. W. et al.*, J. Mol. Spectrosc., **73**, 475 (1978).
Выражения для частот линий трехкратно вырожденных фундаментальных полос молекул типа сферического волчка, пригодные для большого углового момента.
76. *Tolman R. C.*, The Principles of Statistical Mechanics, Oxford Univ. Press, London, 1938.
Принципы статистической механики.
77. *Galbraith H. W.*, Optics Lett., **3**, 154 (1978).
Однофотонные переходные моменты в возбужденных состояниях молекул типа сферического волчка.
- 77а. *Ackerhalt J.R. et al.*, J. Chem. Phys., **69**, 1461 (1978).
Анализ $3\nu_3$ -полосы в молекуле SF_6 .
- 77б. *Patterson C. W., Krohn B. J., Pine A. S.*, J. Mol. Spectrosc., **88**, 133 (1981).
Анализ взаимодействующих полос в спектре высокого разрешения $3\nu_3$ -полосы молекулы SF_6 .
78. *Wilson E. B., Jr.*, J. Chem. Phys., **3**, 276 (1935).
Статистические веса вращательных уровней многоатомных молекул, включая метан, аммиак, бензол, циклопропан и этилен.
79. *Canille C. D., Galbraith H. W.*, J. Mol. Spectrosc., **58**, 158 (1975).
Статистические веса для октаэдрических молекул типа сферического волчка.
80. *Galbraith H. W.*, J. Chem. Phys., **68**, 1677 (1978).

- $SU(2s + 1) \times \zeta_r$ и спиновые статистические веса для тетраэдрических XY_4 , тригонально-бипирамидальных XY_5 и октаэдрических XY_6 молекул.
80. Weber A., J. Chem. Phys., 73, 3952, (1980).
Ро-вибронные спектры, предельно допустимые виды и статистические веса ядерных спинов для молекул типа симметричного волчка, принадлежащих к точечным группам D_{nd} и D_{nh} ($n \leq 6$).
 81. Löete M. et al., C. R. Acad. Sci. Paris, B285, 175 (1977).
Спектральные постоянные ν_3 -полосы молекулы $^{32}\text{SF}_6$, вычисленные для части спектра насыщенного поглощения.
 82. Kim K. C. et al., J. Mol. Spectrosc., 76, 322 (1979).
Анализ ν_4 -области (615 см^{-1}) фурье-преобразования и диоднолазерные спектры молекулы SF_6 .
 83. Biedenharn L. C., Louck J. D., Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

Приложение

В этом приложении даны таблицы алгебраических коэффициентов и других величин, которые часто необходимы в приложениях теории углового момента к решению физических задач. Сюда включены следующие таблицы.

Таблица 1. Алгебраические таблицы коэффициентов Вигнера для $j_2 = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3$ ¹⁾.

Таблица 2. Алгебраические таблицы коэффициентов Рака для $l = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$ ²⁾.

Таблица 3. Алгебраические таблицы коэффициентов Рака в форме схемного исчисления для $j_2 = \frac{1}{2}, 1$.

Таблица 4. Шаровые сферические и сферические функции для $l = 0, 1, 2, 3, 4$.

Таблица 5. Тензорные гармоники.

Таблица 6. Операторы Вигнера для $\Delta = [0\ 0]$.

Таблица 7. Операторы Рака.

Таблица 8. Редуцированные матричные элементы.

Все необходимые объяснения имеются в таблицах.

Таблицы 1, 2, 4, 5 и 8 содержат стандартный материал из общей литературы (см. примечания внизу на этой странице и литературу к таблицам). Наиболее обширные таблицы алгебраических формул для коэффициентов Вигнера и коэффициентов Рака имеются в книгах Варшаловича и др. [13] и Ишидзу и др. [22] соответственно.

Таблицы 3, 6 и 7 состоят из формул, которые иллюстрируют алгебраическую структуру теории углового момента, рассмотренную в настоящей книге. В частности, в табл. 7 суммируются свойства одного класса операторов Рака, которые раньше рассматривались только для частного случая $\mu = 0$ и в другой алгебраической формулировке (см. [37, 55] в списке литературы к гл. 3).

¹⁾ Таблицы для $j_2 = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$ взяты из книги Коидона и Шортли [2], для $j_2 = \frac{5}{2}$ — из статьи Мелвина и Свами [6], а для $j_2 = 3$ — из статьи Фалкофа и др. [4]. Перепечатывается с разрешения.

²⁾ Эти таблицы взяты из статьи Биденхариа и др. [17]. Перепечатывается с разрешения.

- $SU(2s + 1) \times \zeta_r$ и спиновые статистические веса для тетраэдрических XY_4 , тригонально-бипирамидальных XY_5 и октаэдрических XY_6 молекул.
80. Weber A., J. Chem. Phys., 73, 3952, (1980).
Ро-вибронные спектры, предельно допустимые виды и статистические веса ядерных спинов для молекул типа симметричного волчка, принадлежащих к точечным группам D_{nd} и D_{nh} ($n \leq 6$).
81. Löete M. et al., C. R. Acad. Sci. Paris, B285, 175 (1977).
Спектральные постоянные ν_3 -полосы молекулы $^{32}\text{SF}_6$, вычисленные для части спектра насыщенного поглощения.
82. Kim K. C. et al., J. Mol. Spectrosc., 76, 322 (1979).
Анализ ν_4 -области (615 см^{-1}) фурье-преобразования и диоднолазерные спектры молекулы SF_6 .
83. Biedenharn L. C., Louck J. D., Racah — Wigner Algebra in Quantum Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1981.
Алгебра Рака — Вигнера в квантовой теории.

Приложение

В этом приложении даны таблицы алгебраических коэффициентов и других величин, которые часто необходимы в приложениях теории углового момента к решению физических задач. Сюда включены следующие таблицы.

Таблица 1. Алгебраические таблицы коэффициентов Вигнера для $j_2 = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3$ ¹⁾.

Таблица 2. Алгебраические таблицы коэффициентов Рака для $l = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$ ²⁾.

Таблица 3. Алгебраические таблицы коэффициентов Рака в форме схемного исчисления для $j_2 = \frac{1}{2}, 1$.

Таблица 4. Шаровые сферические и сферические функции для $l = 0, 1, 2, 3, 4$.

Таблица 5. Тензорные гармоники.

Таблица 6. Операторы Вигнера для $\Delta = [0\ 0]$.

Таблица 7. Операторы Рака.

Таблица 8. Редуцированные матричные элементы.

Все необходимые объяснения имеются в таблицах.

Таблицы 1, 2, 4, 5 и 8 содержат стандартный материал из общей литературы (см. примечания внизу на этой странице и литературу к таблицам). Наиболее обширные таблицы алгебраических формул для коэффициентов Вигнера и коэффициентов Рака имеются в книгах Варшаловича и др. [13] и Ишидзу и др. [22] соответственно.

Таблицы 3, 6 и 7 состоят из формул, которые иллюстрируют алгебраическую структуру теории углового момента, рассмотренную в настоящей книге. В частности, в табл. 7 суммируются свойства одного класса операторов Рака, которые раньше рассматривались только для частного случая $\mu = 0$ и в другой алгебраической формулировке (см. [37, 55] в списке литературы к гл. 3).

¹⁾ Таблицы для $j_2 = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$ взяты из книги Кондона и Шортли [2], для $j_2 = \frac{5}{2}$ — из статьи Мелвина и Свами [6], а для $j_2 = 3$ — из статьи Фалкофа и др. [4]. Перепечатывается с разрешения.

²⁾ Эти таблицы взяты из статьи Биденхарна и др. [17]. Перепечатывается с разрешения.

Таблица 1

Алгебраические таблицы коэффициентов Вигнера для $j_2 = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3$

$$C_{m-m_2 \quad m_2 \quad m}^{j_1 \quad \frac{1}{2} \quad j} = (-1)^{j_1+m-\frac{1}{2}} (2j+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_1 & \frac{1}{2} & j \\ m-m_2 & m_2 & -m \end{pmatrix}$$

$$j = \quad \quad \quad m_2 = \frac{1}{2} \quad \quad \quad m_2 = -\frac{1}{2}$$

$$j_1 + \frac{1}{2} \quad \quad \quad \left(\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad \left(\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$j_1 - \frac{1}{2} \quad \quad \quad - \left(\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad \left(\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_{m-m_2 \quad m_2 \quad m}^{j_1 \quad 1 \quad j} = (-1)^{j_1+m-1} (2j+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_1 & 1 & j \\ m-m_2 & m_2 & -m \end{pmatrix}$$

$$j = \quad \quad \quad m_2 = 1 \quad \quad \quad m_2 = 0 \quad \quad \quad m_2 = -1$$

$$j_1 + 1 \quad \quad \quad \left(\frac{(j_1 + m)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad \left(\frac{(j_1 - m + 1)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(j_1 + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad \left(\frac{(j_1 - m)(j_1 - m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$j_1 \quad \quad \quad - \left(\frac{(j_1 + m)(j_1 - m + 1)}{2j_1(j_1 + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad \frac{m}{(j_1(j_1 + 1))^{\frac{1}{2}}} \quad \quad \quad \left(\frac{(j_1 - m)(j_1 + m + 1)}{2j_1(j_1 + 1)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$j_1 - 1 \quad \quad \quad \left(\frac{(j_1 - m)(j_1 - m + 1)}{2j_1(2j_1 + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad - \left(\frac{(j_1 - m)(j_1 + m)}{j_1(2j_1 + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad \left(\frac{(j_1 + m + 1)(j_1 + m)}{2j_1(2j_1 + 1)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_{m-m_2 \quad m_2 \quad m}^{j_1 \quad \frac{3}{2} \quad j} = (-1)^{j_1+m-\frac{3}{2}} (2j+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_1 & \frac{3}{2} & j \\ m-m_2 & m_2 & -m \end{pmatrix}$$

$$j = \quad \quad \quad m_2 = \frac{3}{2} \quad \quad \quad m_2 = \frac{1}{2}$$

$$j_1 + \frac{3}{2} \quad \quad \quad \left[\frac{(j_1 + m - \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{3}{2})}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad \left[\frac{3(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{3}{2})(j_1 - m + \frac{3}{2})}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$j_1 + \frac{1}{2} \quad \quad \quad - \left[\frac{3(j_1 + m - \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{3}{2})}{2j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad - (j_1 - 3m + \frac{3}{2}) \left[\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$j_1 - \frac{1}{2} \quad \quad \quad \left[\frac{3(j_1 + m - \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{3}{2})}{(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad - (j_1 + 3m - \frac{1}{2}) \left[\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$j_1 - \frac{3}{2} \quad \quad \quad \left[\frac{(j_1 - m - \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{3}{2})}{2j_1(2)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \quad \quad \left[\frac{3(j_1 + m - \frac{1}{2})(j_1 - m - \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})}{2j_1(2)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

Таблица 1 (продолжение)

$j =$	$m_2 = -\frac{1}{2}$	$m_2 = -\frac{1}{2}$
$j_1 + \frac{1}{2}$	$\left[\frac{3(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{3}{2})}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1 - m - \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{3}{2})}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 + \frac{1}{2}$	$(j_1 + 3m + \frac{1}{2}) \left[\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{3(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m - \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})}{2j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 - \frac{1}{2}$	$-(j_1 - 3m - \frac{1}{2}) \left[\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{3(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{3}{2})(j_1 - m - \frac{1}{2})}{(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 - \frac{1}{2}$	$-\left[\frac{3(j_1 + m - \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m - \frac{1}{2})}{2j_1(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1 + m - \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{3}{2})}{2j_1(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$C_{m-m_2}^{j_1} \frac{2}{m_2} \frac{j}{m} = (-1)^{j_1+m-2} (2j+1)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{j_1}{m-m_2} \frac{2}{m_2} \frac{j}{-m} \right)$		
$j =$	$m_2 = 2$	$m_2 = 1$
$j_1 + 2$	$\left[\frac{(j_1 + m - 1)(j_1 + m)(j_1 + m + 1)(j_1 + m + 2)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)(2j_1 + 4)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1 - m + 2)(j_1 + m + 2)(j_1 + m + 1)(j_1 + m)}{(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(2j_1 + 3)(j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 + 1$	$-\left[\frac{(j_1 + m - 1)(j_1 + m)(j_1 + m + 1)(j_1 - m + 2)}{2j_1(j_1 + 1)(j_1 + 2)(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$-(j_1 - 2m + 2) \left[\frac{(j_1 + m + 1)(j_1 + m)}{2j_1(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$
j_1	$\left[\frac{3(j_1 + m - 1)(j_1 + m)(j_1 - m + 1)(j_1 - m + 2)}{(2j_1 - 1)2j_1(j_1 + 1)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$(1 - 2m) \left[\frac{3(j_1 - m + 1)(j_1 + m)}{(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 - 1$	$-\left[\frac{(j_1 + m - 1)(j_1 - m)(j_1 - m + 1)(j_1 - m + 2)}{2(j_1 - 1)j_1(j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$(j_1 + 2m - 1) \left[\frac{(j_1 - m + 1)(j_1 - m)}{(j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 - 2$	$\left[\frac{(j_1 - m - 1)(j_1 - m)(j_1 - m + 1)(j_1 - m + 2)}{(2j_1 - 2)(2j_1 - 1)2j_1(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$-\left[\frac{(j_1 - m + 1)(j_1 - m)(j_1 - m - 1)(j_1 + m - 1)}{(j_1 - 1)(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j =$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$j_1 + 2$	$\left[\frac{3(j_1 - m + 2)(j_1 - m + 1)(j_1 + m + 2)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)(j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1 - m + 2)(j_1 - m + 1)(j_1 - m)(j_1 + m + 2)}{(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(2j_1 + 3)(j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 + 1$	$m \left[\frac{3(j_1 - m + 1)(j_1 + m + 1)}{j_1(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$(j_1 + 2m + 2) \left[\frac{(j_1 - m + 1)(j_1 - m)}{j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$
j_1	$\frac{3m^2 - j_1(j_1 + 1)}{[(2j_1 - 1)j_1(j_1 + 1)(2j_1 + 3)]^{\frac{1}{2}}}$	$(2m + 1) \left[\frac{3(j_1 - m)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 - 1$	$-m \left[\frac{3(j_1 - m)(j_1 + m)}{(j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)(j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$-(j_1 - m - 1) \left[\frac{(j_1 + m + 1)(j_1 + m)}{(j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 - 2$	$-\left[\frac{3(j_1 - m)(j_1 - m - 1)(j_1 + m)(j_1 + m - 1)}{(2j_1 - 2)(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$-\left[\frac{(j_1 - m - 1)(j_1 + m + 1)(j_1 + m)(j_1 + m - 1)}{(j_1 - 1)(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$

Таблица 1 (продолжение)

$$f \setminus m_2$$
[illegible]

Таблица 1 (продолжение)

$j =$	$m_2 = -2$
$j_1 + 2$	$\left[\frac{(2j_1 - 1)(2j_1 - m)(2j_1 - m + 2)(j_1 - m + 2)(j_1 - m + 1)(2j_1 + 4)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right]$
$j_1 + 1$	$\left[\frac{j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 4)}{(2j_1 - m - 1)(2j_1 - m)(2j_1 - m + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right]$
j_1	$\left[\frac{(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 3)}{(2j_1 - m - 1)(2j_1 - m)(2j_1 - m + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right]$
$j_1 - 1$	$\left[\frac{j_1 - 1 - 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 - m - 1)(2j_1 - m)(2j_1 - m + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right]$
$j_1 - 2$	$\left[\frac{(2j_1 - 2)(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 - m - 1)(2j_1 - m)(2j_1 - m + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right]$

$j \setminus m_2$	$\frac{3}{2}$
$j_1 + \frac{3}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{5}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{7}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{9}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{11}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{13}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{15}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{17}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{19}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$
$j_1 + \frac{21}{2}$	$\left[\frac{(2j_1 + 5)(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 1)} \right] -$

$$C_{j_1}^{m-m_2} = (-1)^{j_1+m} \frac{3}{2} (2j_1+1) \left(\begin{matrix} m-m_2 \\ j_1 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} m-m_2 \\ j_1 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} m-m_2 \\ j_1 \end{matrix} \right)$$

Таблица 1 (продолжение)

$f \setminus m_2$	$-\frac{1}{2}$
$f_1 + \frac{1}{2}$	$\left[\frac{(2f_1 - m + \frac{1}{2})U_1 - m + \frac{1}{2}}{(2f_1 + 4)(2f_1 + 3)(2f_1 + 2)(2f_1 + 1)} \right]_{\frac{1}{2}}$
$f_1 + \frac{3}{2}$	$\left[\frac{(2f_1 + 5)(2f_1 + 3)(2f_1 + 2)(2f_1 + 1)}{(5U_1 + m + \frac{1}{2})U_1 - m + \frac{1}{2}} \right]_{\frac{1}{2}}$
$f_1 + \frac{1}{2}$	$\left[\frac{(2f_1 + 4)(2f_1 + 3)(2f_1 + 2)(2f_1 + 1)}{(10U_1 + m + \frac{1}{2})U_1 - m + \frac{1}{2}} \right]_{\frac{1}{2}}$
$f_1 - \frac{1}{2}$	$\left[\frac{(2f_1 + 3)(2f_1 + 2)(2f_1 + 1)(2f_1 - 2)}{(10U_1 + m + \frac{1}{2})U_1 + m + \frac{1}{2}} \right]_{\frac{1}{2}}$
$f_1 - \frac{3}{2}$	$\left[\frac{(2f_1 + 2)(2f_1 + 1)(2f_1 - 1)(2f_1 - 3)}{(5U_1 + m + \frac{1}{2})U_1 + m + \frac{1}{2}} \right]_{\frac{1}{2}}$
$f_1 - \frac{1}{2}$	$\left[\frac{(2f_1 + 1)(2f_1 - 1)(2f_1 - 2)(2f_1 - 3)}{(U_1 + m + \frac{1}{2})U_1 + m + \frac{1}{2}} \right]_{\frac{1}{2}}$

$$C_{M-f}^{M-f} = (-1)^f (-1)^{M-f} \binom{M-f}{f} \binom{M-f}{3} \binom{M-f}{j}$$

Столбец 1 ($m = 3$)

$j = f + 3$	$\left[\frac{(8U + 1)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + M + 3)}{(3U + M + 2)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)} \right]_{\frac{1}{2}}$
$j + 2$	$\left[\frac{(8U + 1)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)}{(3U + M + 2)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)} \right]_{\frac{1}{2}}$
$j + 1$	$\left[\frac{(8U + 1)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)}{(15U + M - 2)U + M - 2)(U + M - 1)U + M - 1)U + M - 1)U + M - 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)} \right]_{\frac{1}{2}}$
j	$\left[\frac{(8U + 1)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)}{(15U + M - 2)U + M - 2)(U + M - 1)U + M - 1)U + M - 1)U + M - 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)} \right]_{\frac{1}{2}}$
$j - 1$	$\left[\frac{(8U + 1)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)}{(15U + M - 2)U + M - 2)(U + M - 1)U + M - 1)U + M - 1)U + M - 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)} \right]_{\frac{1}{2}}$
$j - 2$	$\left[\frac{(8U + 1)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)}{(3U + M + 2)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)} \right]_{\frac{1}{2}}$
$j - 3$	$\left[\frac{(8U + 1)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)}{(3U + M + 2)U + M + 2)(U + M + 1)U + M + 2)(U + 3)U - M + 2)(U + 1)U - M - 1)U - M - 1)U - M - 2)(U - 2)(U - 3)} \right]_{\frac{1}{2}}$

Таблица 1 (продолжение)

[illegible]

Таблица 1 (продолжение)

Столбец 2 ($m = 2$)

$$\begin{aligned}
 J = j + 3 & \quad \left[\frac{3(U - M + 3)(U + M - 1)(U + M)(U + M + 1)(U + M + 2)(U + M + 3)}{4(U + 1)(U + 2)(U + 3)(2j + 1)(2j + 3)(2j + 5)} \right]^{1/2} \\
 j + 2 & \quad - \left(j - \frac{3}{2}M + 3 \right) \left[\frac{(U + M - 1)(U + M)(U + M + 1)(U + M + 2)}{j(U + 1)(U + 2)(U + 3)(2j + 1)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j + 1 & \quad (U - 3M + 4) \left[\frac{5(U - M + 2)(U + M - 1)(U + M)(U + M + 1)}{4j(U + 1)(U + 2)(2j + 1)(2j + 5)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j & \quad (M - 1) \left[\frac{15(U + M)(U - M + 1)(U - M + 2)(U + M - 1)}{2j(U + 1)(U + 2)(U - 1)(2j + 3)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 1 & \quad - (U + 3M - 3) \left[\frac{5(U + M - 1)(U - M + 2)(U - M + 1)(U - M)}{4(U + 1)(U - 1)(2j + 1)(2j - 3)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j - 2 & \quad \left(j + \frac{3}{2}M - 2 \right) \left[\frac{(U - M + 2)(U - M + 1)(U - M)(U - M - 1)}{(U + 1)(U - 1)(U - 2)(2j + 1)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 3 & \quad - \left[\frac{3(U + M - 2)(U - M + 2)(U - M + 1)(U - M)(U - M - 1)(U - M - 2)}{4j(U - 1)(U - 2)(2j + 1)(2j - 1)(2j - 3)} \right]^{1/2}
 \end{aligned}$$

Столбец 3 ($m = 1$)

$$\begin{aligned}
 J = j + 3 & \quad \left[\frac{15(U - M + 2)(U - M + 3)(U + M)(U + M + 1)(U + M + 2)(U + M + 3)}{8(U + 1)(U + 2)(U + 3)(2j + 1)(2j + 3)(2j + 5)} \right]^{1/2} \\
 j + 2 & \quad - (U - 3M + 3) \left[\frac{5(U - M + 2)(U + M)(U + M + 1)(U + M + 2)}{8j(U + 1)(U + 2)(U + 3)(2j + 1)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j + 1 & \quad - \left\{ j(U + 7) + 10(M - 1) \left(j - \frac{3}{2}M + 1 \right) \right\} \left[\frac{(U + M)(U + M + 1)}{8j(U + 1)(U + 2)(2j + 1)(2j + 5)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j & \quad \{ j(U + 1) - 5M(M - 1) - 2 \} \left[\frac{3(U - M + 1)(U + M)}{4j(U + 1)(U + 2)(U - 1)(2j + 3)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 1 & \quad \left\{ (U + 1)(U - 6) - 10(M - 1) \left(j + \frac{3}{2}M \right) \right\} \left[\frac{(U - M + 1)(U - M)}{8(U + 1)(U - 1)(2j + 1)(2j - 3)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j - 2 & \quad - (U + 3M - 2) \left[\frac{5(U + M - 1)(U - M + 1)(U - M)(U - M - 1)}{8(U + 1)(U - 1)(U - 2)(2j + 1)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 3 & \quad \left[\frac{15(U + M - 1)(U + M - 2)(U - M + 1)(U - M)(U - M - 1)(U - M - 2)}{8j(U - 1)(U - 2)(2j + 1)(2j - 1)(2j - 3)} \right]^{1/2}
 \end{aligned}$$

Таблица 1 (продолжение)

Столбец 4 ($m = 0$)

$$\begin{aligned}
 J = j + 3 & \left[\frac{5J - M + 1)(J - M + 2)(J - M + 3)(J + M + 1)(J + M + 2)(J + M + 3)}{2J + 1)(J + 2)(J + 3)(2j + 1)(2j + 3)(2j + 5)} \right]^{1/2} \\
 j + 2 & M \left[\frac{15(J - M + 1)(J - M + 2)(J + M + 1)(J + M + 2)}{2j(J + 1)(J + 2)(J + 3)(2j + 1)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j + 1 & - \{j(J + 2) - 5M^2\} \left[\frac{3(J + M + 1)(J - M + 1)}{2j(J + 1)(J + 2)(2j + 1)(2j + 3)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j & - M \{3j(J + 1) - 5M^2 - 1\} \left[\frac{1}{j(J + 1)(J + 2)(J - 1)(2j + 3)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 1 & (j^2 - 5M^2 - 1) \left[\frac{3(J - M)(J + M)}{2J + 1)(j(J - 1)(2j + 1)(2j - 3)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j - 2 & M \left[\frac{15(J + M)(J + M - 1)(J - M)(J - M - 1)}{2(J + 1)j(J - 1)(J - 2)(2j + 1)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 3 & - \left[\frac{5(J + M)(J - M - 1)(J + M - 2)(J - M)(J - M - 1)(J - M - 2)}{2j(J - 1)(J - 2)(2j + 1)(2j - 1)(2j - 3)} \right]^{1/2}
 \end{aligned}$$

Столбец 5 ($m = -1$)

$$\begin{aligned}
 J = j + 3 & \left[\frac{15(J + M + 2)(J + M + 3)(J - M)(J - M + 1)(J - M + 2)(J - M + 3)}{8(J + 1)(J + 2)(J + 3)(2j + 1)(2j + 3)(2j + 5)} \right]^{1/2} \\
 j + 2 & (J + 3M + 3) \left[\frac{5(J + M + 2)(J - M)(J - M + 1)(J - M + 2)}{8j(J + 1)(J + 2)(J + 3)(2j + 1)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j + 1 & - \left\{ j(J + 7) - 10(M + 1) \left(j + \frac{3}{2} M + 1 \right) \right\} \left(\frac{J - M)(J - M + 1)}{8j(J + 1)(J + 2)(2j + 1)(2j + 3)(2j - 1)} \right) \right]^{1/2} \\
 j & - \{j(J + 1) - 5M(M + 1) - 2\} \left[\frac{3(J + M + 1)(J - M)}{4j(J + 1)(J + 2)(J - 1)(2j + 3)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 1 & - \left\{ j(J + 1)(J - 6) + 10(M + 1) \left(j - \frac{3}{2} M \right) \right\} \left(\frac{J + M + 1)(J + M)}{8(J + 1)j(J - 1)(2j + 1)(2j - 3)(2j + 3)} \right) \right]^{1/2} \\
 j - 2 & (J - 3M - 2) \left[\frac{5(J - M - 1)(J + M + 1)(J + M)(J + M - 1)}{8(J + 1)j(J - 1)(J - 2)(2j + 1)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 3 & \left[\frac{15(J - M - 1)(J - M - 2)(J + M + 1)(J + M)(J + M - 1)(J + M - 2)}{8j(J - 1)(J - 2)(2j + 1)(2j - 1)(2j - 3)} \right]^{1/2}
 \end{aligned}$$

Таблица 1 (продолжение)

Столбец 6 ($m = -2$)

$$\begin{aligned}
 J = j + 3 & \left[\frac{3(j + M + 3)(j - M - 1)(j - M)(j - M + 1)(j - M + 2)(j - M + 3)}{4(j + 1)(j + 2)(j + 3)(2j + 1)(2j + 3)(2j + 5)} \right]^{1/2} \\
 j + 2 & \left(j + \frac{3}{2}M + 3 \right) \left[\frac{(j - M - 1)(j - M)(j - M + 1)(j - M + 2)}{j(j + 1)(j + 2)(j + 3)(2j + 1)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j + 1 & (j + 3M + 4) \left[\frac{5(j + M + 2)(j - M - 1)(j - M)(j - M + 1)}{4j(j + 1)(j + 2)(2j + 1)(2j + 5)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j & (M + 1) \left[\frac{15(j - M)(j + M + 1)(j + M + 2)(j - M - 1)}{2j(j + 1)(j + 2)(j - 1)(2j + 3)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 1 & -(j - 3M - 3) \left[\frac{5(j - M - 1)(j + M + 2)(j + M + 1)(j + M)}{4(j + 1)j(j - 1)(2j + 1)(2j - 3)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j - 2 & - \left(j - \frac{3}{2}M - 2 \right) \left[\frac{(j + M + 2)(j + M + 1)(j + M)(j + M - 1)}{(j + 1)(j - 1)(j - 2)(2j + 1)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 3 & - \left[\frac{3(j - M - 2)(j + M + 2)(j + M + 1)(j + M)(j + M - 1)(j + M - 2)}{4j(j - 1)(j - 2)(2j + 1)(2j - 1)(2j - 3)} \right]^{1/2}
 \end{aligned}$$

Столбец 7 ($m = -3$)

$$\begin{aligned}
 J = j + 3 & \left[\frac{(j - M - 2)(j - M - 1)(j - M)(j - M + 1)(j - M + 2)(j - M + 3)}{8(j + 1)(j + 2)(j + 3)(2j + 1)(2j + 3)(2j + 5)} \right]^{1/2} \\
 j + 2 & \left[\frac{3(j - M - 2)(j - M - 1)(j - M)(j - M + 1)(j - M + 2)(j + M + 3)}{8j(j + 1)(j + 2)(j + 3)(2j + 1)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j + 1 & \left[\frac{15(j - M - 2)(j - M - 1)(j - M)(j - M + 1)(j + M + 2)(j + M + 3)}{8j(j + 1)(j + 2)(2j + 1)(2j + 5)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j & \left[\frac{5(j - M - 2)(j - M - 1)(j - M)(j + M + 1)(j + M + 2)(j + M + 3)}{4j(j + 1)(j + 2)(j - 1)(2j + 3)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 1 & \left[\frac{15(j + M + 3)(j + M + 2)(j + M + 1)(j + M)(j - M - 1)(j - M - 2)}{8(j + 1)j(j - 1)(2j + 1)(2j - 3)(2j + 3)} \right]^{1/2} \\
 j - 2 & \left[\frac{3(j + M + 3)(j + M + 2)(j + M + 1)(j + M)(j + M - 1)(j - M - 2)}{8(j + 1)j(j - 1)(j - 2)(2j + 1)(2j - 1)} \right]^{1/2} \\
 j - 3 & \left[\frac{(j + M + 3)(j + M + 2)(j + M + 1)(j + M)(j + M - 1)(j + M - 2)}{8j(j - 1)(j - 2)(2j + 1)(2j - 1)(2j - 3)} \right]^{1/2}
 \end{aligned}$$

Алгебраические таблицы коэффициентов Рака для $l = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$

$$W(l_1, j_1, l_2, j_2; \frac{1}{2}, L) = (-1)^{l_1 + j_1 + l_2 + j_2} \begin{Bmatrix} l_1 & j_1 & \frac{1}{2} \\ j_2 & l_2 & L \end{Bmatrix}$$

$$l_1 = j_1 + \frac{1}{2}$$

$$l_1 = j_1 - \frac{1}{2}$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{(j_1 + j_2 + L + 2)(j_1 + j_2 - L + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_2 + 1)(2j_2 + 2)} \right]^{1/2}$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{(L - j_1 + j_2 + 1)(L + j_1 - j_2 + 2)}{(2j_1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_2 + 2)} \right]^{1/2}$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{(L + j_1 - j_2 + 1)(L - j_1 + j_2)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_2)(2j_2 + 1)} \right]^{1/2}$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L - 1} \left[\frac{(j_1 + j_2 + L + 1)(j_1 + j_2 - L)}{2j_1(2j_1 + 1)(2j_2)(2j_2 + 1)} \right]^{1/2}$$

$$W(l_1, j_1, l_2, j_2; 1, L) = (-1)^{l_1 + j_1 + l_2 + j_2} \begin{Bmatrix} l_1 & j_1 & 1 \\ j_2 & l_2 & L \end{Bmatrix}$$

$$l_2 = j_2 + 1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{(L + j_1 + j_2 + 3)(L + j_1 + j_2 + 2)(-L + j_1 + j_2 + 1)(L + j_2 + 1)}{4(2j_1 + 3)(j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 3)(j_2 + 1)(2j_2 + 1)} \right]^{1/2}$$

$$l_1 = j_1 + 1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{(L + j_1 + j_2 + 2)(-L + j_1 + j_2 + 1)(L - j_1 + j_2 + 1)(L + j_1 - j_2)}{4j_1(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(2j_2 + 1)(j_2 + 1)(2j_2 + 3)} \right]^{1/2}$$

$$l_1 = j_1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{(L + j_1 - j_2 - 1)(L - j_1 + j_2 + 2)(L - j_1 + j_2 + 1)}{4(2j_1 + 1)(j_1 - 1)(j_1)(j_2 + 1)(2j_2 + 3)} \right]^{1/2}$$

$$l_1 = j_1 - 1$$

$$W(l_1, l_1, l_2, l_2; \frac{3}{2}, L) = (-1)^{l_1 + l_1 + l_2 + l_2} \begin{Bmatrix} l_1 & l_1 \\ l_2 & l_2 \\ L \end{Bmatrix}$$

$$l_1 = j_1 + \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned} l_2 = j_2 + \frac{3}{2} & \quad (-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{(L + j_1 + j_2 + 4)(L + j_1 + j_2 + 3)(L + j_1 + j_2 + 2)(-L + j_1 + j_2 + 1)(L - j_1 - j_2 + 1)^{1/2}}{(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 2)(2j_1 + 1)(2j_2 + 4)(2j_2 + 3)(2j_2 + 2)(2j_2 + 1)} \right] \\ l_2 = j_2 + \frac{1}{2} & \quad (-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{3(L + j_1 + j_2 + 3)(L + j_1 + j_2 + 1)(L - j_1 + j_2)(-L + j_1 + j_2 + 2)(-L + j_1 + j_2 + 1)^{1/2}}{(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 2)(2j_1 + 1)(2j_2 + 3)(2j_2 + 2)(2j_2 + 1)(2j_2)} \right] \\ l_2 = j_2 - \frac{1}{2} & \quad (-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{(3L + j_1 + j_2 + 2)(L + j_1 - j_2 + 1)(L - j_1 + j_2)(-L + j_1 + j_2 - 1)(L + j_1 + j_2 - L + 1)^{1/2}}{(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 2)(2j_1 + 1)(2j_2 + 2)(2j_2 + 1)(2j_2)(2j_2 - 1)} \right] \\ l_2 = j_2 - \frac{3}{2} & \quad (-1)^{j_1 + j_1 - L} \left[\frac{(L - j_1 + j_2)(L - j_1 + j_2 - 1)(L - j_1 + j_2 - 2)(L + j_1 - j_2 + 3)(L + j_1 - j_2 + 2)(L + j_1 - j_2 + 1)^{1/2}}{(2j_1 + 4)(2j_1 + 3)(2j_1 + 2)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_2)(2j_2 - 1)(2j_2 - 2)} \right] \end{aligned}$$

$$l_1 = j_1 + \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned} l_2 = j_2 + \frac{3}{2} & \quad (-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{3(L + j_1 + j_2 + 3)(L + j_1 + j_2 + 2)(-L + j_1 + j_2 + 1)(L - j_1 + j_2 + 1)(L + j_1 - j_2)^{1/2}}{(2j_1 + 3)(2j_1 + 2)(2j_1 + 1)(2j_1)(2j_2 + 4)(2j_2 + 3)(2j_2 + 2)(2j_2 + 1)} \right] \\ l_2 = j_2 + \frac{1}{2} & \quad (-1)^{j_1 + j_2 - L - 1} \left[\frac{(L + j_1 + j_2 + 2)(-L + j_1 + j_2 + 1)^{1/2} (L + j_1 + j_2 + 3)(-L + j_1 + j_2) - 2(L - j_1 + j_2)(L + j_1 - j_2)}{(2j_1 + 3)(2j_1 + 2)(2j_1 + 1)(2j_1)(2j_2 + 3)(2j_2 + 2)(2j_2 + 1)(2j_2))^{1/2}} \right] \\ l_2 = j_2 - \frac{1}{2} & \quad (-1)^{j_1 + j_2 - L - 1} \left[\frac{(L + j_1 - j_2 + 1)(L - j_1 + j_2)(-L + j_1 + j_2 + 2)(-L + j_1 + j_2 - 1)(L - j_1 + j_2 - 1)(L + j_1 - j_2)}{(2j_1 + 3)(2j_1 + 2)(2j_1 + 1)(2j_1)(2j_2 + 2)(2j_2 + 1)(2j_2)(2j_2 - 1))^{1/2}} \right] \\ l_2 = j_2 - \frac{3}{2} & \quad (-1)^{j_1 + j_2 - L - 1} \left[\frac{3(L + j_1 + j_2 + 1)(L - j_1 + j_2)(L - j_1 + j_2 - 1)(L + j_1 - j_2 + 2)(L + j_1 - j_2 + 1)(-L + j_1 + j_2) - 1}{(2j_1 + 3)(2j_1 + 2)(2j_1 + 1)(2j_1)(2j_2 + 1)(2j_2)(2j_2 - 1)(2j_2 - 2)} \right]^{1/2} \end{aligned}$$

Таблица 2 (продолжение)

$$l_2 = j_2$$

$$l_1 = j_1 + 1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \frac{[(L + j_1 + j_2 + 2)(L + j_1 - j_2 + 1)(l_1 + j_2 - L + 1)(L - j_1 + j_2)]^{1/2}}{4(2j_1 + 1)(l_1 + 1)(2l_1 + 3)(l_2)(l_2 + 1)(2j_2 + 1)}$$

$$l_1 = j_1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L - 1} \left[\frac{j_1(l_1 + 1) + j_2(l_2 + 1) - L(L + 1)}{[4j_1(l_1 + 1)(2l_1 + 1)(l_2)(l_2 + 1)(2j_2 + 1)]^{1/2}} \right]$$

$$l_1 = j_1 - 1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L - 1} \frac{[(L + j_1 + j_2 + 1)(-L + j_1 + j_2)(L + j_1 - j_2)(L - j_1 + j_2 + 1)]^{1/2}}{4(2j_1 + 1)(l_1)(2l_1 - 1)(l_2)(2l_2 + 1)(l_2 + 1)}$$

$$l_2 = j_2 - 1$$

$$l_1 = j_1 + 1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \frac{[(L - j_1 + j_2)(L - j_1 + j_2 - 1)(L + j_1 - j_2 + 2)(L + j_1 - j_2 + 1)]^{1/2}}{4(2j_1 + 1)(l_1 + 1)(2j_1 + 3)(2j_2 - 1)(l_2)(2j_2 + 1)}$$

$$l_1 = j_1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L - 1} \left[\frac{[(L + j_1 + j_2 + 1)(L + j_1 - j_2 + 1)(L + j_2 - j_1)(l_1 + j_2 - L)]^{1/2}}{4j_1(2j_1 + 1)(l_1 + 1)(l_2)(2j_2 + 1)(2j_2 - 1)} \right]$$

$$l_1 = j_1 - 1$$

$$(-1)^{j_1 + j_2 - L} \left[\frac{[(L + j_1 + j_2 + 1)(L + j_1 + j_2)(-L + j_1 + j_2)(-L + j_1 + j_2 - 1)]^{1/2}}{4(2j_1 + 1)(l_1)(2l_1 - 1)(2j_2 + 1)(l_2)(2l_2 - 1)} \right]$$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{(3 - z_f^2)(z - z_f^2)(1 - z_f^2)(z^2)(1 + z_f^2)(z^2)(1 + z_f^2)(z + z_f^2)(3 + z_f^2)(4 + z_f^2)}{(1 + z_f - z_f^2 + z)(2 + z_f - z_f^2 + z)(3 + z_f - z_f^2 + z)(2 - z_f + z_f^2 - z)(1 - z_f + z_f^2 - z)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z)} \right]_{z_f = 1 - z_f - z_f^2 - z}^{z_f = z} \\ & \left[\frac{(2 - z_f^2)(1 - z_f^2)(z^2)(z^2)(z + z_f^2)(z^2)(1 + z_f^2)(z)(2 + z_f^2)(3 + z_f^2)(4 + z_f^2)(z^2)}{(1 + z_f - z_f^2 + z)(2 + z_f - z_f^2 + z)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z)} \right]_{z_f = 1 - z_f - z_f^2 - z}^{z_f = z} \\ & \left[\frac{(1 + z_f^2)(z^2)(z^2)(z + z_f^2)(3 + z_f^2)(z^2)(1 + z_f^2)(z)(2 + z_f^2)(4 + z_f^2)(z^2)}{(1 + z_f + z_f^2 + z - 1)(1 - z_f - z_f^2 - z)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z)} \right]_{z_f = 1 - z_f - z_f^2 - z}^{z_f = z} \\ & \left[\frac{(z_f^2)(z^2)(z^2)(z + z_f^2)(3 + z_f^2)(z^2)(1 + z_f^2)(z)(2 + z_f^2)(4 + z_f^2)(z^2)}{(1 + z_f + z_f^2 + z - 1)(1 - z_f - z_f^2 - z)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z)} \right]_{z_f = 1 - z_f - z_f^2 - z}^{z_f = z} \\ & \left[\frac{(z_f^2)(z^2)(z^2)(z + z_f^2)(3 + z_f^2)(z^2)(1 + z_f^2)(z)(2 + z_f^2)(4 + z_f^2)(z^2)}{(1 + z_f + z_f^2 + z - 1)(1 - z_f - z_f^2 - z)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z)} \right]_{z_f = 1 - z_f - z_f^2 - z}^{z_f = z} \\ & \left[\frac{(1 + z_f^2)(z^2)(z^2)(z + z_f^2)(3 + z_f^2)(z^2)(1 + z_f^2)(z)(2 + z_f^2)(4 + z_f^2)(z^2)}{(1 + z_f + z_f^2 + z - 1)(1 - z_f - z_f^2 - z)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z - 1)(z_f + z_f^2 + z)} \right]_{z_f = 1 - z_f - z_f^2 - z}^{z_f = z} \end{aligned}$$

[illegible]

$$\begin{Bmatrix} 7 & z_l & z_f \\ z & l_f & l_l \end{Bmatrix} z_f + z_l + l_f + l_l(1-) = (7, z, z_f, z_l, l_f, l_l)M$$

$$\begin{aligned} \eta_1 & \left[\frac{(z - z_f)(1 - z_f)(z_f)(1 + z_f)(z - z_f)(1 - z_f)(z_f)(1 + z_f)}{(z - z_f + 1_f + 7 - 1)(1 - z_f + 1_f + 7 - 1)(1 - z_f + 1_f + 7)(z_f + 1_f + 7)(1 + z_f + 1_f + 7)} \right] 1 - z - z_f + 1_f(1 -) & \frac{z}{3} - z_f = z_f \\ \eta_1 & \left[\frac{(1 - z_f)(z_f)(z + z_f)(z - z_f)(1 - z_f)(z_f)(1 + z_f)}{(1 + z_f + 1_f - 7)(z_f - 1_f + 7)(1 - z_f + 1_f + 7 - 1)(z_f + 1_f + 7 - 1)(z_f + 1_f + 7)(1 + z_f + 1_f + 7)} \right] 7 - z_f + 1_f(1 -) & \frac{z}{1} - z_f = z_f \\ \eta_1 & \left[\frac{(z_f)(1 + z_f)(z + z_f)(3 + z_f)(z - z_f)(1 - z_f)(z_f)(1 + z_f)}{(1 + z_f + 1_f - 7)(z - z_f + 1_f - 7)(1 - z_f + 1_f + 7)(z_f - 1_f + 7)(z_f + 1_f + 7 - 1)(1 + z_f + 1_f + 7)(3)} \right] 1 - z - z_f + 1_f(1 -) & \frac{z}{1} + z_f = z_f \\ \eta_1 & \left[\frac{(1 + z_f)(z + z_f)(3 + z_f)(4 + z_f)(z - z_f)(1 - z_f)(z_f)(1 + z_f)}{(1 + z_f + 1_f - 7)(z + z_f + 1_f - 7)(3 + z_f + 1_f - 7)(z - z_f - 1_f + 7)(1 - z_f - 1_f + 7)(z_f + 1_f + 7)} \right] 7 - z_f + 1_f(1 -) & \frac{z}{3} + z_f = z_f \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \gamma_4 \left[\frac{(z - z_f)(1 - z_f)(z_f)(1 + z_f)(1 - f_z)(f_z)(1 + f_z)(z + f_z)}{(1 - z_f + f_z + 7 - \gamma)(z_f + f_z + 7 - \gamma)(1 + z_f - f_z + \gamma)(z_f + f_z + \gamma)(1 + z_f + f_z + \gamma)} \right] 7 - z_f + f_z(1 - \gamma) & \frac{z}{3} - z_f = z_f \\ & \frac{\gamma_4 [(1 + z_f)(z_f)(1 + z_f)(z + z_f)(1 - f_z)(f_z)(1 + f_z)(z + f_z)]}{[(z_f + f_z - \gamma)(z_f - f_z + \gamma)z - (1 - z_f + f_z + 7 - \gamma)(z + z_f + f_z + \gamma)] [(z_f + f_z + 7 - \gamma)(1 + z_f + f_z + \gamma)]} 7 - z_f + f_z(1 - \gamma) & \frac{z}{1} - z_f = z_f \\ & \frac{\gamma_4 [(z_f)(1 + z_f)(z + z_f)(z + z_f)(1 - f_z)(f_z)(1 + f_z)(z + f_z)]}{[(z_f + f_z + 7 - \gamma)(z + z_f + f_z + \gamma)z - (1 - z_f - f_z + \gamma)(z_f + f_z - \gamma)] \gamma_4 [(z_f - f_z + \gamma)(1 + z_f + f_z - \gamma)]} 7 - z_f + f_z(1 - \gamma) & \frac{z}{1} + z_f = z_f \\ & \gamma_4 \left[\frac{(1 + z_f)(z + z_f)(z + z_f)(z + z_f)(1 - f_z)(f_z)(1 + f_z)(z + f_z)}{(1 - z_f - f_z + \gamma)(z_f - f_z + \gamma)(1 + z_f + f_z - \gamma)(z + z_f + f_z - \gamma)(1 + z_f + f_z + 7 - \gamma)(z + z_f + f_z + \gamma)} \right] 7 - z_f + f_z(1 - \gamma) & \frac{z}{3} + z_f = z_f \end{aligned}$$

Таблица 2 (продолжение)

$$l_1 = j_1$$

$$\begin{aligned} l_2 = j_2 + 2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2} \left[\frac{6(L+j_1+j_2+3)(L+j_1+j_2+2)(L+2-j_1+j_2)(L+1-j_1+j_2)(L+j_1-j_2)(L+j_1-j_2-1)(-L+j_1+j_2+2)(-L+j_1+j_2+1)}{(2j_1+3)(2j_1+2)(2j_1+1)(2j_1)(2j_1-1)(2j_2+5)(2j_2+4)(2j_2+3)(2j_2+2)(2j_2+1)} \right]^{1/2} \\ l_2 = j_2 + 1 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2-1} \left[\frac{6(L+j_1+j_2+2)(L+j_1-j_2)(L-j_1+j_2+1)(-L+j_1+j_2+1)}{(2j_1+3)(2j_1+2)(2j_1+1)(2j_1)(2j_1-1)(2j_2+4)(2j_2+3)(2j_2+2)(2j_2+1)(2j_2)} \right]^{1/2} \cdot 2(j_1(j_1+1)+j_2(j_2+2)-L(L+1)) \\ l_2 = j_2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2} \left[\frac{6(L+j_1+j_2+2)(2j_1+1)(2j_1)(2j_1-1)(2j_2+3)(2j_2+2)(2j_2+1)(2j_2)(2j_2-1)}{(2j_1+3)(2j_1+2)(2j_1+1)(2j_1)(2j_1-1)(2j_2+3)(2j_2+2)(2j_2+1)(2j_2)(2j_2-1)} \right]^{1/2} \cdot 6(A(A+1) - \frac{4}{3}j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)) \\ \text{где } A &= L(L+1) - j_1(j_1+1) - j_1(j_1+1) \\ l_2 = j_2 - 1 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2-1} \left[\frac{6(L+j_1+j_2+1)(L-j_1+j_2)(L+j_1-j_2+1)(-L+j_1+j_2)}{(2j_1+3)(2j_1+2)(2j_1+1)(2j_1)(2j_1-1)(2j_2+2)(2j_2+1)(2j_2)(2j_2-1)(2j_2-2)} \right]^{1/2} \cdot 2(j_1(j_1+1)-L(L+1)+j_2^2-1) \\ l_2 = j_2 - 2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2} \left[\frac{6(L+j_1+j_2+1)(L+j_1+j_2)(L-j_1+j_2-1)(-L+j_1+j_2-1)(-L+j_1+j_2-2)(L+j_1-j_2+1)}{(2j_1+3)(2j_1+2)(2j_1+1)(2j_1)(2j_1-1)(2j_2+1)(2j_2-1)(2j_2)(2j_2-1)(2j_2-2)(2j_2-3)} \right]^{1/2} \end{aligned}$$

$$l_1 = j_1 - 1$$

$$\begin{aligned} l_2 = j_2 + 2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2} \left[\frac{4(L+j_1+j_2+2)(-L+j_1+j_2+1)(L-j_1+j_2+3)(L-j_1+j_2+2)(L-j_1+j_2+1)(L-j_1-j_2-1)(L+j_1-j_2-2)}{(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2+1)(2j_2+3)(2j_2+4)(2j_2+5)} \right]^{1/2} \\ l_2 = j_2 + 1 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2-1} \left[\frac{(L-j_1+j_2+2)(L-j_1+j_2+1)(L+j_1-j_2)(L+j_1-j_2-1)}{(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2)(2j_2+1)(2j_2+3)(2j_2+4)} \right]^{1/2} \cdot 2[(j_1-1)(j_1+j_2+2)-(L+j_2+2)(L-j_2-1)] \\ l_2 = j_2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2} \left[\frac{6(L+j_1+j_2+1)(L+j_1-j_2)(-L+j_1+j_2)(L-j_1+j_2+1)}{(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2-1)(2j_2)(2j_2+1)(2j_2+2)(2j_2+3)} \right]^{1/2} \cdot 2(j_1^2-1-(L+j_2+1)(L-j_2)) \\ l_2 = j_2 - 1 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2-1} \left[\frac{(L+j_1+j_2+1)(L+j_1+j_2)(-L+j_1+j_2)(-L+j_1+j_2-1)}{(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2-2)(2j_2-1)(2j_2)(2j_2+1)(2j_2+2)} \right]^{1/2} \cdot 4[(j_1-1)(j_1-j_2+1)-(L+j_2)(L-j_2+1)] \\ l_2 = j_2 - 2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2-1} \left[\frac{4(L+j_1+j_2+1)(L+j_1+j_2)(L+j_1+j_2-1)(L+j_1-j_2+1)(-L+j_1+j_2-1)(-L+j_1+j_2-2)(L-j_1+j_2)}{(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2-1)(2j_2-2)(2j_2-3)(2j_2-2)(2j_2-1)(2j_2)(2j_2+1)} \right]^{1/2} \end{aligned}$$

Таблица 2 (продолжение)

$$l_1 = j_1 - 2$$

$$\begin{aligned} l_2 = j_2 + 2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2} \left[\frac{(L+4-j_1+j_2)(L+3-j_1+j_2)(L+2-j_1+j_2)(L+1-j_1+j_2)(L+1-j_1+j_2)(L+j_1-j_2)(L+j_1-j_2-1)(L+j_1-j_2-2)(L+j_1-j_2-3)}{(2j_1-3)(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2+5)(2j_2+4)(2j_2+3)(2j_2+2)(2j_2+1)} \right]^{1/2} \\ l_2 = j_2 + 1 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2-1} \left[\frac{4(L+1+j_1+j_2)(L+3-j_1+j_2)(L+2-j_1+j_2)(L+2-j_1+j_2)(L+1-j_1+j_2)(L+1-j_1+j_2)(L+j_1-j_2)(L+j_1-j_2-1)(L+j_1-j_2-2)(-L+j_1+j_2)}{(2j_1-3)(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2+4)(2j_2+3)(2j_2+2)(2j_2+1)(2j_2)} \right]^{1/2} \\ l_2 = j_2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2} \left[\frac{6(L+1+j_1+j_2)(L+j_1+j_2)(L+2-j_1+j_2)(L+1-j_1+j_2)(L+j_1-j_2)(L+j_1-j_2-1)(-L+j_1+j_2-1)}{(2j_1-3)(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2+3)(2j_2+2)(2j_2+1)(2j_2)(2j_2-1)} \right]^{1/2} \\ l_2 = j_2 - 1 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2-1} \left[\frac{4(L+1+j_1+j_2)(L+j_1+j_2)(L+j_1+j_2-1)(L+1-j_1+j_2)(L+1-j_1+j_2)(L+j_1-j_2)(L+j_1-j_2-1)(-L+j_1+j_2-2)}{(2j_1-3)(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2+2)(2j_2+1)(2j_2)(2j_2-1)(2j_2-2)} \right]^{1/2} \\ l_2 = j_2 - 2 & \quad (-1)^{L-j_1-j_2} \left[\frac{(L+1+j_1+j_2)(L+j_1+j_2)(L+j_1+j_2-1)(L+j_1+j_2-2)(-L+j_1+j_2-1)(-L+j_1+j_2-2)(-L+j_1+j_2-3)}{(2j_1-3)(2j_1-2)(2j_1-1)(2j_1)(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2+1)(2j_2)(2j_2-1)(2j_2-2)(2j_2-3)} \right]^{1/2} \end{aligned}$$

Таблица 3

Алгебраические таблицы коэффициентов Рака для $j_2 = \frac{1}{2}, 1$ в форме схемного исчисления

$W_{m - \frac{1}{2} m_2}^{\frac{1}{2} j} (J)$		
$j =$	$m_2 = \frac{1}{2}$	$m_2 = -\frac{1}{2}$
$j_2 + \frac{1}{2}$	$\left[\frac{(j_1 + m + \frac{1}{2})(2J + j_1 - m + \frac{3}{2})}{(2j_1 + 1)(2J + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1 - m + \frac{1}{2})(2J - j_1 - m + \frac{1}{2})}{(2j_1 + 1)(2J + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$j_2 - \frac{1}{2}$	$\left[\frac{(j_1 - m + \frac{1}{2})(2J - j_1 - m + \frac{1}{2})}{(2j_1 + 1)(2J + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1 + m + \frac{1}{2})(2J + j_1 - m + \frac{3}{2})}{(2j_1 + 1)(2J + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$W_{m - m_2}^{\frac{1}{2} j} (J)$		
$j =$	$m_2 = 1$	
$j_1 + 1$	$\left[\frac{(j_1 + m)(j_1 + m + 1)(2J + j_1 - m + 1)(2J + j_1 - m + 2)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2J)(2J + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	
j_1	$- \left[\frac{(j_1 + m)(j_1 - m + 1)(2J + j_1 - m + 1)(2J - j_1 - m)}{2j_1(j_1 + 1)(2J)(2J + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	
$j_1 - 1$	$\left[\frac{(j_1 - m)(j_1 - m + 1)(2J - j_1 - m)(2J - j_1 - m + 1)}{2j_1(2j_1 + 1)(2J)(2J + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	
$j =$	$m_2 = 0$	
$j_1 + 1$	$\left[\frac{(j_1 - m + 1)(j_1 + m + 1)(2J - j_1 - m)(2J + j_1 - m + 2)}{(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(2J)(2J + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}$	
j_1	$\frac{m(2J + 1) - m^2}{[4j_1(j_1 + 1)J(2J + 1)]}$	
$j_1 - 1$	$- \left[\frac{(j_1 - m)(j_1 + m)(2J + j_1 - m + 1)(2J - j_1 - m + 1)}{j_1(2j_1 + 1)(2J)(2J + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$	
$j =$	$m_2 = -1$	
$j_1 + 1$	$\left[\frac{(j_1 + m)(j_1 - m + 1)(2J - j_1 - m)(2J - j_1 - m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2J + 1)(2J + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$	
j_1	$\left[\frac{(j_1 - m)(j_1 + m + 1)(2J + j_1 - m + 2)(2J - j_1 - m + 1)}{2j_1(j_1 + 1)(2J + 1)(2J + 2)} \right]^{\frac{1}{2}}$	
$j_1 - 1$	$\left[\frac{(j_1 + m)(j_1 + m + 1)(2J + j_1 - m + 1)(2J + j_1 - m + 2)}{2j_1(2j_1 + 1)(2J + 1)(2J + 3)} \right]^{\frac{1}{2}}$	

Таблица 4

Шаровые сферические и сферические функции для $l = 0, 1, 2, 3, 4$

l	m	$\sqrt{4\pi} \mathcal{Y}_{lm}(r)$	$\sqrt{4\pi} Y_{lm}(\theta, \varphi)$
0	0	1	1
1	± 1	$\mp \sqrt{\frac{3}{2}} (x \pm iy)$	$\mp \sqrt{\frac{3}{2}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta$
	0	$\sqrt{3} z$	$\sqrt{3} \cos \theta$
2	± 2	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2}} (x \pm iy)^2$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2}} e^{\pm 2i\varphi} \sin^2 \theta$
	± 1	$\mp \sqrt{\frac{15}{2}} (x \pm iy)z$	$\mp \sqrt{\frac{15}{2}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \cos \theta$
	0	$\frac{1}{2} \sqrt{5} (3z^2 - r^2)$	$\frac{1}{2} \sqrt{5} (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	± 3	$\mp \frac{1}{4} \sqrt{35} (x \pm iy)^3$	$\mp \frac{1}{4} \sqrt{35} e^{\pm 3i\varphi} \sin^3 \theta$
	± 2	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{105}{2}} (x \pm iy)^2 z$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{105}{2}} e^{\pm 2i\varphi} \sin^2 \theta \cos \theta$
	± 1	$\mp \frac{1}{4} \sqrt{21} (x \pm iy)(5z^2 - r^2)$	$\mp \frac{1}{4} \sqrt{21} e^{\pm i\varphi} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$
	0	$\frac{1}{2} \sqrt{7} (5z^2 - 3r^2)z$	$\frac{1}{2} \sqrt{7} (5 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta$
4	± 4	$\frac{3}{16} \sqrt{70} (x \pm iy)^4$	$\frac{3}{16} \sqrt{70} e^{\pm 4i\varphi} \sin^4 \theta$
	± 3	$\mp \frac{3}{4} \sqrt{35} (x \pm iy)^3 z$	$\mp \frac{3}{4} \sqrt{35} e^{\pm 3i\varphi} \sin^3 \theta \cos \theta$
	± 2	$\frac{3}{8} \sqrt{10} (x \pm iy)^2 (7z^2 - r^2)$	$\frac{3}{8} \sqrt{10} e^{\pm 2i\varphi} \sin^2 \theta (7 \cos^2 \theta - 1)$
	± 1	$\mp \frac{3}{4} \sqrt{5} (x \pm iy)(7z^2 - 3r^2)z$	$\mp \frac{3}{4} \sqrt{5} e^{\pm i\varphi} \sin \theta (7 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta$
	0	$\frac{15}{8} \left(7z^4 - 6r^2 z^2 + \frac{3}{5} r^4 \right)$	$\frac{15}{8} \left(7 \cos^4 \theta - 6 \cos^2 \theta + \frac{3}{5} \right)$

Тензорные гармоники

Таблица 5

$$\mathcal{T}_{\mu}^k = \langle k \begin{smallmatrix} 0 \\ \mu \end{smallmatrix} -k \rangle \left[\prod_{s=1}^k (4J^2 + 1 - s^2) \right]^{1/2}$$

$$\mathcal{T}_k^k = (-1)^k [(2k)!/k!k!]^{1/2} J_+^k$$

$$\mathcal{T}_{\mu}^{k\dagger} = (-1)^{\mu} \mathcal{T}_{-\mu}^k$$

$$\sum_{\mu} (-1)^{\mu} \mathcal{T}_{\mu}^k \mathcal{T}_{-\mu}^k = \prod_{s=1}^k (4J^2 + 1 - s^2)$$

k	μ	$\mathcal{T}_{\mu}^k$	k	μ	$\mathcal{T}_{\mu}^k$
0	0	1	2	2	$\sqrt{6} J_+^2$
1	1	$-\sqrt{2} J_+$		1	$-\sqrt{6} J_- (2J_3 + 1)$
	0	$2J_3$		0	$2(3J_3^2 - J^2)$
	-1	$\sqrt{2} J_-$		-1	$\sqrt{6} J_- (2J_3 - 1)$
				-2	$\sqrt{6} J_-^2$

k	μ	$\mathcal{T}_{\mu}^k$
3	3	$-2\sqrt{5} J_+^3$
	2	$2\sqrt{30} J_+^2(J_3 + 1)$
	1	$-2\sqrt{3} J_+ (5J_3^2 - J^2 + 5J_3 + 2)$
	0	$4(5J_3^2 - 3J^2 + 1)J_3$
	-1	$2\sqrt{3} J_- (5J_3^2 - J^2 - 5J_3 + 2)$
	-2	$2\sqrt{30} J_-^2(J_3 - 1)$
	-3	$2\sqrt{5} J_-^3$
4	4	$\sqrt{70} J_+^4$
	3	$-2\sqrt{35} J_+^3(2J_3 + 3)$
	2	$2\sqrt{10} J_+^2(7J_3^2 - J^2 + 14J_3 + 9)$
	1	$-\sqrt{5} J_+ (28J_3^3 - 12J^2J_3 + 42J_3^2 - 6J^2 + 38J_3 + 12)$
	0	$70J_+^4 - 60J^2J_3^2 + 6(J^2)^2 + 50J_3^2 - 12J^2$
	-1	$\sqrt{5} J_- (28J_3^3 - 12J^2J_3 - 42J_3^2 + 6J^2 + 38J_3 - 12)$
	-2	$2\sqrt{10} J_-^2(7J_3^2 - J^2 - 14J_3 + 9)$
	-3	$2\sqrt{35} J_-^3(2J_3 - 3)$
	-4	$\sqrt{70} J_-^4$

Таблица 6

Операторы Вигнера для $\Delta = [00]$

$$\begin{aligned}
 \left\langle \begin{array}{c} 2j \\ j+m+\mu \end{array} \middle| \begin{array}{c} 0 \\ k-k \\ \mu \end{array} \middle| \begin{array}{c} 2j \\ j+m \end{array} \right\rangle &= C_{m\mu m+\mu}^{j k j} = (-1)^k C_{-m, -\mu, -m-\mu}^{j k j} = \\
 &= (-1)^k \left[\frac{(k+\mu)!(k-\mu)!}{k!k!} \right]^{1/2} \left[\frac{[j+m]_{\mu}(j+m+1)_{\mu}}{[2j]_k(2j+2)_k} \right]^{1/2} \times \\
 &\quad \times \sum_{s=0}^{k-\mu} (-1)^s \binom{k}{s} \binom{k}{\mu+s} [j+m]_s [j-m-\mu]_{k-\mu-s}
 \end{aligned}$$

$$\left\langle \begin{array}{c} 0 \\ k-k \\ \mu \end{array} \right\rangle = (-1)^k \left[\frac{(k+\mu)!(k-\mu)!}{k!k!} \right]^{1/2} J_{\mu}^k P_{\mu}^k(J^2, J_3) \prod_{s=1}^k [4J^2 + 1 - s^2]^{-1/2},$$

где $\mu = 0, 1, \dots, k$; $k = 0, 1, \dots, 2j$

$$\langle jm | P_{\mu}^k(J^2, J_3) | jm \rangle = \sum_{s=0}^{k-\mu} (-1)^s \binom{k}{s} \binom{k}{\mu+s} [j+m]_s [j-m-\mu]_{k-\mu-s}$$

$$P_k^k(J^2, J_3) = 1$$

$$P_{k-1}^k(J^2, J_3) = k(1 - k - 2J_3), \quad k \geq 1$$

$$P_{k-2}^k(J^2, J_3) = 3(k-1) \binom{k}{3} - kJ^2 + \binom{2k}{2} [(k-2)J_3 + J_3^2], \quad k \geq 2$$

$$\begin{aligned}
 P_{k-3}^k(J^2, J_3) = &-8 \binom{k-1}{2} \binom{k}{4} + 2 \binom{k}{2} (k-3)J^2 + \binom{k}{2} \left[-\frac{2}{3}(3k^3 - 18k^2 + 32k - 13) + 4J^2 \right] J_3 - \\
 &- \binom{2k}{3} \left[\frac{3}{2}(k-3)J_3^2 + J_3^3 \right], \quad k \geq 3
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{k-4}^k(J^2, J_3) = &30 \binom{k-1}{3} \binom{k}{5} - \binom{k}{2} (k^3 - 9k^2 + 96k - 22)J^2 + \binom{k}{2} (J^2)^2 + \\
 &+ \frac{1}{3} \binom{k}{2} (k-4) [(2k^4 - 17k^3 + 51k^2 - 59k + 21) - 6(2k-3)J^2] J_3 + \\
 &+ \frac{1}{3} \binom{k}{2} (6k^4 - 57k^3 + 182k^2 - 211k + 69) - 6(2k-3)J^2 J_3^2 + \\
 &+ \binom{2k}{4} [2(k-4)J_3^3 + J_3^4], \quad k \geq 4
 \end{aligned}$$

Таблица 7

Операторы Рака

Определение и общие свойства

Форма матричных элементов:

$$\begin{aligned}
 \left\langle j_1 + \Delta, j_2 + \Delta', j \left| \begin{Bmatrix} \Delta & \\ k & -k \\ \Delta' & \end{Bmatrix} \right| j_1 j_2 j \right\rangle &= \left\langle j, m, \mu + \Delta - \Delta', k + \Delta - \Delta' \left| \begin{Bmatrix} \Delta & \\ k & -k \\ \Delta' & \end{Bmatrix} \right| jm \right\rangle = \\
 &= [(2j_1 + 2\Delta + 1)(1j_2 + 1)]^{1/2} W(j, j_1, j_2 + \Delta', k; j_2, j_1 + \Delta) = \\
 &= (-1)^{j + j_1 + j_2 + \Delta' + k} [(2j_1 + 2\Delta + 1)(2j_2 + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j & j_1 & j_2 \\ j_2 + \Delta' & k & j_1 + \Delta \end{Bmatrix},
 \end{aligned}$$

где $\mu = j_1 - j_2$ и $k = j_1 + j_2 + 1$ с областью значений $\mu = j, j - 1, \dots, -j$; $k = j + 1, j + 2, \dots$.

Операторная форма:

$$\begin{Bmatrix} \Delta & \\ k & -k \\ \Delta' & \end{Bmatrix} = N_{\Delta', \Delta}^k(K, H) P_{\Delta', \Delta}^k(J^2, K_3, H_3) [\bar{D}_{\Delta}^k(H_3 + K_3) \underline{D}_{\Delta'}^k(H_3 - K_3)]^{-1},$$

где

$$N_{\Delta', \Delta}^k(K, H) = (K_{\delta})^{|\Delta - \Delta'|} (H_{\delta'})^{|\Delta + \Delta'|}$$

$$\delta = \text{sign}(\Delta - \Delta'), \quad \delta' = \text{sign}(\Delta + \Delta')$$

$$\bar{D}_{\Delta}^k(H_3 + K_3) = [(H_3 + K_3 - k + \Delta)_k + \Delta (H_3 + K_3 + 2\Delta + 1)_{k - \Delta}]^{1/2}$$

$$\underline{D}_{\Delta'}^k(H_3 - K_3) = [(H_3 - K_3 + 1)_{k + \Delta'} (H_3 - K_3 - k + \Delta')_{k - \Delta'}]^{1/2}$$

Частные случаи полиномов $P_{\Delta', \Delta}^k$ даны ниже.

Таблица 7 (продолжение)

Операторное действие:

$$J_+ |jm\mu k\rangle = [(j-m)(j+m+1)]^{1/2} |j, m+1, \mu, k\rangle$$

$$J_- |jm\mu k\rangle = [(j+m)(j-m+1)]^{1/2} |j, m-1, \mu, k\rangle$$

$$J_3 |jm\mu k\rangle = m |jm\mu k\rangle$$

$$K_+ |jm\mu k\rangle = [(j-\mu)(j+\mu+1)]^{1/2} |j, m, \mu+1, k\rangle$$

$$K_- |jm\mu k\rangle = [(j+\mu)(j-\mu+1)]^{1/2} |j, m, \mu-1, k\rangle$$

$$K_3 |jm\mu k\rangle = \mu |jm\mu k\rangle$$

$$H_+ |jm\mu k\rangle = [(k-j)(k+j+1)]^{1/2} |j, m, \mu, k+1\rangle$$

$$H_- |jm\mu k\rangle = [(k+j)(k-j-1)]^{1/2} |j, m, \mu, k-1\rangle$$

$$H_3 |jm\mu k\rangle = k |jm\mu k\rangle$$

Операторы множеств $\{J_+, J_3, J_-\}$ и $\{K_+, K_3, K_-\}$ удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям углового момента; операторы множества $\{H_+, H_3, H_-\}$ удовлетворяют гиперболическим коммутационным правилам. Операторы из разных множеств взаимно коммутируют.

Соотношения между операторами:

$$J^2 = J_3(J_3 + 1) + J_- J_+ = K_3(K_3 + 1) + K_- K_+ = H_3(H_3 - 1) - H_+ H_-$$

$$H_3 + K_3 = (4J_1^2 + 1)^{1/2} - 2j_1 + 1$$

$$H_3 - K_3 = (4J_2^2 + 1)^{1/2} - 2j_2 + 1$$

$$2j_1 \cdot j_2 = J^2 - (H_3^2 + K_3^2 - 1)/2$$

Частные случаи полиномов ($\Delta_1 = k + \Delta$, $\Delta_2 = k - \Delta$)

$$P_{k\Delta}^k = 1, \quad \Delta = k, k-1, \dots, k$$

$$P_{k-1, \Delta}^k = -2kJ^2 + \Delta_1 K_3(K_3 - \Delta_2 + 1) + \Delta_2(H_3 - 1)(H_3 + \Delta_1), \quad -(k-1) \leq \Delta \leq k-1$$

$$P_{k-2, \Delta}^k = k(2k-1)J^4 - (2k-1)J^2[\Delta_1 K_3(K_3 - \Delta_2 + 2) + \Delta_2 H_3(H_3 + \Delta_1 - 2) - 2\Delta_1 \Delta_2 + 2k] +$$

$$+ \frac{1}{2} \Delta_1 (\Delta_1 - 1) K_3^2 - \Delta_1 (\Delta_1 - 1) (\Delta_2 - 1) K_3^2 + \frac{1}{2} \Delta_1 (\Delta_1 - 1) (\Delta_2^2 - 7\Delta_2 + 5) K_3^2 +$$

$$+ \frac{1}{2} \Delta_1 (\Delta_1 - 1) (\Delta_2^2 - 7\Delta_2 + 2) K_3 + \frac{1}{2} \Delta_2 (\Delta_2 - 1) H_3^2 + (\Delta_1 - 2) \Delta_2 (\Delta_2 - 1) H_3^2 +$$

$$+ \frac{1}{2} \Delta_2 (\Delta_2 - 1) (\Delta_1^2 - 7\Delta_1 + 5) H_3^2 - \frac{1}{2} \Delta_2 (\Delta_2 - 1) (3\Delta_1^2 - 7\Delta_1 + 2) H_3 + \Delta_1 \Delta_2 K_3^2 H_3^2 -$$

$$- \Delta_1 \Delta_2 (\Delta_2 - 2) K_3 H_3^2 + \Delta_1 \Delta_2 (\Delta_1 - 2) K_3^2 H_3 - \Delta_1 (\Delta_1 - 2) \Delta_2 (\Delta_2 - 2) K_3 H_3 + \Delta_1 (\Delta_1 - 1) \Delta_2 (\Delta_2 - 1)$$

$$- (k-2) \leq \Delta \leq k-2$$

Таблица 7 (продолжение)

Полиномы $P_0^k = P_{0,0}^k$:

Инвариантное построение:

$$P_0^k = \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \mathcal{T}_{\mu}^k(\mathbf{J}_1) \mathcal{T}_{-\mu}^k(\mathbf{J}_2)$$

Рекурсивное соотношение:

$$P_0^{k+1} = \frac{2k+1}{k+1} [4\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 + k(k+1)] P_0^k - \\ - \frac{k}{k+1} [4\mathbf{J}_1^2 - (k^2-1)][4\mathbf{J}_2^2 - (k^2-1)] P_0^{k-1}, \quad P_0^0 = 1$$

$$P_0^1 = 4\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$$

$$P_0^2 = 4[6(\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2)^2 + 3\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 - 2\mathbf{J}_1^2 \mathbf{J}_2^2]$$

$$P_0^3 = 4^2[10(\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2)^3 + 20(\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2)^2 - 2(\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2)(3\mathbf{J}_1^2 \mathbf{J}_2^2 - \mathbf{J}_1^2 - \mathbf{J}_2^2 - 3) - 5\mathbf{J}_1^2 \mathbf{J}_2^2]$$

$$P_0^4 = 4^2[70(\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2)^4 + 350(\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2)^3 + 2(\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2)^2(-30\mathbf{J}_1^2 \mathbf{J}_2^2 + 25\mathbf{J}_1^2 + \\ + 25\mathbf{J}_2^2 + 195) + 2(\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2)(-85\mathbf{J}_1^2 \mathbf{J}_2^2 + 30\mathbf{J}_1^2 + 30\mathbf{J}_2^2 + 45) + \\ + 3\mathbf{J}_2^2 \mathbf{J}_2^2(2\mathbf{J}_1^2 \mathbf{J}_2^2 - 4\mathbf{J}_1^2 - 4\mathbf{J}_2^2 - 27)]$$

Таблица 8

Редуцированные матричные элементы

Общие свойства

Общие матричные элементы тензорного оператора T^k по отношению к угловому моменту J с базисными состояниями $\{|\alpha jm\rangle\}$:

$$\langle \alpha' j' m' | T_{\mu}^k | \alpha jm \rangle = \langle \alpha' j' | T^k | \alpha j \rangle C_{m\mu m'}^{jkj'} = (-1)^{j' - m'} \langle \alpha' j' | T^k | \alpha j \rangle \begin{pmatrix} j' & k & j \\ -m' & \mu & m \end{pmatrix},$$

где

$$\langle \alpha' j' | T^k | \alpha j \rangle = (-1)^{2k} (2j' + 1)^{1/2} \langle \alpha' j' | T^k | \alpha j \rangle$$

Частные случаи

Сферические функции Y_k [Тензорный оператор по отношению к $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ с базисными состояниями $\langle r\theta\varphi | \alpha l m \rangle = R_{\alpha l}(r) Y_{lm}(\theta\varphi)$]:

$$\langle \alpha' l' | F(r) Y_k | \alpha l \rangle = \left[\frac{(2l+1)(2k+1)}{4\pi(2l'+1)} \right]^{1/2} C_{000}^{kl l'} \int_0^{\infty} r^2 dr R_{\alpha' l'}^*(r) F(r) R_{\alpha l}(r)$$

Вектор положения $\vec{r}$:

$$\langle \alpha' l' | \vec{r} | \alpha l \rangle = \int_0^{\infty} r^2 dr R_{\alpha' l'}^*(r) r R_{\alpha l}(r) \times \begin{cases} \left[\frac{l+1}{2l+3} \right]^{1/2}, & l' = l+1 \\ 0, & l' = l \\ \left[\frac{l}{2l-1} \right]^{1/2}, & l' = l-1 \end{cases}$$

Линейный импульс $\vec{p}$:

$$\langle \alpha' l' | \vec{p} | \alpha l \rangle = -i\hbar \langle \alpha' l' | \vec{r} | \alpha l \rangle \int_0^{\infty} r^2 dr R_{\alpha' l'}^*(r) \left[\frac{dR_{\alpha l}}{dr} + \frac{l(l+1) - l'(l'+1) + 2}{r} R_{\alpha l} \right]$$

Вектор Рунге — Ленца — Паули $\mathbf{A}$:

$$\langle n' l' | \mathbf{A} | n l \rangle = \delta_{n' n} \times \begin{cases} \left[\frac{l(l+1)(n+l+1)(n-l-1)}{(2l+3)} \right]^{1/2}, & l' = l+1 \\ 0, & l' = l \\ - \left[\frac{l(n-l)(n+l)}{2l+1} \right]^{1/2}, & l' = l-1 \end{cases}$$

Таблица 8 (продолжение)

Векторные операторы $\mathbf{J}_1$ и $\mathbf{J}_2$ ($\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$):

$$\langle j_1 j_2 j + 1 | \mathbf{J}_1 | j_1 j_2 j \rangle = -\langle j_1 j_2 j + 1 | \mathbf{J}_2 | j_1 j_2 j \rangle = \\ = \left[\frac{[j(j+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]}{4(j+1)(2j+3)} \right]^{1/2}$$

$$\langle j_1 j_2 | \mathbf{J}_1 | j_1 j_2 j \rangle = \langle j_1 j_2 | \mathbf{J}_2 | j_1 j_2 j \rangle = \frac{j(j+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{[j(j+1)]^{1/2}}$$

$$\langle j_1 j_2 j - 1 | \mathbf{J}_1 | j_1 j_2 j \rangle = -\langle j_1 j_2 j - 1 | \mathbf{J}_2 | j_1 j_2 j \rangle = - \left[\frac{[j(j+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]}{4j(2j-1)} \right]^{1/2}$$

Тензорные операторы $\mathcal{T}^k$ (табл. 5):

$$\langle j | \mathcal{T}^k | j \rangle = [2j]_k (2j+2)_k^{1/2}$$

Тензорное произведение тензорных операторов ($\mathbf{S}^{k_1}$ и $\mathbf{T}^{k_2}$ — тензорные операторы по отношению к $\mathbf{J}$):

$$[\mathbf{S}^{k_1} \times \mathbf{T}^{k_2}]_{\mu}^k = \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1 \mu_2 \mu}^{k_1 k_2 k} S_{\mu_1}^{k_1} T_{\mu_2}^{k_2}$$

$$\langle \alpha' j' | [\mathbf{S}^{k_1} \times \mathbf{T}^{k_2}]^k | \alpha j \rangle = (-1)^{j' + k + j} \sum_{\alpha'' j''} [(2j'' + 1)(2k + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j' & k_1 & j'' \\ k_2 & j & k \end{Bmatrix} \times \\ \times \langle \alpha' j' | \mathbf{S}^{k_1} | \alpha'' j'' \rangle \langle \alpha'' j'' | \mathbf{T}^{k_2} | \alpha j \rangle$$

Тензорное произведение тензорных операторов $\mathbf{T}^{k_1}(1)$ и $\mathbf{T}^{k_2}(2)$, действующих в различных пространствах:

$$[\mathbf{T}^{k_1}(1) \times \mathbf{T}^{k_2}(2)]_{\mu}^k = \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1 \mu_2 \mu}^{k_1 k_2 k} T_{\mu_1}^{k_1}(1) \otimes T_{\mu_2}^{k_2}$$

$$\langle \alpha'_1 \alpha'_2 j'_1 j'_2 j' | [\mathbf{T}^{k_1}(1) \times \mathbf{T}^{k_2}(2)]^k | \alpha_1 \alpha_2 j_1 j_2 j \rangle =$$

$$= \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \\ j'_1 & j'_2 & j' \end{bmatrix} \langle \alpha'_1 j'_1 | \mathbf{T}^{k_1}(1) | \alpha_1 j_1 \rangle \langle \alpha'_2 j'_2 | \mathbf{T}^{k_2}(2) | \alpha_2 j_2 \rangle \\ = \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \\ j'_1 & j'_2 & j' \end{bmatrix} = [(2j'_1 + 1)(2j'_2 + 1)(2j + 1)(2k + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \\ j'_1 & j'_2 & j' \end{Bmatrix}$$

Частные случаи:

$$\langle \alpha'_1 \alpha'_2 j'_1 j'_2 j' | \mathbf{T}^{k_1}(1) \otimes \mathbf{T}^{k_2}(2) | \alpha_1 \alpha_2 j_1 j_2 j \rangle = \\ = (-1)^{j'_1 + k_1 + j_2 + j} [(2j'_1 + 1)(2j + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j' & j_2 & j'_1 \\ k_1 & k_2 & j \end{Bmatrix} \delta_{\alpha'_2 \alpha_2} \delta_{j'_2 j_2} \times \langle \alpha'_1 j'_1 | \mathbf{T}^{k_1}(1) | \alpha_1 j_1 \rangle$$

Таблица 8 (продолжение)

$$\begin{aligned}
& \langle \alpha_1' \alpha_2' j_1' j_2' j' \| \mathbf{1}^{(j_1)} \otimes \mathbf{T}^{k_2(2)} \| \alpha_1 \alpha_2 j_1 j_2 j \rangle = \\
& \quad = (-1)^{j' + k_2 + j_1 + j_2} [(2j_2' + 1)(2j + 1)]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_1' & j_1 & j_2' \\ j_2 & k_2 & j \end{matrix} \right\} \delta_{\alpha_1' \alpha_1} \delta_{j_1' j_1} \langle \alpha_2' j_2' \| \mathbf{T}^{k_2(2)} \| \alpha_2 j_2 \rangle \\
& \langle \alpha' j \| [\mathbf{S}^k \times \mathbf{T}^k]_0^0 \| \alpha j \rangle = \sum_{\alpha'' j''} (-1)^{k + j'' - j} \left[\frac{(2j'' + 1)}{(2k + 1)(2j + 1)} \right]^{1/2} \times \\
& \quad \times e_{kjj''} \langle \alpha' j \| \mathbf{S}^k \| \alpha'' j'' \rangle \langle \alpha'' j'' \| \mathbf{T}^k \| \alpha j \rangle \\
& [\mathbf{S}^k \times \mathbf{T}^k]_0^0 = \sum_{\mu} \frac{(-1)^{k - \mu}}{(2k + 1)^{1/2}} S_{\mu}^k T_{-\mu}^k \\
& \langle \alpha_1' \alpha_2' j_1' j_2' j' \| [\mathbf{T}^k(1) \times \mathbf{T}^k(2)]_0^0 \| \alpha_1 \alpha_2 j_1 j_2 j \rangle = (-1)^{j_2' + k + j_1 + j} \left[\frac{(2j_1' + 1)(2j_2' + 1)}{2k + 1} \right]^{1/2} \times \\
& \quad \times \left\{ \begin{matrix} j_1' & j_2' & j \\ j_2 & j_1 & k \end{matrix} \right\} \langle \alpha_1' j_1' \| \mathbf{T}^k(1) \| \alpha_1 j_1 \rangle \langle \alpha_2' j_2' \| \mathbf{T}^k(2) \| \alpha_2 j_2 \rangle \\
& [\mathbf{T}^k(1) \times \mathbf{T}^k(2)]_0^0 = \sum_{\mu} \frac{(-1)^{k - \mu}}{(2k + 1)^{1/2}} T_{\mu}^k(1) \otimes T_{-\mu}^k(2)
\end{aligned}$$

Литература

Сокращение $x = a(b)c$ означает, что x пробегает значения от a до c включительно с приращением b .

КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША — ГОРДАНА (ВИГНЕРА)

Стандартное обозначение имеет вид $(j_1 j_2 j_3 m_1 m_2 m_3) = C_{m_1 m_2 m_3}^{j_1 j_2 j_3}$.

1. *Adler K.*, *Helv. Phys. Acta*, **25**, 235 (1952).
Таблица коэффициентов Клебша — Гордана в рациональных дробях; $j_1 = j_2 = 1(1)4$; $j_3 = 0(2)6$; $m_1 = -m_2 = 0(1)2$.
2. *Condon E. U., Shortley G. H.*, *The theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, 1935. [Имеется перевод: *Кондон Е., Шортли Г.* Теория атомных спектров. — М.: ИЛ, 1961.]
Таблицы формул для коэффициентов Клебша — Гордана; $j_2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})2$.
3. *Edmonds A. R.*, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press, Princeton, N. J., 1957. [Имеется перевод: *Эдмондс А.* Угловые моменты в квантовой механике. — В сб.: Деформация атомных ядер. — М.: ИЛ, 1958.]
Алгебраическая таблица 3j-символов; $j_3 = 0(\frac{1}{2})2$.
4. *Falkoff D. L., Holladay G. S., Sels R. E.*, *Can. J. Phys.*, **30**, 253 (1952).
Таблицы формул для коэффициентов Клебша — Гордана; $j_2 = 3$.
5. *Юиц А. П., Левинсон И. Б., Ванагас В. В.*, Математический аппарат теории момента количества движения. — Вильнюс: Минтис, 1960.
Алгебраические формулы для коэффициентов Клебша — Гордана; $j_2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})4$.
6. *Melvin M. A., Swamy N. V. V. J.*, *Phys. Rev.*, **107**, 186 (1957).
Таблицы формул для коэффициентов Клебша — Гордана; $j_2 = \frac{3}{2}$.
7. *Rose M. E.*, *Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York, 1957.
Таблицы формул для коэффициентов Клебша — Гордана; $j_2 = \frac{1}{2}, 1$.
8. *Rotenberg M. et al.*, *The 3-j and 6-j Symbols*, M.I.T. Press, Cambridge, Mass., 1959.
Таблицы выборочных 3j-символов; $m_1 = m_2 = 0$; $j_1, j_2, j_3 = 0(1)16$. Таблицы для 3j-символов; $j_1, j_2, j_3 = 0(\frac{1}{2})8$.
9. *Saito R., Morita M.*, *Progr. Theor. Phys. (Japan)*, **13**, 540 (1955).
Таблица формул для коэффициентов Клебша — Гордана; $j_2 = \frac{3}{2}$.
10. *Sears B. J., Radtke M. G.*, *Algebraic Tables of Clebsch — Gordan Coefficients*, TPI-75, Atomic Energy of Canada Ltd., Chalk River, Ontario, 1954.
Алгебраические таблицы коэффициентов Клебша — Гордана; $j_2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})3$.
11. *Sharp W. T. et al.*, *Tables of Coefficients for Angular Distribution Analysis*, CRT-556, AECL No. 97, Atomic Energy of Canada Ltd., Chalk River, Ontario, 1954.
Таблицы коэффициентов Клебша — Гордана; $j_1, j_2 = 0(1)6$; $j_3 = 0(1)12$; $m_1 = m_2 = m_3 = 0$. Также $j_1, j_2 = 1(1)3$; $j_3 = 0(1)6$; $m_1 = -1$; $m_2 = 1$; $m_3 = 0$.
12. *Simon A.*, *Numerical Table of the Clebsch — Gordan Coefficients*, ORNL-1718, Oak Ridge National Laboratory, 1954. [Имеется перевод: Саймон А. Таблица числовых значений коэффициентов Клебша — Гордана. — В сб. Деформация атомных ядер. — М.: ИЛ, 1958.]
Десятичные дроби до десятого знака. Любые значения $j = 0(\frac{1}{2})\frac{9}{2}$.
13. *Варишолович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. — Л.: Наука, 1975.
Алгебраические таблицы коэффициентов Клебша — Гордана; $j_2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})5$. Числовые таблицы коэффициентов Клебша — Гордана; $j_1, j_2, j_3 = 0(\frac{1}{2})3$.
14. *Yamada M., Morita L.*, *Progr. Theor. Phys.*, **8**, 431 (1952).

Об угловой корреляции бета-лучей. Алгебраическая таблица трансформационных коэффициентов; $j_2 = 3$.

КОЭФФИЦИЕНТЫ РАКА

Стандартное обозначение $W(abcd; ef)$.

15. *Adler K.*, *Helv. Phys. Acta*, **25**, 235 (1952).
Таблицы формул для коэффициентов Рака; $a = f$; $c = 2(2)6$; $d = e = 1(1)4$; b пробегает все допустимые значения. Также формулы для $e = d + 1 = 11(1)4$.
16. *Biedenharn L. C.*, *Tables of the Racah Coefficients*, ORNL-1098, Oak Ridge National Laboratory, 1952.
Таблицы формул для коэффициентов Рака при $e = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})2$. Таблица для W^2 в рациональных дробях $e = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})3$; $f = 0(1)8$; $a, c = 0(1)4$; $b, d = 0(\frac{1}{2})4$.
17. *Biedenharn L. C.*, *Blatt J. M.*, *Rose M. E.*, *Rev. Mod. Phys.*, **24**, 249 (1952).
Таблицы формул для коэффициентов Рака; $e = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})2$.
18. *Boys S. F.*, *Sahni R. C.*, *Phil. Trans. Roy. Soc. (London)*, **A**, **246**, 463 (1954).
Десятичные дроби до девятого знака. $a, \dots, d = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})\frac{3}{2}$; $e, f \leq 5$.
19. *Edmonds A. R.*, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press, Princeton, N.J., 1957. [Имеется перевод: Эдмондс А. Угловые моменты в квантовой механике. — В сб.: Деформация атомных ядер. — М.: ИЛ, 1958.]
Алгебраическая таблица для $6j$ -символа. $a = 0(\frac{1}{2})2$.
20. *Goldstein M.*, *Kazek C.*, *Table of the Racah and Z-Coefficients*, LAMS-1739, Los Alamos Scientific Laboratory, 1954.
Десятичные дроби до восьмого знака; $b = d$; $e = 0(\frac{1}{2})\frac{13}{2}$; $a = c = 0(\frac{1}{2})\frac{17}{2}$; $f = 0(2)16$.
21. *Howell K. M.*, *Tables of the Wigner $6j$ -Symbols*, Research Report US 58-1, Univ. of Southampton, Southampton, England, 1958.
Revised Tables of the $6j$ -Symbols, Research Report US 59-1, Univ. of Southampton, Southampton, England, 1959.
Квадраты $6j$ -символов в первых факторах со знаком. Перечисляются в порядке наибольшей треугольной суммы Δ : $\Delta = 0(1)17$, ни один параметр не превышает $17/2$.
Переработанные таблицы расширены за счет симметрий Редже.
22. *Ishidzu T. et al.*, *Tables of the Racah coefficients*, Pan-Pacific Press, Tokyo, 1960.
Алгебраические формулы для коэффициентов Рака для $e = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})7$. Числовые таблицы коэффициентов Рака по первым факторам: таблицы 1 — 29, все целочисленные a и b , совместные $c, f = 0(1)7, e \geq f$; $c \leq 7, d \leq 7, c + d + f \leq 15$; таблицы 30 — 79, все полуцелочисленные a и целочисленные b , совместные $c, e = \frac{1}{2}(1)\frac{13}{2}, f = 0(1)7, c \leq \frac{13}{2}$ (c полуцелочисленные), $d \leq 7, c + d + f \leq \frac{29}{2}$; таблицы 80-108, все полуцелочисленные a, b, c, d , совместные $c, f = 0(1)7, c, d \leq \frac{13}{2}, c + d + f \leq 14$; числовые таблицы некоторых коэффициентов Вигнера: $m_1 = m_2 = 0, j_2 = 0(1)6, j_3 = 0(1)12$, все возможные $j_1 \geq j_2$; $m_1 = -m_2 = \frac{1}{2}$, все j_1 такие, что $j_2 = \frac{1}{2}(1)\frac{13}{2}, j_3 = 0(1)13$, все возможные $j_1 \geq j_2$.
23. *Jahn H. A.*, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A**, **205**, 192 (1951).
Таблицы формул для коэффициентов Рака; $e = \frac{1}{2}(\frac{1}{2})2$.
24. *Rose M. E.*, *Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley New York, 1957.
Таблицы формул для коэффициентов Рака; $e = \frac{1}{2}, 1$.
25. *Rotenberg M. et al.*, *The $3j$ - and $6j$ -Symbols*, M.I.T. Press, Cambridge, Mass., 1959.
Таблицы $6j$ -символов; $a, b, \dots, f = 0(\frac{1}{2})8$.
26. *Sato M.*, *Progr. Theor. Phys. (Tokyo)*, **13**, 405 (1955).
Таблицы формул для коэффициентов Рака; $e = 3(\frac{1}{2})\frac{9}{2}$.
27. *Sharp W. T. et al.*, *Tables of Coefficients for Angular Distribution Analysis*, DRT-556,

AECL-97, Atomic Energy Commission of Canada Ltd., Chalk River, Ontario, 1953.

Таблицы коэффициентов Рака. $a, c = 0(1)4$; $b = d = 0(1/2)5$; $e = 0(1/2)4$.

28. *Simon A., Van der Sluis J. H., Biedenharn L. C.*, Tables of the Racah Coefficients, ORNL-1679, Oak Ridge National Laboratory, 1952.

Десятичные дроби до десятого знака коэффициентов Рака. $a, c = 0(1/2)^{15/2}$; $b, d = 0(1/2)^{9/2}$; $e = 0(1/2)^3$; $f = 0(1)8$.

29. *Варшавский Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. — Л.: Наука, 1975.

Алгебраические таблицы $6j$ -символов: $d = 1/2(1/2)4$. Числовые таблицы $6j$ -символов: все a, b, c, d , совместные с $e = 1(1)3$, $f = 0(1/2)3$.

9j-СИМВОЛЫ

Стандартное используемое значение $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ a' & b' & c' \\ d & e & f \end{Bmatrix}$.

30. *Kennedy J. M., Sears B. J., Sharp W. T.*, Tables of X Coefficients, CRT-569, AECL-106, Atomic Energy of Canada Limited, Chalk River, Ontario (1954).

Пять таблиц X -коэффициентов в обозначении степеней первых факторов.

Таблица I: $a = a'$; $b = b'$; $c = c'$; $a = 1, 2$; $b, c = 1(1)5$; $d, e, f = 0(2)8$.

Таблица II: $a = 1$; $a' = 2$; $b = b'$; $c = c'$; $d, e, f = 0(2)8$.

Таблица III: $a = a'$; $b = b'$; $c = c'$; $a = 1, 2$; $b, c = 1/2(1)^{9/2}$; $d, e, f = 0(2)8$.
 $a = 3, 4$; $b = 1/2(1)^{5/2}$; $c = 3/2(1)^{9/2}$; $d, e, f = 0(2)8$.

Таблица IV: $a = 1$; $a' = 2$; $b = b'$; $c = c'$; $b, c = 1/2(1/2)^{9/2}$; $d, e, f = 0(2)8$.

Таблица V: $a = a'$; $b = 1/2$; $c = c'$; $a = 1(1)4$; $b' = 3/2, 5/2$; $c = 1/2(1/2)^{9/2}$; $d, e, f = 0(2)8$.

31. *Matsunobu H., Takebe H.*, Progr. Theoret. Phys. (Japan), 14, 589 (1955).

Таблицы $9j$ -символов (формулы и числовые значения) по первым факторам; $a', b' = 1/2(1)^{7/2}$; $c, c' = 0(1)5$; $f = 0, 1$. a и b ограничены целыми числами, пробегающими все допустимые значения.

32. *Smith K., Stephenson J. W.*, A Table of the Wigner $9j$ Coefficients for Integral and Half-Integral Values of the Parameters, ANL-5776, Argonne National Laboratory, Lemont, Ill., 1957.

Десятичные дроби с точностью до десятого знака; $a = 1/2, 3/2$; $b, c = 1/2, 3/2, 5/2$; $a' = 1/2(1/2)^{7/2}$; $b', c', d, e, f = 0(1)7$.

33. *Smith K.*, Supplement to a Table of Wigner $9j$ Coefficients for Integral and Half-Integral Values of the Parameters, Parts 1 and 2, ANL-5860, Argonne National Laboratory, Lemont, Ill., 1958.

Десятичные дроби с точностью до десятого знака; $a, b, c, a' = 1/2(1)^{7/2}$; $b', c', d, e, f = 0(1)7$.

34. *Варшавский Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. — Л.: Наука, 1975.

Алгебраические таблицы $9j$ -символов: все a, b, c, a', b', c' и d , совместные с $f = 0, 1$ и $e = 1/2(1/2)2$. Числовые таблицы $9j$ -символов: все $a, b, a', b', c' \leq 4$, совместные с $d = e = 1/2$; $f = 0, 1$; $c = 0(1/2)4$.

Z-КОЭФФИЦИЕНТЫ

35. *Biedenharn L. C.*, Revised Z Tables of the Racah Coefficients, ORNL-1501, Oak Ridge National Laboratory, 1953.
Рациональные дроби для $Z^2(l_1 j_1 l_2 j_2; sL)$; $s = \frac{1}{2} (\frac{1}{2}) 3$; $L = 0 (1) 8$; $l_1, l_2 = 0(1)4$; $j_1, j_2 = 0(\frac{1}{2})4$.
36. *Goldstein M., Kazek C.*, Table of the Racah and Z Coefficients, LAMS-1739, Los Alamos Scientific Laboratory, 1954.
Десятичные дроби для $Z(lj lj; sL)$ до восьмого знака; $j, s = 0 (\frac{1}{2})^{13/2}$; $l = 0 (\frac{1}{2})^{17/2}$; $L = 0 (2) 16$.
37. *Sharp W. T. et al.*, Tables of C coefficients for Angular Distribution Analysis, DRT-556, AECL-97, Atomic Energy Commission of Canada Limited, Chalk River, Ontario, 1953.
Обозначение степеней первых факторов; $s = 0 (\frac{1}{2}) 4$; $l_1, l_2 = 0(1)4$; $j_1 = j_2 = 0 (\frac{1}{2}) 5$.
Как Z -, так и Z_1 -коэффициенты.

Список обозначений

Ниже приведены многие используемые в этой книге обозначения. Список составлен главным образом по гл. 1 — 6. Эти «стандартные» обозначения, когда они совпадают с обозначениями, применяемыми в данной специальной области физики, используются в приложениях, описанных в гл. 7.

Знаки связи

$\equiv$	определение; тождественное равенство; конгруэнтность (по модулю связи)
$\approx$	приближенное равенство
$\simeq$	равенство по порядку величины
$\rightarrow$	стремится к; порождает; заменяется
$\rightsquigarrow$	асимптотическое равенство; приближенное равенство для большого значения переменной; эквивалентность (относительно соотношения эквивалентности)
$\cong$	изоморфизм
$\propto$	пропорциональность
$<$	меньше
$>$	больше
$\leq$	меньше или равно
$\geq$	больше или равно
$\subset$	подмножество в; содержится в
$\supset$	содержит как подмножество
$\in$	элемент из
$\leftrightarrow$	замена; взаимно однозначное соответствие
$\Rightarrow$	предполагает
$\Leftrightarrow$	тогда и только тогда
$\perp$	перпендикулярность

Операции

$\times$	обычное умножение; прямое произведение групп
$\times$	векторное произведение векторов из $\mathbb{R}^3$; связывание неприводимых тензорных операторов; скалярное, или точечное, произведение векторов
$\pm$	плюс или минус
$\mp$	минус или плюс
$ z $	абсолютное значение
$\oplus$	прямая сумма векторных пространств
$\otimes$	тензорное произведение векторных пространств или операторов; прямое или кронекеровское произведение матриц
$\circ$	композиция функций
$\cup$	объединение множеств
$\cap$	пересечение множеств
A^*	комплексное сопряжение матрицы A
$\bar{A}$	транспозиция матрицы A
$A^\dagger$	эрмитово сопряжение матрицы A
A^{-1}	матрица, обратная A
$\text{tr } A$	след матрицы A
$\det A$	детерминант матрицы A
∂	частная производная
∇	градиентный оператор в $\mathbb{R}^3$
∇^2	лапласиан в $\mathbb{R}^3$
∇_4	градиентный оператор в $\mathbb{R}^4$
∇_4^2	лапласиан в $\mathbb{R}^4$

Множества

$\mathbb{Z}, \mathbb{Z}^+$	множество всех целых чисел; множество неотрицательных целых чисел
$\mathbb{Q}$	множество рациональных чисел
$\mathbb{R}$	множество вещественных чисел
$\mathbb{C}$	множество комплексных чисел
$\mathbb{R}^n$	множество вещественных n -мерных векторов; n -мерное вещественное векторное пространство

$\mathbb{C}^n$	множество комплексных n -мерных векторов; n -мерное комплексное векторное пространство
$\mathbb{C}^{2j+1}$	проективное пространство, соответствующее $\mathbb{C}^{2j+1}$
$E(3)$	евклидово 3-мерное пространство
$\emptyset$	пустое множество
S^2	единичная сфера в $\mathbb{R}^3$
S^3	единичная сфера в $\mathbb{R}^4$
$SO(n)$	группа вещественных ортогональных $n \times n$ -матриц с единичным детерминантом, $n = 2, 3, \dots$
$O(n)$	группа вещественных ортогональных $n \times n$ -матриц, $n = 2, 3, \dots$
$SU(n)$	группа унитарных $n \times n$ -матриц с единичным детерминантом, $n = 2, 3, \dots$
$U(n)$	группа унитарных $n \times n$ -матриц, $n = 1, 2, \dots$
S_n	группа перестановок n объектов; симметрическая группа
G	общая группа
G	конечная подгруппа чистых вращений
G/K	правые классы смежных элементов в G по отношению к подгруппе K
Z_2	группа из двух элементов, содержащая инверсию и тождественный элемент
T	группа вращений, отображающих регулярный (правильный) тетраэдр в себя
T_h	прямое произведение групп $T \times Z_2$
T_d	группа вращений — инверсий, отображающих регулярный тетраэдр в себя
O	группа вращений, отображающих регулярный октаэдр в себя
O_h	группа вращений — инверсий, отображающих регулярный октаэдр в себя
C_n	циклическая группа вращений вокруг n -мерной оси симметрии

T'	неприводимый тензорный оператор ранга J с элементами, обозначаемыми через $M = J, \dots, -J$
$\{x \in X: P(x)\}$	множество точек x из X , обладающих свойством $P(x)$
$f: X \rightarrow Y$	функция (или отображение) f с областью значений Y и областью определения X
$f: x \rightarrow y = f(x)$	функция f , отображающая $x \in X$ в $y \in Y$

Векторы и операции в трехмерном евклидовом пространстве

$\vec{a}, \vec{b}, \dots$	общие векторы с общим началом в евклидовом 3-мерном пространстве $E(3)$
$\vec{r}, \vec{s}, \vec{x}, \vec{y}, \dots$	векторы положения в $E(3)$ ($\vec{r}$ используется в том же значении, что и $\vec{x}$, и z -ось в том же значении, что и x_3 -ось)
$\vec{p}$	линейный вектор импульса в $E(3)$
$\hat{n}, \hat{e}_1, \dots$	единичные векторы в $E(3)$
$(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$	правосторонняя тройка ортогональных единичных векторов в $E(3)$; инерциальная система отсчета
$\vec{x} = \sum_i x_i \hat{e}_i$	представление вектора $\vec{x}$ в терминах компонент (x_1, x_2, x_3) и системы отсчета $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$
$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$	представление вектора $\vec{x}$ как трехмерного вектора в $\mathbb{R}^3$ ($\mathbf{x}$ также называется вектором)
$\vec{a} \cdot \vec{b} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$	точечное, или скалярное, произведение двух векторов
$\vec{a} \times \vec{b} = (a_2 b_3 - a_3 b_2) \hat{e}_1 + (a_3 b_1 - a_1 b_3) \hat{e}_2 + (a_1 b_2 - a_2 b_1) \hat{e}_3$	векторное произведение векторов $\vec{a}$ и $\vec{b}$
$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = (a_2 b_3 - a_3 b_2, a_3 b_1 - a_1 b_3, a_1 b_2 - a_2 b_1)$	векторное произведение векторов $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$
$a = \mathbf{a} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{a})^{\frac{1}{2}}$	длина вектора $\mathbf{a}$
$\vec{L} = \dot{\vec{x}} \times \vec{r} = \dot{\vec{r}} \times \vec{p}, \mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	угловой момент относительно точки O (точечной) частицы, размещенной в положении $\vec{x} = \vec{r}$ и имеющей линейный импульс $\vec{p}$ (или в положении $\mathbf{x}$ с линейным импульсом $\mathbf{p}$)

$$\mathcal{R}(\phi, \hat{n}): \vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \mathcal{R}(\phi, \hat{n})\vec{r}$$

$$R: \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = R\mathbf{x}$$

$$\mathcal{I}: \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = -\mathbf{x}$$

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi_0 \\ \xi_1 \end{pmatrix}$$

$$R: \xi \rightarrow \xi' = \pm U\xi$$

$$(\hat{\xi}_{+1}, \hat{\xi}_0, \hat{\xi}_{-1}), (\hat{\eta}_{+1}, \hat{\eta}_0, \hat{\eta}_{-1})$$

$$\Gamma_A \mathbf{x}$$

$$(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$$

Вращения и операторы вращений

$\mathcal{R}$

$\mathcal{R}^{-1}$

$\mathcal{R}(\phi, \hat{n})$

E

$\mathcal{R}_{2\pi}, \mathcal{R}_{4\pi}$

$R = (R_{ij})$

$C = (C_{ij}) = (\hat{l}_i, \hat{f}_i)$

$R(\phi, \hat{n})$

$R(\alpha\beta\gamma)$

$R(\alpha_0, \alpha)$

действие на вектор $\vec{r}$ вращения на угол ϕ вокруг направления $\hat{n}$

действие вращения $R \in SO(3)$ на вектор $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$

действие пространственной инверсии $\mathcal{I}$ на вектор $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$

спинор Картана, сопоставляемый с изотропным вектором $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^3$, $\mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = 0$

вращение спинора Картана, соответствующее вращению $\mathbf{x}' = R\mathbf{x}$ в $\mathbb{R}^3$

сферические базисные векторы в $\mathbb{R}^3$
операция образования векторного произведения заданного вектора $\vec{A}$ с произвольным вектором

тройка единичных векторов в $E(3)$, составляющая систему отсчета, фиксированную в теле; векторные операторы по отношению к оператору общего орбитального углового момента

общее вращение вокруг фиксированной точки в $E(3)$

вращение, обратное вращению $\mathcal{R}$

вращение на угол ϕ вокруг направления $\hat{n}$

тождественное вращение

вращение на 2π и на 4π вокруг любой оси

общая вещественная собственная ортогональная 3×3 -матрица, соответствующая вращению $\mathcal{R}$

матрица направляющих косинусов между лабораторной системой отсчета $(\hat{l}_1, \hat{l}_2, \hat{l}_3)$ и системой $(\hat{f}_1, \hat{f}_2, \hat{f}_3)$, фиксированной в теле

параметризация R в терминах угла вращения ϕ вокруг направления $\hat{n}$

параметризация R в терминах углов Эйлера

параметризация R в терминах параметров Эйлера — Родригеса $(\alpha_0, \alpha) \in S^3$

$$U = (u_{ij})$$

$$U(\psi, \hat{n})$$

$$U(x\beta\gamma)$$

$$U(x_0, \alpha)$$

$$\mathcal{U}$$

$$\mathcal{U}^{-1}$$

$$\mathcal{U}(\psi, \hat{n}) = e^{i\psi \hat{n} \cdot \mathbf{J}}$$

$$\mathcal{U}(x\beta\gamma)$$

$$\mathcal{U}(\alpha_0, \alpha)$$

общая унитарная или унитарная унимодулярная 2×2 -матрица; элемент квантовой группы вращений $SU(2)$, соответствующий вращению $R \in SO(3)$

параметризация U (унимодулярных) в терминах угла вращения ψ вокруг направления $\hat{n}$

параметризация U (унимодулярных) в терминах углов Эйлера

параметризация U (унимодулярных) в терминах параметров (Эйлера — Родригеса $(\alpha_0, \alpha) \in S^3$)

оператор вращения; унитарная операторная реализация вращения $U \in SU(2)$ в гильбертовом пространстве

оператор обратного вращения

параметризация $\mathcal{U}$ в терминах угла вращения ψ вокруг направления $\hat{n}$

параметризация $\mathcal{U}$ в терминах углов Эйлера

параметризация $\mathcal{U}$ в терминах параметров Эйлера — Родригеса $(\alpha_0, \alpha) \in S^3$

Области определения параметров вращений

$$\{(\phi, \hat{n}): 0 \leq \phi \leq \pi, \hat{n} \cdot \hat{n} = 1, (\pi, \hat{n}) \equiv (\pi, -\hat{n})\}$$

$$\{(\psi, \hat{n}): 0 \leq \psi \leq 2\pi, \hat{n} \cdot \hat{n} = 1\}$$

$$\{(x\beta\gamma): 0 \leq x < 2\pi, 0 \leq \beta \leq \pi,$$

$$0 \leq \gamma < 2\pi\}$$

$$\{(x\beta\gamma): 0 \leq x < 2\pi, 0 \leq \beta \leq \pi \text{ или } 2\pi \leq \beta \leq 3\pi, 0 \leq \gamma < 2\pi\}$$

параметры вещественного собственного ортогонального вращения векторов из $\mathbb{R}^3$ в терминах угла вращения ϕ вокруг направления $\hat{n}$

параметры унитарного унимодулярного вращения спиноров из S^2 в терминах угла вращения ψ вокруг направления $\hat{n} \in \mathbb{R}^3$

углы Эйлера, параметризующие вращение векторов из $\mathbb{R}^3$

углы Эйлера, параметризующие унитарное унимодулярное вращение спиноров из S^2

$$\{(\alpha_0, \alpha): \alpha_0^2 + \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 = 1, (-\alpha_0, -\alpha) \equiv (\alpha_0, \alpha)\}$$

$$\{(\alpha_0, \alpha): \alpha_0^2 + \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 = 1\}$$

Гильбертово пространство

$\mathcal{H}$

$\mathcal{H}_j$

$\mathcal{H}^{(2j)}$

$|(x)jm\rangle, |jm\rangle$

$|\psi\rangle, |\Psi\rangle, |\phi\rangle, |\Phi\rangle, \dots$

$\langle\psi|, \langle\Psi|, \langle\phi|, \langle\Phi|, \dots$

$\psi, \Psi, \phi, \Phi, \dots$

$(\psi, \phi), \langle\psi, \phi\rangle, \langle\psi|\phi\rangle, \dots$

$\|\psi\| = (\psi, \psi)^{\frac{1}{2}}$

$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$

$\langle(\alpha')j'm' | (\alpha)jm\rangle$

$\mathcal{C}$

$A^{\text{op}}, A = r, x, p, L, \dots$

$1, 1, 1$

$\langle(\alpha')j'm' | \mathcal{C} | (\alpha)jm\rangle$

$\sum_j \oplus \mathcal{H}_j$

параметры Эйлера — Родригеса вещественного собственного ортогонального вращения векторов из $\mathbb{R}^3$
параметры Эйлера — Родригеса унитарного унимодулярного вращения спиноров из $\mathbb{C}^2$

общее гильбертово пространство
($2j + 1$)-мерное гильбертово пространство, которое является пространством неприводимого представления группы $SU(2)$
гильбертово пространство однородных полиномов степени $2j$ от двух бозонов a_1 и a_2
ортонормированный базис в $\mathcal{H}_j$, на котором угловой момент J имеет стандартное действие
кет-векторное обозначение для векторов гильбертова пространства
бра-векторное обозначение для векторов дуального пространства
обозначение в терминах функций для векторов гильбертова пространства
скалярное произведение векторов гильбертова пространства
норма вектора (функции) ψ
обозначение с помощью бра-кет-векторов значения кет-вектора $|\psi\rangle$, определенного на $\mathbb{R}^3$
бра-кет-обозначение для скалярного произведения базисных векторов углового момента
общий оператор в гильбертовом пространстве
предварительное обозначение операторов в гильбертовом пространстве, соответствующих классическим наблюдаемым A
единичный оператор
матричные элементы оператора $\mathcal{C}$ в базисе углового момента
прямая сумма гильбертовых пространств $\mathcal{H}_{1/2}, \mathcal{H}_1, \dots$

$(j, m), (J, M), (l, m),$
 $(L, M), (S, M_S), (k, \mu), \dots$

$\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$

$\phi \otimes \psi$

$S \otimes T$

$\mathcal{H}_{j_1}(1) \otimes \mathcal{H}_{j_2}(2)$

$\mathbb{1}(i)$

$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$

$|(j_1 j_2) j m\rangle$

$\langle \Psi | \mathcal{O} | \Phi \rangle$

$e^{-i\phi \hat{n} \cdot \mathbf{L}} \Psi(\mathbf{x}) = \Psi(R^{-1}(\phi, \hat{n})\mathbf{x})$

Операторы углового момента

$L^{\text{op}} = (L_1^{\text{op}}, L_2^{\text{op}}, L_3^{\text{op}})$

$L = (L_1, L_2, L_3)$

$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = L \cdot L$

$\mathbf{J} = (J_1, J_2, J_3)$

обозначения векторов и операторов гильбертова пространства, соответствующего угловому моменту
 тензорное произведение общих гильбертовых пространств

тензорное произведение векторов $\phi \in \mathcal{H}$ и $\psi \in \mathcal{K}$

тензорное произведение оператора S , действующего в $\mathcal{H}$, и оператора T , действующего в $\mathcal{K}$

тензорное произведение пространств $\mathcal{H}_{j_1}(1)$ и $\mathcal{H}_{j_2}(2)$ углового момента
 единичный оператор в $\mathcal{H}_{j_i}(i)$

несвязанный базис углового момента в $\mathcal{H}_{j_1}(1) \otimes \mathcal{H}_{j_2}(2)$

связанный базис углового момента в $\mathcal{H}_{j_1}(1) \otimes \mathcal{H}_{j_2}(2)$

общий матричный элемент оператора $\mathcal{O}$ между состояниями $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$
 действие оператора орбитального вращения на аналитические функции, определенные на $\mathbb{R}^3$

предварительное обозначение операторов орбитального углового момента

оператор орбитального углового момента с действием, определенным на векторах гильбертова пространства; генераторы группы $SO(3)$; базис алгебры Ли группы $SO(3)$; оператор полного орбитального углового момента

квадрат орбитального углового момента; оператор Казимира группы $SO(3)$

оператор общего углового момента с действием, определенным на векторах гильбертова пространства; генераторы группы $SU(2)$; базис алгебры Ли группы $SU(2)$; полный угловой момент

$$\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = \mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$$

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}$$

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\mathbf{J}$$

$$\mathcal{L} = (\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \mathcal{L}_3), \mathcal{L}^2$$

$$\mathcal{J} = (\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3)$$

$$\mathcal{K} = (\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2, \mathcal{K}_3)$$

$$\mathcal{P} = (\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \mathcal{P}_3)$$

$$J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2, L_{\pm} = L_1 \pm iL_2, \text{ и т. д.}$$

$$J_{+1} \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}J_+, J_0 \equiv J_3, J_{-1} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}J_-$$

$$\mathbb{1}^{(j)}$$

$$\sigma_0 = \mathbb{1}^{(1)}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$$

$$\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma} = x_1\sigma_1 + x_2\sigma_2 + x_3\sigma_3,$$

$$\hat{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{J} = a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_3$$

$$\mathbf{a} \times \mathbf{J} = (a_2J_3 - a_3J_2, a_3J_1 - a_1J_3, a_1J_2 - a_2J_1)$$

$$J^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle$$

$$J_3|jm\rangle = m|jm\rangle$$

$$J_{\pm}|jm\rangle = [(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{\frac{1}{2}}|jm \pm 1\rangle$$

$$\mathbf{J}(i)$$

квадрат углового момента $\mathbf{J}$; оператор Казимира для группы $SU(2)$

векторная форма коммутационных соотношений для орбитального углового момента $\mathbf{L}$

векторная форма коммутационных соотношений для безразмерных генераторов квантовой группы вращений $SU(2)$

дифференциальная операторная реализация орбитального углового момента

дифференциальная операторная реализация углового момента

повышающие и понижающие операторы; комплексное расширение алгебры Ли группы $SO(3)$ или $SU(2)$

сферические компоненты углового момента (см. приложение Г гл. 3)

единичная $(2j+1) \times (2j+1)$ -матрица

единичная (2×2) -матрица

матрицы Паули

отображение Картана $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ точек $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ на бесследовые эрмитовы 2×2 -матрицы

компонента спина $\sigma/2$ в направл. $\hat{n}$

общий элемент алгебры Ли $SU(2)$;

точечное произведение вектора

$\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$ с оператором углового момента $\mathbf{J}$

векторное произведение вектора $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$ и оператора углового момента $\mathbf{J}$

стандартное действие операторов углового момента в пространстве $\mathcal{H}_j$

угловой момент «части» i сложной системы, $i = 1, 2, \dots$

$$T_{\mu_1}^{k_1}(1) \otimes 1(2), 1(1) \otimes T_{\mu_2}^{k_2}(2)$$

$$E_m^{(j)}$$

$$\mathcal{T}_\mu^k$$

$$C_n, \Omega$$

$$J_i^{(j_1)} \otimes 1^{(j_2)}, 1^{(j_1)} \otimes J_i^{(j_2)}$$

$$(V_{+1}, V_0, V_{-1})$$

$$\mathbf{T}^J, \mathbf{S}^J$$

$$T_M^J: M = J, J-1, \dots, -J$$

$$\mathbf{T}^J, \bar{\mathbf{T}}_M^J$$

$$[\mathbf{S}^{k_1} \times \mathbf{T}^{k_2}]^k$$

$$[\mathbf{S}^{k_1} \times \mathbf{T}^{k_2}]_\mu^k$$

$$\mathbf{T}^{k_1}(1) \otimes \mathbf{T}^{k_2}(2)$$

$$\langle (\alpha')j'm' | T_M^J | (\alpha)jm \rangle$$

$$\langle (\alpha')j' || \mathbf{T}^J || (\alpha)j \rangle$$

тензорное произведение операторов, действующее в тензорном произведении пространств $\mathcal{H}_{j_1}(1) \otimes \mathcal{H}_{j_2}(2)$
основная идемпотентная матрица, соответствующая матрице углового момента $J(U)$

тензорная гармоника; μ -я компонента неприводимого тензорного оператора ранга k , принадлежащего обертывающей алгебре алгебры Ли группы $SU(2)$

операции образования коммутатора операторов J_i и J^2 соответственно с тензорным оператором

матричные представления операторов $J_i \otimes 1(2)$ и $1(1) \otimes J_i$ в пространстве $\mathcal{H}_{j_1}(1) \otimes \mathcal{H}_{j_2}(2)$

сферические компоненты векторного оператора $\mathbf{V}$

общий символ для неприводимого тензорного оператора ранга J
компоненты $\mathbf{T}^J$ (называемые также неприводимыми тензорными операторами)

общий символ для сопряженного неприводимого тензорного оператора ранга J

неприводимый тензорный оператор ранга k , полученный вигнеровским связыванием двух неприводимых тензорных операторов, имеющих в качестве областей определения общее гильбертово пространство μ -я компонента $[\mathbf{S}^{k_1} \times \mathbf{T}^{k_2}]_\mu^k$

тензорное произведение двух компонент неприводимых тензорных операторов с действием в $\mathcal{H}_{j_1}(1) \otimes \mathcal{H}_{j_2}(2)$

матричный элемент неприводимого тензорного оператора в базисе углового момента

обозначение Коидона — Шортли для редуцированного матричного элемента; матричный элемент инвариантного относительно $SU(2)$ оператора, соответствующего $\mathbf{T}^J$

$$\left\langle \begin{array}{ccc} J + \Delta & & \\ 2J & & 0 \\ & J + M & \end{array} \right\rangle$$

$$W_{\rho\sigma\tau}^{abc}$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} a + \rho & & \\ 2a & & 0 \\ & a + \sigma & \end{array} \right\}$$

$$\left[\begin{array}{c} abc \\ \rho\sigma\tau \end{array} \right]$$

Функции

$$D_{m'm}^j(\psi, \hat{n})$$

$$D_{m'm}^j(U)$$

$$D_{m'm}^j(\alpha\beta\gamma)$$

$$D_{m'm}^j(\alpha_0, \alpha)$$

$$D_{m'm}^j(x_0, \mathbf{x})$$

$$\mathcal{D}_{m'm}^l(R)$$

$$d_{m'm}^j(\beta)$$

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$$

$$Y_{lm}(\beta\alpha)$$

единичный тензорный оператор для $SU(2)$; оператор Вигнера; действие, определенное в пространстве $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots$ представления углового момента инвариантный оператор Рака в $\mathcal{H}$, соответствующий связыванию единичных тензорных операторов оператор Рака с действием, определенным в тензорном произведении пространств $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$

$9j$ -инвариантный оператор с действием, определенным в тензорном произведении пространств $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$

матричные элементы матрицы вращения D^j квантовой группы вращений $SU(2)$, выраженные через угол вращения ψ и направление $\hat{n}$ функции, определенные неприводимыми представлениями («функции неприводимых представлений») группы $SU(2)$ и реализованные как однородные полиномы от элементов u_{ij} матрицы $U \in SU(2)$

функции неприводимых представлений для $SU(2)$, выраженные через углы Эйлера

функции неприводимых представлений для $SU(2)$, выраженные через параметры Эйлера — Родригеса расширение функций неприводимых представлений для $SU(2)$ на произвольные точки $(x_0, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^4$ (кватернионные переменные)

функции неприводимых представлений для $O(3)$, выраженные как однородные полиномы от элементов R_{ij} матрицы $R \in O(3)$

функции неприводимых представлений для $SU(2)$, зависящие только от угла Эйлера β

полиномы Якоби от x
сферические функции на S^2

$\mathcal{Y}_{lm}(x)$

$P_l^m(\cos \beta)$

$P_l(\cos \beta)$

$D_{m'm}^{j*}(U), D_{m'm}^{j*}(\alpha\beta\gamma), D_{m'm}^{j*}(x_0, \mathbf{x})$

$D^j(U), D^j(\psi, \hat{n}), D^j(\alpha\beta\gamma)$

$D^{j_1}(U) \otimes D^{j_2}(U)$

$D^{j_1}(\psi, \hat{n}) \otimes D^{j_2}(\psi, \hat{n})$

$\mathcal{Y}^{(ls)jm}(\mathbf{x})$

$\chi^j(U) = \text{tr } D^j(U)$

$L_k^z(\xi)$

$C_n^{(\alpha)}(x)$

$I_l(\mathbf{x}, \mathbf{y}), I_{(l_1 l_2 l_3)}(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3)$

Коэффициенты углового момента

E_{abc}

$C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j}$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \equiv (-1)^{j_1 - j_2 + m} (2j + 1)^{-\frac{1}{2}} C_{m_1 m_2 m}^{j_1 j_2 j}$$

$$\begin{bmatrix} j_1 + m_1 & j_2 + m_2 & j - m \\ j_1 - m_1 & j_2 - m_2 & j + m \\ j - j_1 + j_2 & j + j_1 - j_2 & -j + j_1 + j_2 \end{bmatrix}$$

шаровые сферические функции от $x \in \mathbb{R}^3$

присоединенные полиномы Лежандра от $\cos \beta$

полиномы Лежандра от $\cos \beta$

комплексно-сопряженное множество значений функций неприводимых представлений для $SU(2)$ (см. разд. 6 гл. 3)

$(2j + 1) \times (2j + 1)$ матричное унитарное неприводимое представление группы $SU(2)$

матричное прямое произведение неприводимых представлений группы $SU(2)$

тензорные шаровые сферические функции от $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$

след (характер) неприводимого представления j группы $SU(2)$

присоединенные полиномы Лагерра от ξ

полиномы Гегенбауэра от x

вращательно инвариантные полиномы от двух и трех векторов соответственно (см. разд. 17 гл. 6)

характеристические функции, определенные рядом Клебша — Гордана (см. формулу (3.272) гл. 3)

коэффициент Вигнера; коэффициент Клебша — Гордана; коэффициент векторного сложения (см. разд. 12 гл. 3)

$3j$ -коэффициент (см. формулу (3.182) гл. 3)

расположение Редже для коэффициента Вигнера (см. формулу (3.181) гл. 3)

$\Delta(abc)$

коэффициент треугольника (см. формулу (3.276) гл. 3)

 $W(abcd;ef)$

коэффициент Рака (см. формулу (3.290) гл. 3)

$$\begin{Bmatrix} a & b & e \\ d & c & f \end{Bmatrix} = (-1)^{a+b+c+d} W(abcd;ef)$$

6j-коэффициент

$$W_{\rho\sigma\tau}^{abc}(j) \equiv [(2c+1)(2j-2\sigma+1)]^{\frac{1}{2}} W(j-\tau, a, j, b; j-\sigma, c)$$

коэффициент Рака с размерностными множителями

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \\ j'_1 & j'_2 & j' \end{Bmatrix}$$

9j-коэффициент (см. формулу (3.251) гл. 3)

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \\ j'_1 & j'_2 & j' \end{bmatrix}$$

9j-коэффициент с размерностными множителями (см. формулу (3.250) гл. 3)

Бозонное исчисление H гамильтониан гармонического осциллятора; общий гамильтониан операторы сопряженных линейного импульса и положения для гармонического осциллятора, удовлетворяющие $[p, q] = -i\hbar$ p, q операторы рождения и уничтожения соответственно для гармонического осциллятора, удовлетворяющие $[a, \bar{a}] = 1$; бозонный и сопряженный ему операторы $a, \bar{a}$ фермионные операторы рождения и уничтожения соответственно, удовлетворяющие $\bar{b}b + b\bar{b} = 1$ (см. разд. 9 гл. 7) $b, \bar{b}$

параметры массы и угловой частоты гармонического осциллятора

 m, ω

оператор числа частиц

 $N = a\bar{a}$

дисперсия импульса и положения

 $\Delta p, \Delta q$

унитарный оператор перемещения для бозонов

 $\mathcal{U}(\xi, \eta), \mathcal{U}(\zeta)$

гильбертово пространство состояний для гармонического осциллятора

 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1$ набор единичных векторов в $\mathcal{H}$, на которых действие $\bar{a}$ является умножением на ζ $\{|\zeta\rangle : \zeta \in \mathbb{C}\}$

$$\langle \hat{e}_\alpha | \hat{e}_\beta \rangle$$

$$\{ |e_\zeta\rangle = e^{\frac{1}{2}|\zeta|^2} |\hat{e}_\zeta\rangle : \zeta \in \mathbb{C} \}$$

$$\mathcal{F}$$

$$(f, g)$$

$$\mathcal{H}(\omega, \zeta)$$

$$\mathcal{F}_n = \mathcal{F} \otimes \cdots \otimes \mathcal{F}$$

$$\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)$$

$$\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_1$$

$$X \rightarrow \mathcal{L}_X = \sum_{i,j=1}^n X_{ij} a_i \bar{a}_j$$

$$\mathcal{E} = \mathcal{L}_1 = \sum_{i=1}^n a_i \bar{a}_i$$

$$|0\rangle$$

$$\langle 0 | F^*(\bar{a}) G(a) | 0 \rangle = \langle F | G \rangle = [F^*(\partial/\partial \zeta) G(\zeta)]_{\zeta=0}$$

$$J_i = \mathcal{L}_{\frac{1}{2}\sigma_i} = \frac{1}{2}(\bar{a}\sigma_i\bar{a})$$

$$\mathcal{H}^{(2j)}$$

$$|jm\rangle = P_{jm}(a_1, a_2)|0\rangle$$

$$(m = j, \dots, -j)$$

$$\mathcal{T}_U$$

$$D^J(Z)$$

$$A = (a_{ij}^j) \quad (i, j = 1, \dots, n)$$

скалярное произведение в $\mathcal{H}$
набор основных векторов в $\mathcal{H}$
гильбертово пространство целых
аналитических функций от комплекс-
ного переменного ζ
скалярное произведение в $\mathcal{F}$
воспроизводящееся ядро в $\mathcal{F}$

гильбертово пространство целых
аналитических функций от n ком-
плексных переменных $(\zeta_1, \dots, \zeta_n)$
 n -компонентный бозонный оператор
гильбертово пространство векторов
состояний для n бозонов, которое
изоморфно $\mathcal{F}_n$
отображение Жордана — Швингера
 $n \times n$ -матрицы X в бозонный опера-
тор $\mathcal{L}_X$ в $\mathcal{H}_n$
оператор Эйлера в $\mathcal{H}_n$; оператор чис-
ла частиц
кет-вектор (вакуум) в $\mathcal{H}$, такой, что
 $\bar{a}_i|0\rangle = 0, i = 1, 2, \dots, n$

скалярное произведение в $\mathcal{H}$ векто-
ров состояний $|G\rangle$ и $|F\rangle =$
 $= F(a)|0\rangle$

реализация Жордана — Швингера ге-
нератора $\mathbf{J} = (J_1, J_2, J_3)$ группы
 $SU(2)$ бозонными операторами
подпространство векторов в $\mathcal{H}_2$ вида
 $P(a_1, a_2)|0\rangle$, где $P(a_1, a_2)$ — одно-
родный полином степени $2j$

стандартные ортонормированные
кет-векторы углового момента, на
которые натягивается $\mathcal{H}^{(2j)}$

унитарный оператор в $\mathcal{H}_2$, дающий
при действии в инвариантном под-
пространстве $\mathcal{H}^{(2j)}$ стандартное
унитарное неприводимое представ-
ление $\mathcal{T}_U \rightarrow D^J(U)$ группы $SU(2)$

расширение неприводимых пред-
ставлений группы $SU(2)$ до неприво-
димых представлений группы
 $GL(2, \mathbb{C})$

$n \times n$ -матрица с n^2 бозонами в ка-
честве элементов; матричный бозон

$$X \rightarrow \mathcal{L}_X = \text{trace}(\tilde{A} X \tilde{A})$$

$$E_{ij} \ (i, j = 1, \dots, n)$$

$$Y \rightarrow \mathcal{H}_Y = \text{trace}(\tilde{Y} \tilde{A} \tilde{A})$$

$$E^{\alpha\beta} \ (\alpha, \beta = 1, 2, \dots, n)$$

$$\det A = a_{12 \dots n}^{12 \dots n}$$

$$L_U: A \rightarrow UA = L_U(A),$$

$$R_V: A \rightarrow A\tilde{V} = R_V(A)$$

$$\mathcal{L}_U, \mathcal{F}_V$$

$$J_+ = E_{12}, J_- = E_{21},$$

$$J_3 = \frac{1}{2}(E_{11} - E_{22})$$

$$K_+ = E^{12}, K_- = E^{21},$$

$$K_3 = \frac{1}{2}(E^{11} - E^{22})$$

$$\mathcal{E} = \sum_k E^{kk}$$

$$D_{m'm}^j(A)$$

$$|k, j; m, m'\rangle$$

$$a^i = (a_1^i, a_2^i, \dots, a_n^i) \\ (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$J(i), \ i = 1, 2$$

обобщенное отображение Жордана $n \times n$ -матрицы X в бозонный оператор, действующий в $\mathcal{H}_{n2}$; генератор левых трансляций

базис множества бозонных операторных отображений $\{\mathcal{L}_X; X = (x_{ij}), x_{ij} \in \mathbb{C}\}$; реализация базиса Вейля алгебры Ли группы $U(n)$ левыми бозонными операторами

обобщенное отображение Жордана $n \times n$ -матрицы Y в бозонный оператор, действующий в $\mathcal{H}_{n2}$; генератор правых трансляций

базис множества бозонных операторных отображений $\{\mathcal{R}_Y; Y = (y_{\alpha\beta}), y_{\alpha\beta} \in \mathbb{C}\}$; реализация базиса Вейля алгебры Ли группы $U(n)$ правыми бозонными операторами

детерминант $n \times n$ -матричного бозона A

левая и правая трансляции $n \times n$ -матричного бозона A унитарными матрицами U и V

унитарные операторные реализации в $\mathcal{H}_{n2}$ правой и левой трансляций L_U и R_V

генераторы унимодулярных левых трансляций $\mathcal{L}_U$ в $\mathcal{H}_4$, $U \in SU(2)$

генераторы унимодулярных правых трансляций $\mathcal{F}_V$ в $\mathcal{H}_4$, $V \in SU(2)$

генератор фазовых преобразований в $\mathcal{H}_4$; оператор числа частиц, оператор Эйлера

бозонный полином, полученный из функций представлений $D_{m'm}^j(U)$ заменой $u_{ij} \rightarrow a_i^j$

вектор бозонного базиса в $\mathcal{H}_4$, на котором генераторы J и K имеют стандартное действие

n -компонентные бозонные операторы

генераторы $SU(2)$, соответствующие 2-компонентному бозону a^i

$\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$

$$|j_1 m_1; j_2 m_2\rangle = P_{j_1 m_1}(\mathbf{a}^1) P_{j_2 m_2}(\mathbf{a}^2) |0\rangle, \\ m_1 = j_1, j_1 - 1, \dots, -j_1, \\ m_2 = j_2, j_2 - 1, \dots, -j_2$$

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

$$\mathbf{K} = \mathbf{J}(1) - \mathbf{J}(2)$$

$$|j_1 j_2; j m\rangle, j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|, m = j, j - 1, \dots, -j$$

$$(\pm \sqrt{k})^s \rightarrow (\pm 1)^s [k!/(k-s)!]^{\pm} = (\pm 1)^s ([k]_s)^{\pm}$$

$$[\lambda] = [\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n], \\ [m] = [m_{1n} m_{2n} \dots m_{mn}]$$

$$Y_{[\lambda]}, Y_{[m]}$$

$$\begin{pmatrix} [m] \\ (m) \end{pmatrix}$$

$$(W) = (w_1, w_2, \dots, w_n)$$

$$(y) = (y_1, y_2, \dots, y_n)$$

$$\begin{pmatrix} 2j & 0 \\ j+m & \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} m_{12} & m_{22} \\ & m_{11} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} [m] \\ (m) \end{pmatrix}$$

векторное пространство векторов состояний вида $P(\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2)|0\rangle$, где $P(\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2)$ — однородные полиномы степени $2j_1$ от $\mathbf{a}^1$ и $2j_2$ от $\mathbf{a}^2$

ортонормированный базис пространства $\mathcal{H}^{j_1, j_2}$, на котором генераторы $\mathbf{J}(i)$ имеют стандартное действие

генератор диагональной подгруппы в $SU(2) \times SU(2)$

векторный оператор по отношению к $\mathbf{J}$

базис пространства $\mathcal{H}^{j_1, j_2}$, на котором $\mathbf{J}$ и $\mathbf{K}$ имеют стандартное действие

отображение из обычных степеней в спадающие факториалы, которое переводит функции неприводимых представлений в коэффициенты Вигнера для $SU(2)$

разбиения целого числа $N \geq 0$ на n частей, включая 0

схемы Юнга формы $[\lambda], [m]$

схема Гельфанда для $U(n)$

вес схемы Гельфанда; содержание стандартной таблицы (схемы) Вейля

символ Яманучи стандартной таблицы Юнга

схема Гельфанда для $SU(2)$

схема Гельфанда для $U(2)$

вектор бозонного базиса в пространстве неприводимого представления $[m]$ группы $U(n)$

$$H^{[\lambda]}$$

$$\dim[\lambda] = n!/H^{[\lambda]}$$

$$\text{Dim}[\lambda] = \prod_{ij} (n + j - i)/H^{[\lambda]}$$

$$P \begin{pmatrix} m'_{11} & \\ m_{12} & m_{22} \\ & m_{11} \end{pmatrix} (A)$$

$$B \begin{pmatrix} m'_{11} & \\ m_{12} & m_{22} \\ & m_{11} \end{pmatrix} (A)$$

$$\left| \begin{pmatrix} \mu_{11} & \\ m_{12} & m_{22} \\ & m_{11} \end{pmatrix} \right\rangle$$

$$\begin{pmatrix} (m') \\ [m] \\ (m) \end{pmatrix}$$

$$P \begin{pmatrix} (m') \\ [m] \\ (m) \end{pmatrix} (A)$$

$$B \begin{pmatrix} (m') \\ [m] \\ (m) \end{pmatrix} (A)$$

$$\left| \begin{pmatrix} (m') \\ [m] \\ (m) \end{pmatrix} \right\rangle = [\mathcal{M}([m])]^{-\frac{1}{2}} B \begin{pmatrix} (m') \\ [m] \\ (m) \end{pmatrix} (A) |0\rangle$$

$$\mathcal{M}([m]) = \prod_{i=1}^n p_{in}! / \prod_{i < j} (p_{in} - p_{jn})$$

$$\varphi_k^{(\lambda)}, \psi_k^{(\lambda)}, \lambda = 1, \dots, n; k = 1, \dots, \lambda$$

$$\mathcal{R}, \mathcal{C}, \mathcal{F}, \mathcal{H}$$

крючковое произведение стандартной таблицы (схемы) формы $[\lambda]$ размерность неприводимого представления $[\lambda]$ группы S_n размерность неприводимого представления $[\lambda]$ группы $U(n)$ бозонный полином, соответствующий двойной стандартной таблице для $U(2) * U(2)$

бозонный полином, соответствующий двойной схеме Гельфанда для $U(2) * U(2)$

вектор ортонормированного бозонного базиса в пространстве неприводимого представления $[m_{12} m_{22}]$ группы $U(2) * U(2)$

двойная схема Гельфанда для $U(n) * U(n)$

бозонный полином, соответствующий двойной стандартной таблице Вейля; функция неунитарного неприводимого представления при замене $A \rightarrow U$

бозонный полином, соответствующий двойной схеме Гельфанда; функция унитарного неприводимого представления группы $U(n)$ при замене $A \rightarrow U$

вектор ортонормированного бозонного базиса в пространстве неприводимого представления $[m]$ группы $U(n) * U(n)$

нормировочный множитель для бозонных полиномов; мера таблицы (схемы) старшего веса

полное множество взаимнокоммутирующих эрмитовых операторов в пространстве $\mathcal{H}_{n^2}$

генераторы конечной группы сим-

$$D \begin{pmatrix} \mu_{11} & & \\ m_{12} & & m_{22} \\ & m_{11} & \end{pmatrix} (U)$$

метрий функций представлений группы $SU(2)$

функция унитарного неприводимого представления группы $U(2)$

Различные математические и физические символы

$\hbar$

обозначение Дирака для постоянной Планка $\hbar$, деленной на 2π ; основная единица углового момента

$$e = -1.60 \times 10^{-19} \text{ Кл}$$

заряд электрона в рационализированных единицах МКС

$$\delta_{ij}, \delta_{i'j'}, \delta_{m'm}$$

символ Кронекера

$$e_{ijk}$$

+1 (-1), если ijk — четная (нечетная) перестановка чисел 123, в остальных случаях 0

$$e_{\alpha\beta\gamma\delta}, e^{\alpha\beta\gamma\delta}$$

+1 (-1), если $\alpha\beta\gamma\delta$ — четная (нечетная) перестановка чисел 0123, в остальных случаях 0

$$(a_1, a_2, \dots, a_n)$$

упорядоченный набор n чисел

$$\mathbb{1}, \mathbf{1}, 1$$

единичные операторы

$$\mathbb{1}_n$$

единичная $n \times n$ -матрица

$$\mathbb{1}^{(j)}$$

единичная $(2j+1) \times (2j+1)$ -матрица

$$[A, B] = AB - BA$$

коммутатор операторов или матриц A и B

$$[A, B]_{(k)} \equiv [A, [A, B]_{(k-1)}]$$

кратный коммутатор оператора A с оператором B

$$[A, B]_{(0)} \equiv B$$

$$[A, B]_{PB} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

скобка Пуассона наблюдаемых A и B

$$\binom{z}{a} = z(z-1) \cdots (z-a+1)/a!$$

биномиальная функция

$$(z)_a = z(z+1) \cdots (z+a-1)$$

символ Почхаммера

$$[z]_a = z(z-1) \cdots (z-a+1)$$

$$1, i, j, k$$

кватернионные базисные элементы

$$q = q_0 \mathbf{1} + q_1 i + q_2 j + q_3 k$$

общий кватернион q

$$\bar{q} = q_0 \mathbf{1} - q_1 i - q_2 j - q_3 k$$

кватернион, сопряженный к q

$$N(q) = \bar{q}q = q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2$$

норма кватерниона q

$$N(q) = 1$$

унимодулярный кватернион

$$dS(\hat{n})$$

дифференциал площади поверхности на S^2 в точке $\hat{n} \in S^2$

$$d\omega = d\phi \sin \theta d\theta$$

$$d\Omega, d\Omega_U$$

$$A^\dagger, A^*, \bar{A}$$

$$z^*, \bar{z}$$

$$T_0, -T, T^c, T_\pi, E$$

$$T_1 + T_2$$

$$\|T\|$$

$$T(s, v)$$

$$L_g(\tau) = g + \tau$$

$$R_g(\tau) = \tau + g^{-1} = \tau + (-g)$$

$$(\mathcal{L}_g f)(\tau) = f(L_{g^{-1}}(\tau))$$

$$(\mathcal{R}_g f)(\tau) = f(R_{g^{-1}}(\tau))$$

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

$$U(\mathbf{a})f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x} - \mathbf{a})$$

$$AL_i, \langle L_i \rangle$$

дифференциал площади поверхности на S^2 в точке $\hat{n} = (\sin \theta \sin \phi, \sin \theta \cos \phi, \cos \theta)$

дифференциал площади поверхности на S^3 в точке $(x_0, \mathbf{x}) \mapsto U(x_0, \mathbf{x}) = U \in SU(2)$

сопряжения оператора A

комплексное сопряжение $z \in \mathbb{C}$

повороты: тождественный, обратный и сопряженный, повороты длины π и $\pi/2$ соответственно
сумма двух поворотов (см. рис. 4.4 гл. 4)

длина поворота

поворот, параметризованный в кватернионных координатах (s, v)

левая трансляция поворота τ на поворот g

правая трансляция поворота τ на поворот g

унитарные операторные реализации левой и правой трансляций поворотов в гильбертовом пространстве

дельта-функция Дирака

действие унитарного оператора сдвига $U(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}/\hbar}$ на функцию $f: \mathbf{x} \mapsto f(\mathbf{x})$

дисперсия оператора углового момента L_1 ; ожидаемое значение оператора L_i

Предметный указатель

Алгебра коммутаторная

Рака — *Вигнера* 1 130

Амплитуда вероятности 1 61, 90

— перехода 2 564, 565

Антисимметризация 2 348, 370

Ассоциативность вращений 1 20

Атом водорода 2 319—343

— — алгебраическое рассмотрение 2 320

— — вектор (оператор) *Рунге* — *Ленца* — *Паули* 2 321

— — — — — импульсное представление 2 329

— — вигнеровские связанные состояния 2 326

— — волновые функции в импульсном пространстве 2 329

— — — — — в явном виде 2 327

— — геометрия (сферическая, гиперболическая, параболическая) 2 322—323

— — коммутаторная алгебра 2 321

— — кулоновские состояния континуума 2 323

— — преобразование *Фока* 2 322

— — — *Фурье* волновых функций 2 332

— — радиальное уравнение 2 336

— — свойства связанных состояний 2 323

— — собственные пространства энергии 2 321

— *Томаса* — *Ферми* 2 346

Базис *Вейля* 2 384

— декартов 1 163

Базис *LS*-мультиплетный 2 353

— *Рака* 2 384

— слэтеровский 2 353

— стандартный 1 163

— сферический 1 49, 162

Бозон матричный 1 207

Вектор базисный 1 161

— — диаграммная структура 2 376

— бра 1 202

— *Вейля* 1 233

— изотропный 1 27, 162

— кет 1 41, 292

— *Пойнтинга* 2 410—411

— положения 1 28

— *Рунге* — *Ленца* — *Паули* 2 320—340

— собственный 1 44

— — углового момента 1 44

Векторы состояния 1 62

— — бозонные 1 234; 2 371

— — векторное пространство 2 321

— — ортонормированность произведения 2 397

— — слэтеровские 2 348—349

— — с точным синьорити 2 477

— — требование антисимметрии 2 348

— — физические 2 371

— трансляционно инвариантные 2 535, 539

— экартовы 2 501, 504

— — обобщенные 2 503

Величина сохраняющаяся 1 14

Вероятность, амплитуда 2 424

— классическая 2 424

— перехода 1 90; 2 564

$$d\omega = d\phi \sin \theta d\theta$$

$$d\Omega, d\Omega_U$$

$$A^+, A^*, \bar{A}$$

$$z^*, \bar{z}$$

$$T_0, -T, T^c, T_\pi, E$$

$$T_1 + T_2$$

$$\|T\|$$

$$T(s, v)$$

$$L_g(\tau) = g + \tau$$

$$R_g(\tau) = \tau + g^{-1} = \tau + (-g)$$

$$(\mathcal{L}_g f)(\tau) = f(L_{g^{-1}}(\tau))$$

$$(\mathcal{R}_g f)(\tau) = f(R_{g^{-1}}(\tau))$$

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

$$U(\mathbf{a})f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x} - \mathbf{a})$$

$$\Delta L_i, \langle L_i \rangle$$

дифференциал площади поверхности на S^2 в точке $\hat{n} = (\sin \theta \sin \phi, \sin \theta \cos \phi, \cos \theta)$

дифференциал площади поверхности на S^3 в точке $(x_0, \mathbf{x}) \mapsto U(x_0, \mathbf{x}) = U \in SU(2)$

сопряжения оператора A

комплексное сопряжение $z \in \mathbb{C}$

повороты: тождественный, обратный и сопряженный, повороты длин π и $\pi/2$ соответственно

сумма двух поворотов (см. рис. 4.4 гл. 4)

длина поворота

поворот, параметризованный в кватернионных координатах $(s, \mathbf{v})$

левая трансляция поворота τ на поворот g

правая трансляция поворота τ на поворот g

унитарные операторные реализации левой и правой трансляций поворотов в гильбертовом пространстве

дельта-функция Дирака

действие унитарного оператора сдвига $U(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{p}/\hbar}$ на функцию $f: \mathbf{x} \mapsto f(\mathbf{x})$

дисперсия оператора углового момента L_1 ; ожидаемое значение оператора L_i

Предметный указатель

Алгебра коммутаторная

Рака — *Вигнера* 1 130

Амплитуда вероятности 1 61, 90

— перехода 2 564, 565

Антисимметризация 2 348, 370

Ассоциативность вращений 1 20

Атом водорода 2 319—343

— — алгебраическое рассмотрение 2 320

— — вектор (оператор) *Рунге* — *Ленца* — *Паули* 2 321

— — — — — импульсное представление 2 329

— — вигнеровские связанные состояния 2 326

— — волновые функции в импульсном пространстве 2 329

— — — — в явном виде 2 327

— — геометрия (сферическая, гиперболическая, параболическая) 2 322—323

— — коммутаторная алгебра 2 321

— — кулоновские состояния континуума 2 323

— — преобразование *Фока* 2 322

— — — *Фурье* волновых функций 2 332

— — радиальное уравнение 2 336

— — свойства связанных состояний 2 323

— — собственные пространства энергии 2 321

— *Томаса* — *Ферми* 2 346

Базис *Вейля* 2 384

— декартов 1 163

Базис *LS*-мультиплетный 2 353

— *Рака* 2 384

— слэтеровский 2 353

— стандартный 1 163

— сферический 1 49, 162

Бозон матричный 1 207

Вектор базисный 1 161

— — диаграммная структура 2 376

— бра 1 202

— *Вейля* 1 233

— изотропный 1 27, 162

— кет 1 41, 292

— *Пойнтинга* 2 410—411

— положения 1 28

— *Рунге* — *Ленца* — *Паули* 2 320—340

— собственный 1 44

— — углового момента 1 44

Векторы состояния 1 62

— — бозонные 1 234; 2 371

— — векторное пространство 2 321

— — ортонормированность произведения 2 397

— — слэтеровские 2 348—349

— — с точным синьорити 2 477

— — требование антисимметрии 2 348

— — физические 2 371

— трансляционно инвариантные 2 535, 539

— экартовы 2 501, 504

— — обобщенные 2 503

Величина сохраняющаяся 1 14

Вероятность, амплитуда 2 424

— классическая 2 424

— перехода 1 90; 2 564

- Версия 1 23, 25
 Вес 1 80
 — старший 1 80
 — — проблема кратностей 2 392
 — статистический 2 568—574
 — — уровня 2 573
 — схемы *Гельфанда* 1 219
 Ветви (в спектрах молекул) 2 533, 574
 Взаимодействие квадрупольное 2 440
 — обменное 2 481, 482
 — парное 2 458, 471
 — типа дельта-функции 2 465, 471
 Возбуждения элементарные 2 474
 Волна электромагнитная неполяризованная 2 422
 Волчок симметричный 1 69, 190
 — — волновая функция 1 69
 Вращение 1 19
 — в группе $SU(2)$ 1 28
 — — — $SO(3)$ 1 28
 — жесткого тела 1 23
 — как матрица 1 21
 — обратное 1 20
 — проищаемого тела 1 25
 — системы координат 1 26
 — тождественное 1 20
 Вырождение (молекул) случайное 2 526
 — эффективное 2 478
- Гамильтониан асимметричного ротатора 2 549
 — взаимодействия для однородного магнитного поля 2 430
 — дискретный спектр 2 310
 — для полужесткой (жесткой) многоатомной молекулы 2 517
 — для сферических волчковых молекул 2 520
- непрерывный спектр 2 310
 — приближенный для многоэлектронных атомов 2 345
 — *Эккарта* 2 538
 Гармоники (функции) тензорные 2 406, 543
 Геометрия проективная и квантовая механика 2 425
 Гипотеза *Бора* 1 13; 2 319
 Граф крючковый 1 224
 — — запутанный 1 225
 — — — схемы *Вейля* 1 225
 — плоскостийный кубический 1 119
 Группа *Галилея* 1 16; 2 447
 — *Гамильтона* 1 179
 — *Евклида* 2 323, 437
 — изоспина 2 464
 — изотропии (или малая; или стационарная) 2 432, 556
 — кватернионная 1 179
 — *Клейна* четверная 2 549
 — кос 1 35
 — *Ли* исключительная G_2 2 389—390
 — ортогональная в спектроскопии 2 385
 — *Паули* 1 187
 — поворотов 1 178
 — *Пуанкаре* 1 16
 — симметрическая S_4 1 119
 — — S_n 1 221
 — $SU(2) \times SU(2)$ 1 196
 — T_d 1 119
 — точечная (жесткой молекулы) 2 534—541
 — $U(2)$ 1 247
- Группы кубические 2 543, 550
- Действие *Планка* 1 13
 Дерево с индексами 2 363, 365

- Деревья Кэли 2 362, 370
Детерминант Грама 2 502
— Слэтера 2 369
Диаграмма Вейля стандартная 2 373
— неприводимого представления симметрической группы 2 563
— Юнга 1 218; 2 369
— — стандартная 2 369, 373
- Единица углового момента 1 13
- Задача асимметричного ротатора 2 549
— Дебая 2 417
— Кеплера 2 322
— кулоновская релятивистская 2 320
— многоэлектронная 2 345, 346
Закон конических сечений Кеплера 2 321
— связывания операторов Вигнера 1 130
— сохранения 1 14
Заряд электрона, определение знака из эффекта Зеемана 2 315
Значение собственное 1 43
— — максимальное 1 45
— — минимальное 1 45
- Идемпотенты 1 135
Излучение электрическое дипольное в эффекте Зеемана 2 313
— — — правила отбора 2 532
— — — формула для интенсивности 2 313
Изменение углового момента масштабное 1 41
- Изоспин, квантовое число 2 464
Импульс линейный, операторы 2 513
Инвариант Рака 1, 128
— $9j$ 1, 128
Инвариантность (амплитуды) вероятности 1 90
— вращательная 2 502
— трансляционная 2 502, 539
— уравнений движения 1 14
Инверсия пространственная (четности) 2 496
Интеграл Гаунта 1 88; 2 391
Интегралы Слэтера 2 361, 481
Интерференция вероятностей неклассическая 2 424
Исчисление бозонное 1 197; 2 442
— теневое 1 215
- Канал входной 2 455
— выходной 2 455
Каскады, угловые корреляции 2 449
Квазиспин 2 458, 473
— бозонная реализация 2 474
— волновые функции 2 476
— правила коммутации 2 475
— применение к тензорным операторам 2 479
— скаляры 2 479
— фермионная реализация 2 474
Квант действия Планка 2 319
Квантование орбитального углового момента 1 258
Кватернионы 1 186; 2 329
— сопряженные 1 187
Класс смежный по подгруппе 2 556
Коммутирование кратное 1 50
Компоненты тензорного оператора 1 91
— тетрады 2 436
— углового момента сферические 1 92

- Константы структурные алгебры Ли 2 430
 Конструкция Дирака 1 22, 35
 Конфигурация двух частиц 2 364
 — — электронов 2 358
 — трехэлектронная 2 368
 — эквивалентных электронов 2 369
 — электронная 2 355
 Концепция элементарных возбуждений Ландау 2 485
 Координаты декартовы 1 21
 — внутренние 2 505
 — — для системы главных осей 2 509
 — — — — — Эккарта 2 506
 — полярные сферические 1 71
 Корреляции направления — направление 2 448
 — — — свойство факторизации 2 448
 — тройные 2 450
 Корреляция угловая, природа процесса 2 444—449
 Коэффициенты векторного сложения 1 79
 — Вигнера 1 79; 2 470
 — — асимптотика 2 561
 — — вещественность 1 83
 — — выбор фазы 1 83
 — — вычисление 1 80
 — — и полиномы Лежандра 2 446
 — — область определения 1 88
 — — обозначения 1 143
 — — ортогональность 1 83, 84
 — — порождающая функция 1 242
 — — симметрии 1 85; 2 465
 — — экстремальные случаи 1 89
 — генеалогические 2 370, 474
 — $9j$ 1 104, 122; 2 452
 — — обозначения 1 145
 — — ортогональность 1 123, 124
 — — связь с $3j$ - и $6j$ -символами 1 123
 — — симметрии 1 124
 Коэффициенты $9j$, частные значения 1 124
 — Клебша—Гордана (см. коэффициенты Вигнера) 1 79; 2 375
 — приведения 2 549
 — Рака 1 100, 106; 2 483
 — — алгебраические выражения 1 110
 — — область определения 1 107
 — — обозначения 1 107, 110, 144
 — — определение 1 100
 — — ортогональность 1 107
 — — порождающая функция 1 244
 — — связь с коэффициентами Вигнера 1 101, 107, 113
 — — симметрия 1 117
 — — — перестановочная 1 120
 — — фундаментальные 1 117
 — треугольника 1 109
 — — связь с коэффициентами Рака 1 109
 — Фано 2 452
 — $6j$ 1 100, 106; 2 468
 Крючок 1 224
 Лемма факторизации 1 235
 Линейность внутренних координат 2 499
 Магнетон Бора 2 316
 Масштаб абсолютный для углового момента 1 40
 Матрица Грама 2 500
 — D 1 49
 — плотности 2, 417—420, 429
 — — для геометрического описания чистых состояний общего спина 2 431
 — — — измерений фотонных угловых корреляций 2 417

- Матрица плотности для релятивистской массивной частицы со спином 2 434
- — — уравнения Дирака 2 436
 - — — и угловой момент 2 424—443
 - — — мотивировка введения 2 425
 - — — электромагнитного излучения 2 417—420
 - — — углового момента 1 46
 - — — углов Эйлера 2 495
- Матрицы вращения 1 48, 51; 2 470, 495
- — — в терминах параметров Эйлера — Родригеса 1 60
 - — — — углов Эйлера 1 53
 - — — групповые свойства 1 51
 - — — «дискретизированные» 1 214
 - — — дифференциальные уравнения 1 63
 - — — общий случай 1 59
 - — — ортогональность 1 70
 - — — порождение 1 69
 - — — рекуррентные соотношения 1 58
 - — — связь с гиперсферическими функциями 2 333
 - — — — коэффициентами Вигнера 1 86
 - — — след 1 136
 - — — явный вид 1 53
- Метод старших весов 1 80; 2 351
- факторизации 2 337
- Механика Лагранжа 1 14:
- Ньютона 1 14
- Множества некомбинирующиеся 1 16
- Множители деполяризационные 2 439
- Модель оболочек ядерная (Майер — Йенсена) 2 458—464
- — — оператор квадрупольного момента 2 480
 - — — свойства короткодействия 2 465
- Модель центрального поля 2 346—353
- — — физическая 2 348
 - Шмидта 2 463
- Молекула жесткая классическая 2 498
- — — функция потенциальной энергии 2 541
- Молекулы, внутренняя симметрия 2 546
- — сферические волчковые, спектр 2 489—583
- Момент магнитный дипольный 2 463
- — — угловой 1 39
 - — — бозонное исчисление 2 442
 - — — в формализме матрицы плотности 2 424—443
 - — — векторная модель 2 317
 - — — внутренний 2 517, 527
 - — — гиперболический 2 475
 - — — закон сохранения 2 420, 435, 437
 - — — значение в релятивистской и нерелятивистской областях 2 311
 - — — излучаемый электромагнитным полем 2 411, 421
 - — — как аддитивная величина 1 39
 - — — — тензорный оператор 1 148
 - — — квантованный 1 39
 - — — квантовые числа 1 38; 2 350, 529
 - — — классический 1 39
 - — — масштаб 1 41
 - — — мультиплеты 1 41
 - — — определение 1 39
 - — — орбитальный 1 45, 254
 - — — отрицательный 1 45
 - — — полный 1 67, 75
 - — — полувсплывший 1 44
 - — — поток 2 411
 - — — проницаемость барьера 2 415—417
 - — — сложение 1 75; 2 529
 - — — соотношение неопределенности 2 445

- Момент угловой спиновый 1 45, 48
 — — целый 1 45
- Моменты инерции равновесные 2 520
 — мультипольные классические 2 407—408
 — — матрицы плотности 2 433
 — — параметры 2 418
 — — электрические 2 408
- Мощность излучаемая 2 410
- Мультиплеты углового момента 1 41
 — *LS* 2 355
- Мультиполи электромагнитные 2 419
- Набор коммутирующих наблюдаемых 1 41
 — — — полный 1 41
 — основных векторов 1 200
- Направление вращения 1 19
- Нарушение симметрии относительно точечных групп 2 550
- Нога крючка 1 224
- Обозначение посредством двойных диаграмм 2 373
- Обозначения *Кондона* и *Шортли* 1 97
- Оболочка замкнутая 2 354—356, 460
- Образование инвариантов 1 105
 — тензорных операторов 1 99
- Обращение времени 2 569
 — — и оператор синьорити 2 473
- Оператор векторный 1 95
 — — сферические компоненты 1 96
 — *Вигнера* 1 128; 2 396, 426, 427
 — — закон произведения 1 130
 — — и обменный оператор 2 484
 — — — синьорити 2 484
 — — как тензорный оператор 1 129
 — — определение 1 129
- Оператор *Вигнера*, ортогональность 1 129
 — — сопряжение 1 129
 — — фундаментальный для унитарной группы 2 375
 — — вращения 1 51
 — — унитарный 1 52
 — *Дирака* $\mathcal{X}$ 2 334—336
 — — — антикоммумутативность 2 335
 — — спиновый обменный 2 481
 — кинетической энергии молекул 2 518
 — обменный 2 385, 481—485
 — — обобщенный 2 482
 — орбитального вращения 1 256
 — *Паули* — *Любаньского* 2 435
 — проективный 1 136
 — *Рака* 1 128; 2 486, 547
 — — закон умножения 1 132
 — — обозначение 1 131
 — — определение 1 131
 — — ортогональность 1 131
 — — сопряжение 1 131
 — тензорный 1 90
 — — единичный 1 109
 — — квазиспиновая классификация 2 479
 — — компоненты 1 91
 — — наивысшая компонента 1 92
 — — неприводимый 1 91, 94; 2 542
 — — определение 1 90
 — — примеры 1 148
 — — физический 1 93
 — — *Хехта* 2 545
 — числа частиц 1 198
- Операторы бозонные 1 197
 — *Казимира* 2 386, 389, 480—485
 — мультипольные тетрадные 2 436
 — повышающие 1 42; 2 337
 — понижающие 1 42
 — рождения 1 197

- Операторы рождения пары частиц 2 474
 — углового момента 1 39
 — — — дифференциальные 1 63
 — — — определение 1 39
 — уничтожения 1 197
 — *Эйлера* 1 203
 Операция отражения 1 89
 Орбита *Кеплера* 2 331
 — определение 2 432, 556
 Ориентация дискретная 1 45
 Ортогонализация *Грама* — *Шмидта* 2 502
 — симметрическая 2 500
 Ортогональность *D*-матрицы 1 70
 Оси симметрии (молекул) и индуцированные представления 2 555
 — — мягкие и жесткие 2 561
 — — устойчивые 2 559, 560
 — — эквивалентные 2 556
 Ось вращения 1 20
 — — устойчивая 2 559—560
 Острова изомерии 2 464
 Осциллятор гармонический 1 196
 — — волюновые функции 2 530
 — — гамильтониан 1 197
 — — матричные элементы 2 542
 Относительность ньютонова 1 16; 2 316
 — *Эйнштейна* 1 16
 Отображение *Йордана* 1 202; 2 473, 477
 — — обобщенное 1 204
 — — применение 1 204
 — — экспонента 1 205
 — *Картана* 1 28, 204
 Отражение 1 19

 Пара бозонная 1 197
 Параметризация группы вращений 1 30
 — *D*-матрицы углами *Эйлера* 1 34
 Параметры *Кэли* — *Клейна* 1 32, 33
 — *Стокса* 2 418, 420
 — тензорные излучения 2 420, 427
 — — мультипольные 2 429
 — *Эйлера* 1 31, 33
 — *Эйлера* — *Родригеса* 1 30, 33
 Перестановка решеточная 1 222; 2 397
 Перестановки координат тождественных частиц 2 539
 Переходы электрические дипольные 2 313, 532
 Плечо крючка 1 224
 Плотность вероятности 1 295
 — тока поперечного 2 409
 — — радиального 2 408
 Поворот длины $\pi/2$ 1 178
 — — π 1 180
 — нулевой 1 177
 — обратный 1 177
 — тождественный 1 180
 Повороты 1 172, 175
 — алгебраический подход 1 185
 — свойства 1 175
 — сумма 1 176
 Подгруппа диагональная 1 147
 — дуальная 1 147
 Поле центрально-симметричное 1 255
 Полином бозонный 1 211
 — — в построении базисных векторов 2 377
 — гармонический 1 138
 — *Гегенбауэра* 2 332
 — *Лагерра* присоединенный 2 328, 338
 — *Лежандра* 1 73; 2 446
 — — вычисление матричных элементов 2 367
 — симплектонный 1 110
 — *Чебышева* 2 442

- Полюсом *Якоби* 1 55; 2 333
 — — связь с матрицами вращений 1 56
 — — явный вид 1 55
 Полоса поглощения колебательная 2 545
 — фундаментальная 2 531, 575
 Полюса *Редже* 2 422
 Поля мультипольные излучаемые 2 409
 — — магнитные 2 406
 — — *Хансена* 2 406, 407
 — — электрические 2 406
 Поляризация, вектор 2 418
 — в релятивистской области 2 436
 — круговая 2 420
 — линейная 2 420
 — матрица плотности 2 417
 — релятивистский оператор 2 418
 Поправка кориолисова к энергии 2 533
 Потенциалы *Дебая* 2 421
 Поток углового момента 2 411
 — электромагнитный, фотонная интерпретация 2 418
 Правила коммутации 2 313
 — — для квазиспина 2 475
 — схемного исчисления 2 375, 399
 Правило *Дирака* 2 315, 335, 427
 — интервалов *Ланде* 2 364
 — *Лапporte* 2 344
 — *Майер* — *Йенсена* 2 462
 — матричного умножения 1 37
 — *Нордхейма* 2 462
 — связывания 1 58
 — *Слэтера* диагональное 2 353
 — сумм *Рака* 1 109
 — — треугольника 1 109
 — суперотбора 1 16
 — транспозиции кватернионное 1 36
 — *Хунда* 2 355, 462
 Правило контракции 1 184
 — мультипольного разложения 2 416, 417
 Представление группы 1 22
 — — S_n антисимметричное 1 221; 2 378
 — двузначное 1 293
 — неприводимое группы $U(2)$ 1 247
 — присоединенное 1 166
 — проективное 1 294
 Преобразование активное 1 21; 2 309
 — "alias" 1 21
 — "alibi" 1 21
 — билинейное 1 32
 — *Ван Флека* 2 525
 — контактное (молекул) 2 524
 — операторов бозонных 1 208
 — ортогональное несобственное 1 69
 — — собственное 1 69
 — *Пандиа* 2 480
 — пассивное 1 21; 2 309
 — спинорной плоскости 1 36
 Преобразования касательные *Ли* — *Бэклунда* 2 339
 Прецессия *Лармора* 2 428
 Приближение *Борна* — *Оппенгеймера* 2 517
 — длинноволновое 2 409
 — центрального поля 2 346
 Приведение электрических мультипольных моментов 2 408
 Принцип запрета *Паули* 2 348, 459, 464, 568
 — — — обобщенный 2 464
 — неопределенности 1 40
 Проблема выбора оси квантования 2 557
 Проекция стереографическая 1 32
 Произведение бозонное скалярное 1 212
 — инвариантное 1 125

Произведение прямое групп 1 146
 — — — пространство реализации
 унитарного представления 2 337
 — — — $SU(2) \times SU(2)$ 1 147
 — — — $SU(2) \times SU(2) \times \dots$ 1 147
 — — матриц 1 146
 — — представлений 1 146
 — тензорное пространство 1 76, 139
 — электронных состояний антисим-
 метризованное 2 349
 Проицаемость барьера 2 415
 Пространство гильбертово 1 202
 — — дуальное 1 202
 — *Евклида* 1 19; 2 534
 — нулевое характеристическое 1 129
 — проективное 2 431
 — собственное углового момента 1
 46
 Процессы электромагнитные 2
 402—423

Разложение двухчастичного взаимо-
 действия 2 481
 — мультипольное, длинноволновый
 предел 2 416
 — — коротковолновый предел 2 416
 — — функции *Грина* 2 406
 — — удивительное свойство 2 409
 — радиальное *Дирака* 2 336
 — *Рэлея* 2 412
 Распределение угловое в процессах
 рассеяния и реакций 2 310
 — — в слабых взаимодействиях 2 437
 — — предельная форма 2 446
 — — продуктов распада 2 310
 Рассеяние рэлееское 2 414
 — электромагнитных волн 2 413
 Реакции релятивистские двухчастич-
 ные 2 453—456

Реализация бозонная векторов состо-
 яния 2 371
 — — квазиспина 2 474—476
 — — операторов орбитального
 углового момента 2 380
 — — спиновых состояний 2 399
 — — унитарных преобразований 2
 371
 — фермионная квазиспина 2 474
 — — отображения *Йордана* 2 474
 Редукция с группы на подгруппу 2
 386, 552
 Резонанс кориолисов 2 526
 — фермиевский 2 526
 Решения мультипольные 2 411
 — — радиальное и тангенциальное
 разложения 2 411
 — — свойство дивергенции и вихря 2
 409
 — — *Хансена* 2 411
 Ротатор, волновые функции 2
 530—531
 Ряд *Лежандра* 2 444—447

Свойство дивергенции и вихря мульт-
 ипольных полей 2 407
 — — — — решений *Хансена* 2 409
 — — производной 1 93
 — — операторов углового момента
 1 93
 Связывание редуцированных мат-
 ричных элементов 1 100
 — тензорных операторов 1 98
 — — — ассоциативность 1 99
 Связь конфигураций 2 363, 366
 — *jj* 2 355
 — — волновые функции 2 469
 — *LS* 2 355, 362, 465, 482
 — — диаграмма типа дерева 2 363
 — элементов *D*-матрицы 1 86

- Сдвиг фазы кулоновский 2 388
 Сечение рассеяния 2 413
 Символ *Редже* 1 86
 — 3 n_j , специальные тождества 2 340
 — *Яманучи* 1 222; 2 374, 375
 Симметрии внутренние 2 546
 — коэффициентов *Рака* 1 117
 — — — геометрическая трактовка 1 119
 — молекул приближенные 2 546
 — *Редже* 1 85
 — таблицы *Редже* 1 86
 Симметрия *Галилея* 1 14
 — *Евклида* 1 19
 — и разделение переменных 2 329
 — кластеров 2 574
 — обменная 2 359
 — *Пуанкаре* 2 453
 Синьорити 2 385, 471
 Система главных осей 2 503, 577
 — покоя 2 431, 435
 — отсчета 1 20
 — — вращающаяся 2 428
 — — выделенной частицы 2 501
 — — жестко связанная с телом 2 489—579
 — — — — — кинематика 2 490—495
 — — — — — форма векторов состояния 2 495—496
 — — спиральности 2 470
 — — эккартова для молекул 2 503
 Систематика атомных спектров 2 348
 Сложение угловых моментов 1 75
 Слой (страта) 2 432
 Случай бесконечного спина 2 437
 Соглашение *Кондона* — *Шортли* 1 74
 Содержание схемы *Вейля* 1 219
 — — *Гельфанда* 1 221
 Созвездие точек на сфере 2 431
 Соотношение коммутации для атома водорода 2 321
 — — — — — углового момента 1 40
 — неопределенностей 1 45
 — рекуррентное для кулоновских радиальных функций 2 336
 Сопряжение комплексное 1 126
 — оператора *Вигнера* 1 129
 — — *Рака* 1 131
 — частица — дырка 2 480
 Состояния атома водорода связанные 2 323—329
 — базисные 1 44
 — — углового момента 1 44
 — изомерные 2 464
 — когерентные 1 199; 2 473
 — паулиевские 2 572
 — поляризованные по кругу 2 433
 — — продольно 2 433
 — слэтеровские 2 348
 — смешанные (некогерентные) 2 425
 — собственные 1 44
 — — гармонического осциллятора 1 197
 — спинные, явный вид 2 392—399
 — чистые 2 425
 Сохранение углового момента 1 14
 — четности 1 89
 Спектроскопия атомная 2 344—402
 — молекул 2 489—579
 — симметричные методы 2 310
 Спектры фундаментальных переходов 2 574
 Спин в системе покоя 2 427, 460
 — измерения поляризации 2 418
 — как релятивистский эффект 2 315
 — канала 2 447
 — — в схеме *Вигнера* — — *Эйзенбуда* 2 454
 — ларморовская прецессия 2 428
 — обменный оператор 2 481

- Спин общий 2 429—436
 — — для безмассовой частицы 2 436
 — — — релятивистской частицы 2 434
 — — матрица плотности 2 434
 — — состояния 2 429
 — — состояния поляризации 2 427
 — ядра 2 570
 Спинор 1 26, 28
 — *Кармана* 1 26
 — конечных размеров 1 27, 36
 — *Паули* 1 266
 — точечный 1 27
 Спиральность 2 404, 456
 Степень символическая 1 216
 Структура ядра 2 457
 Сумма поворотов 1 176
 — — ассоциативность 1 177
 — — некоммутативность 1 177
 Сфера *Пуанкаре* 2 419, 427
 Схема *Вейля* 1 218
 — — двойная 1 225
 — — связь со схемой Гельфанда 1 220
 — — стандартная 1 219
 — *Гельфанда* 1 219; 2 377
 — — двойная 1 225; 2 378, 396
 — — лексикографическая 2 376
 — *jj*-связи 2 355, 364
 — — дерево с индексами 2 365
 — *LS*-связи 2 363
 — — дерево с индексами 2 363
 — *Юнга* 1 218; 2 373, 482
 — — сопряженная 1 224; 2 373
 Схемы расщепления 2 547
 — операторные 2 397

 Таблица *Редже* 1 85
 Тензор инерции эффективный обратный 2 518
 — статистический 2 426

 — — связывание 2 437
 Теорема *Вейля* 1 285; 2 505, 511
 — векторного сложения 1 287
 — взаимности *Фробениуса* 2 559, 563
 — *Вигнера* о симметрии 2 309
 — *Вигнера* — *Эккарта* 1 95, 97; 2 313, 316, 344
 — — — в теории возмущений 2 550
 — — — и дипольный электрический момент 2 566
 — — — — мультиполи 2 479
 — — — — применения 1 100
 — *Гельмгольца* 1 278
 — *Казимира* 2 410
 — *Кэли* — *Гамильтона* 1 269; 2 511
 — *Лармора* 2 312
 — *Нётер* 1 14
 — о корнях полинома 2 432
 — *Паули* — *Людерса* 1 16
 — сложения для сферических функций 1 282
 — — — — — применение к угловым корреляциям 2 447, 449, 451
 — — — — шаровых функций 1 290
 — *Эренфеста* 2 428
 Теория *Бора* квантовая 2 317, 319
 — возмущений *Рэлея* — *Шредингера* 2 523
 — поворотов 1 172
 — поля квантовая 1 202
 — потенциала 1 288
 — реакций *Вигнера* — *Эйзенбуда* 2 454, 456
 Терм 2 355
 Тетрада векторная 2 435
 — ортонормированная 2 435
 Тетрады 2 453
 Тетраздр 1 119
 Техника операторов бозонных 1 198
 Тождество *Биденхарна* — *Эллиотта* 1 109

- Тождество для следов 2 511
 — *Капелли* 1 231
 Трансляция 1 19
 — левая 1 188
 — правая 1 189
- Углы *Эйлера* 1 31, 33, 71
 — — матрица 2 495
 — — параметризация 2 531
 Угол вращения 1 19
 Умножение *D*-матриц 1 86
 — полиномов бозонных 1 211
 Унитарность *D*-матрицы 1 48
 Уравнение движения *Гейзенберга*
 для операторов 2 426
 — — классическое для углового мо-
 мента 2 428
 — *Дирака* для релятивистского
 электрона 2 436
 — *Гельмгольца* 1 278; 2 405
 — *Кэли* — *Гамильтона* 2 511
 — *Лапласа* 1 288; 2 333
 — роторное 1 276
 Уравнения *Максвелла* 2 404
 Уровень 2 354
 — расщепление 2 563
 Условие граничное излучательное 2
 405
 — инвариантности в молекулярной
 модели 2 509
 — *Казимира* 2 490, 499, 501
 — *Лоренца калибровочное* 2 405
 — равновесия для молекулярной мо-
 дели 2 539
 — центра масс 2 501, 502, 505
 Условия промежуточности 1 220
 — треугольника 1 88
 — *Эккарта* 2 501
 Усреднение по мультиплету 2 318
- Фаза 1 74
 — *Кондона* — *Шортли* 1 74
 — матриц углового момента 1 134
 Фактор *Ланде* 2 316—317
 — — электрона 2 318
 Форма полиномиальная 1 150
 Формула *Архимеда* 2 467
 — *Бальмера* 2 319
 — *Бейкера* — *Кэмпбелла* — *Ха-*
усдорфа 1 50
 — *Вигнера* 1 82
 — *Ланде* 2 316
 — *Майораны* 2 440
 — — применение к магнитному резо-
 нансу 2 442
 — *Рака* первая 1 82
 — *Шарпа* 1 154
 Фотон, матрица плотности для поля-
 ризации 2 420
 — параметры *Стокса* 2 418
 Функции *Бесселя* 1 154; 2 406
 — — сферические 2 406, 411, 415
 — волновые 1 61
 — — гармонического осциллятора 2
 530
 — — кулоновские, повышающие и
 понижающие операторы 2
 336—337
 — — — рекуррентные соотношения
 2 336
 — — — связь с методом факториза-
 ции 2 337
 — — — состояния континуума 2 323
 — — свободные от пар 2 476, 478
 — *Ганкеля* 2 406, 407
 — гиперсферические, связь с матри-
 цами вращений 2 333
 — *Грина* 2 405, 406
 — — диадичные 2 406, 407
 — — коэффициентов *Вигнера* 1 242

Функции Грина скалярные 2 406
 — — $3j$ -коэффициентов 1 242
 — Лежандра присоединенные 1 73
 — порождающие 1 242
 — — коэффициентов *Рака* 1 244
 — радиальные 2 325, 327
 — сферические 1 72
 — — векторные 1 266; 2 406
 — — ортогональность 1 72
 — — порождение 1 74
 — — связь с матрицей вращения 1 72
 — — спинорные 1 265
 — — тензорные 1 262; 2 406, 543
 — — 4-пространства 2 333
 — — шаровые 1 74, 259; 2 543
 — — явный вид 1 73

Частица безмассовая в тетрадном
 формализме 2 436
 — бесспиновая 2 444
 — бесструктурная нерелятивистская
 1 255
 — — — в центрально-симметричном
 поле 1 255

— паулиевская 2 320, 334

Частота ларморовская 2 317, 428

Четность 2 393, 514

— сохранение 2 449, 565

Числа квантовые магнитные 1 45

— — углового момента 1 43

— *Кэли* 2 425

— магические 2 460

Число квантовое главное 2 323

Число квантовое каппа Дирака 2 320,
334, 340

Член ватсоновский 2 527

— взаимодействия кориолисов 2 501,
524, 526, 527

— — — второго рода 2 526

— — — первого рода 2 526

— томасовский 2 462

Эквивалентность вращений 1 22

— осей 2 556

— поворотов 1 176

— электронов 2 354

— — в jj -связи 2 368

Эксперимент Траутона — Нобла 1
15

Элементы матричные 1 52

— — редуцированные 1 97; 2 367

— — оператора Рунге — Ленца —
Паули 2 327

— — электростатического взаимо-
действия 2 361

Эффект блокировки 2 478

— *Зеемана* 2 311—319

— — аномальный 2 315

— — как нарушение симметрии 2 311

— — квантовое рассмотрение 2
312—315

— — нормальный 2 311

— — триплет частот 2 313

— *Штарка* 2 339

Якобиан 2 519