§ 67. Матрица плотности спиновых состояний и спин-тензоры

Предположим, что система состоит из двух частиц, обладающих спинами i и J. Спиновое состояние такой системы частиц (например, спиновое состояние одного из каналов реакции) может быть записано в виде линейной комбинации состояний с определенными значениями полного спина s и его проекции m на выделенное направление (ось квантования)

$$\chi_\alpha = \sum_{sm} a_\alpha(sm)\,\chi_{sm}, \tag{67,1}$$

где

$$|J-i| \leqslant s \leqslant J+i, \qquad -s \leqslant m \leqslant s.$$

Среднее значение любой физической величины, которая соответствует оператору $\hat{f}$, действующему в спиновом пространстве системы в состоянии, описываемом функцией χ_α, будет определяться равенством

$$\langle f\rangle_\alpha = \sum_{s_1,\, m_1,\, s_2,\, m_2} \rho_\alpha(s_2m_2s_1m_1)\,\langle s_1m_1|\hat{f}|s_2m_2\rangle, \tag{67,2}$$

где

$$\langle s_1m_1|\hat{f}|s_2m_2\rangle = (\chi_{s_1m_1},\, \hat{f}\chi_{s_2m_2}), \tag{67,3}$$

$$\rho_\alpha(s_2m_2s_1m_1) = a_\alpha(s_2m_2)\,a_\alpha^*(s_1m_1). \tag{67,4}$$

Совокупность величин $\rho_\alpha(s_2m_2s_1m_1)$ полностью определяет спиновое состояние системы (канала реакции) и называется *матрицей плотности спиновых состояний.*

Легко видеть, что вследствие нормировки спиновых функций χ_α и χ_{sm} матрица плотности (67,4) должна удовлетворять условию

$$\operatorname{Sp}\boldsymbol{\rho}_\alpha \equiv \sum_{s_1m_1} \rho_\alpha(s_1m_1s_1m_1) = 1. \tag{67,5}$$

Если матрицу оператора $\hat{f}$, образованную элементами (67,3), обозначить через $\boldsymbol{f}$, то равенство (67,2) можно записать в матричном виде:

$$\langle f\rangle_\alpha = \operatorname{Sp}(\boldsymbol{f}\boldsymbol{\rho}_\alpha) = \operatorname{Sp}(\boldsymbol{\rho}_\alpha\boldsymbol{f}). \tag{67,6}$$

Итак, матрица плотности спиновых состояний позволяет определять средние значения любых физических величин, которым соответствуют спиновые операторы (матрицы).

Выше мы рассмотрели спиновые состояния, которые определяются волновыми функциями (67,1) с определенными фазовыми соотношениями между различными состояниями χ_{sm}, входящими в χ_α. В более общем случае, однако, спиновое состояние системы нельзя описать волновой функцией, а следует рассматривать как статистическую смесь (смешанный ансамбль) состояний типа χ_α. В этом случае можно определить более общую матрицу плотности

$$\rho(s_2m_2s_1m_1)=\sum_\alpha w_\alpha a_\alpha(s_2m_2)\,a_\alpha^*(s_1m_1)=\sum_\alpha w_\alpha\rho_\alpha(s_2m_2s_1m_1), \quad (67,7)$$

где w_α — действительные положительные числа, удовлетворяющие соотношению $\sum_\alpha w_\alpha=1$. Сама матрица плотности ρ при этом удовлетворяет условию нормировки

$$\operatorname{Sp}\rho=1. \quad (67,5a)$$

Среднее значение в состоянии, соответствующем смешанному ансамблю, любой спиновой матрицы f выражается через матрицу плотности (67,7) так же, как и в случае чистых спиновых состояний, т. е.

$$\langle f\rangle=\sum_\alpha w_\alpha\langle f\rangle_\alpha=\operatorname{Sp}(f\rho)=\operatorname{Sp}(\rho f). \quad (67,8)$$

В дальнейшем мы будем предполагать, что матрица плотности спиновых состояний системы определяется выражением (67,7).

Кроме условия (67,5а) элементы матрицы плотности удовлетворяют некоторым другим общим соотношениям. Для их вывода запишем элементы матрицы плотности (67,7) в более сокращенном виде:

$$\rho(s_2m_2s_1m_1)=\rho(n_2n_1),$$

обозначая совокупность квантовых чисел sm одной буквой. Из условия, что средние значения всех эрмитовских операторов должны быть действительными, следует, что матрица плотности должна быть эрмитовской

$$\rho(n_2n_1)=\rho^*(n_1n_2). \quad (67,9)$$

Любая же эрмитовская матрица может быть приведена к диагональному виду с помощью соответствующей унитарной матрицы U_{nm}, т. е.

$$\rho_n\delta_{nm}=\sum_{n_1n_2}U_{nn_2}\,\rho(n_2n_1)\,U_{n_1m}. \quad (67,10)$$

Далее, из условия, что среднее значение любого оператора, имеющего только положительные собственные значения, должно быть положительным, следует, что каждый диагональный элемент матрицы плотности (в любом представлении) должен быть положительным

$$\rho(nn)\geqslant 0. \quad (67,11)$$

Действительно, оператор $f_{n_1n_2}=\delta_{nn_1}\delta_{nn_2}$ имеет собственные значения 0 и 1, а его среднее значение

$$\langle f_{n_1n_2}\rangle=\rho(nn)\geqslant 0.$$

Из (67,10) следует, что

$$\rho(n_2 n_1) = \sum_n U^{-1}_{n_1 n}\rho_n U_{nn_2} = \sum_n \rho_n U_{nn_2} \overset{*}{U}_{nn_1}. \qquad (67,12)$$

Сравнивая это представление матрицы плотности с выражением (67,7), которое в сокращенных обозначениях примет вид

$$\rho(n_2 n_1) = \sum_n w_n a_n(n_2) \overset{*}{a}_n(n_1),$$

мы убедимся, что одним из возможных представлений матрицы U_{nn_2} являются матрицы $a_n(n_2)$. В этом случае статистические веса w_n совпадают с диагональными элементами матрицы плотности ρ_n. В случае чистых состояний $w_n = \delta_{n\alpha}$ и матрица плотности

$$\rho(n_2 n_1) = U_{\alpha n_2} \overset{*}{U}_{\alpha n_1}$$

совпадает с (67,4).

Определим закон преобразования компонент матрицы плотности при вращении системы координат на углы Эйлера $\{\theta_1, \theta_2, \theta_3\} = R$, изображаемом оператором P_R. Закон преобразования компонент матриц плотности (67,7) и (67,4) одинаков, так как w_α являются числами. Из свойств инвариантности квадрата модуля волновой функции (67,1)

$$\chi_\alpha \overset{*}{\chi}_\alpha = \sum_{s_1, m_1, s_2, m_2} \rho_\alpha(s_2 m_2 s_1 m_1) \overset{*}{\chi}_{s_1 m_1} \chi_{s_2 m_2} \qquad (67,13)$$

относительно операции P_R следует, что законы преобразования компонент матрицы плотности $\rho_\alpha(s_2 m_2 s_1 m_1)$ и произведений спиновых функций $\overset{*}{\chi}_{s_1 m_1} \chi_{s_2 m_2}$ должны быть обратными друг другу. Тогда, учитывая, что

$$P_R \chi_{sm} = \sum_\mu \overset{*}{D}{}^s_{m\mu} \chi_{s\mu},$$

находим:

$$P_R \rho(s_2 m_2 s_1 m_1) = \sum_{\mu_1 \mu_2} \overset{*}{D}{}^{s_1}_{m_1 \mu_1} D^{s_2}_{m_2 \mu_2} \rho(s_2 \mu_2 s_1 \mu_1). \qquad (67,14)$$

Используя равенство

$$D^s_{m\mu} = (-1)^{\mu - m} \overset{*}{D}{}^s_{-m, -\mu}$$

и выражая произведение двух D-функций с помощью соотношения (см. приложение I, (Д, 10))

$$D^{s_1}_{m_1 \mu_1} D^{s_2}_{m_2 \mu_2} =$$

$$= \sum_{k=|s_1 - s_2|}^{s_1 + s_2} (s_1 s_2 m_1 m_2 \,|\, k, m_1 + m_2)(s_1 s_2 \mu_1 \mu_2 | k, \mu_1 + \mu_2) D^k_{m_1 + m_2, \mu_1 + \mu_2},$$

преобразуем (67,10) к виду

$$P_R \rho(s_2 m_2 s_1 m_1) = \sum_{k, \mu_1, \mu_2} (-1)^{\mu_2 - m_2} (s_1 s_2, m_1, -m_2 \,|\, k, m_1 - m_2) \times$$

$$\times (s_1 s_2, \mu_1, -\mu_2 \,|\, k, \mu_1 - \mu_2) \overset{*}{D}{}^k_{m_1 - m_2, \mu_1 - \mu_2} \rho(s_2 \mu_2 s_1 \mu_1). \qquad (67,15)$$

Введем следующее обозначение:

$$G_{k,\,\mu_2-\mu_1}=\sum_{\mu_1}(-1)^{\mu_1}(s_1s_2,\,-\mu_1,\,\mu_2\,|\,k,\,\mu_2-\mu_1)\,\rho\,(s_2\mu_2s_1\mu_1). \quad (67,16)$$

Заменяя в (67,15) суммирование по μ_1 суммированием по $\mu_1-\mu_2=\mu$, получим

$$P_R\rho\,(s_2m_2s_1m_1)=$$
$$=\sum_{k,\,\mu}(-1)^{-m_2}(s_1s_2m_1,\,-m_2\,|\,k,\,m_1-m_2)\,G_{k\mu}\overset{*}{D}{}^k_{m_1-m_2,\,\mu}(R). \quad (67,17)$$

Умножая (67,13) на $(-1)^{m_2}(s_1s_2,\,m_1,\,-m_2\,|\,k',\,m_1-m_2)$, суммируя по m_2 и учитывая (67,16) и ортогональность коэффициентов векторного сложения

$$\sum_{m_2}(s_1s_2,\,m_1,\,-m_2\,|\,k',\,m_1-m_2)\,(s_1s_2,\,m_1,\,-m_2\,|\,k,\,m_1-m_2)=\delta_{kk'},$$

находим:

$$P_RG_{km}=\sum_{\mu}\overset{*}{D}{}^k_{m\mu}(R)\,G_{k\mu}. \quad (67,18)$$

Равенство (67,18) показывает, что величины $G_{k\mu}$, определяемые через матрицу плотности равенствами (67,16), при вращении системы координат преобразуются как неприводимые тензорные величины ранга k (см. приложение I, § Д). Будем называть их *спин-тензорами.*

Уравнение (67,16) можно рассматривать как разложение компонент спин-тензора $G_{k\mu}$ по элементам матрицы плотности. Пользуясь унитарностью коэффициентов векторного сложения, из (67,16) можно получить разложение элементов матрицы плотности по компонентам спин-тензора $G_{k\mu}$:

$$\rho\,(s_2m_2s_1m_1)=\sum_k(-1)^{m_2}(s_1s_2,\,m_1,\,-m_2\,|\,k,\,m_1-m_2)\,G_{k,\,m_1-m_2}. \quad (67,19)$$

Соотношение (67,19) может быть получено и непосредственно из (67,17), если положить $R=\{0,\,0,\,0\}$ и учесть, что

$$D^k_{m\mu}(0,\,0,\,0)=\delta_{m\mu}.$$

Формулы (67,16) и (67,19) показывают, что спин-тензор $G_{k\mu}$ может быть использован для определения состояния поляризации с тем же успехом, как и матрица плотности. В случае реакций с неполяризованными частицами все тензоры G_{km} равны нулю кроме одного G_{00}. Действительно, в случае отсутствия поляризации частиц (спина i) и ядер (спин J) элементы матрицы плотности

$$\rho\,(s_2m_2s_1m_1)=\frac{1}{(2i+1)(2J+1)}\,\delta_{s_2s_1}\delta_{m_2m_1}, \quad (67,20)$$

поэтому из уравнения (67,19) следует, что $G_{00}\neq 0$, остальные $G_{k\mu}=0$.

В ряде случаев описание спинового состояния системы осуществляется с помощью спин-тензоров G_{km}, так как они более просто преобразуются при вращении системы координат, чем матрица плотности, и более естественно связаны с величинами, непосредственно измеряемыми на опыте.

Спиновые состояния во входном канале реакции в некоторых случаях могут быть выражены через спиновые состояния частицы и ядра, например в случаях: а) если на неполяризованные ядра падает частично поляризованный пучок частиц; б) если неполяризованный пучок частиц падает на частично поляризованные ядра; в) если пучок частиц и ядра частично поляризованы, но их спиновые состояния некоррелированы. Во всех этих случаях матрица плотности спиновых состояний системы выражается через матрицы плотности спиновых состояний частицы и ядра, а спин-тензоры системы $G_{k\varkappa}$ могут быть выражены через спин-тензоры падающей частицы $G^i_{l\lambda}$ и ядра $G^J_{n\nu}$. Эта связь легко может быть найдена, если выразить спиновую функцию системы через спиновые функции падающих частиц и ядер мишени

$$\chi_{sm} = \sum_M (iJ,\ m-M,\ M \mid sm)\, \chi_{i,\ m-M} \chi_{JM}.$$

Пользуясь этим выражением, в случае некоррелированности спиновых состояний падающих частиц и ядра можно показать, что

$$\rho\,(s_2 m_2 s_1 m_1) = \sum_{M_1 M_2} (iJ,\ m_2 - M_2,\ M_2 \mid s_2 m_2)\,(iJ,\ m_1 - M_1,\ M_1 \mid s_1 m_1) \times \\ \times \rho\,(i,\ m_2 - M_2,\ i,\ m_1 - M_1)\,\rho\,(JM_2 JM_1). \qquad (67,21)$$

Матрица плотности спиновых состояний частиц со спином J определяется выражением

$$\rho\,(JM_2 JM_1) = \sum_\alpha w_\alpha a_\alpha (JM_2)\, a^*_\alpha (JM_1), \qquad (67,22)$$

где w_α — вероятность, с которой представлено «чистое» спиновое состояние частицы

$$\chi_\alpha = \sum_M a_\alpha (JM)\, \chi_{JM}$$

в статистическом ансамбле, характеризующем данное спиновое состояние. Матрица плотности (67,22) является эрмитовской матрицей в $(2J+1)$-мерном спиновом пространстве.

Выражая матрицы плотности частиц через соответствующие спин-тензоры $G^i_{l\lambda}$ и $G^J_{n\nu}$ с помощью соотношений

$$\rho\,(i,\ m_2 - M_2,\ i,\ m_1 - M_1) = \\ = \sum_{l=0}^{2i} (-1)^{m_2 - M_2} (ii,\ m_1 - M_1,\ M_2 - m_2 \mid l\lambda)\, G^i_{l\lambda},$$

$$\rho\,(JM_2 JM_1) = \sum_{n=0}^{2J} (-1)^{M_1} (JJ,\ M_1, -M_2 \mid n\nu)\, G^J_{n\nu},$$

можно записать (67,21) в виде

$$\rho(s_2m_2s_1m_1) = \sum_{M_1, M_2, l, n} (-1)^{m_1} (iJ, m_2 - M_2, M_2 \mid s_2m_2)(iJ, m_1 - M_1, M_1 \mid s_1m_1) \times \times (ii, m_1 - M_1, M_2 - m_2 \mid l\lambda)(JJ, M_1, -M_2 \mid n\nu) G^i_{l\lambda} G^J_{n\nu}. \quad (67,23)$$

Спин-тензор частицы, обладающей спином J, выражается через матрицу плотности спиновых состояний следующим образом:

$$G^J_{n\nu} = \sum_{M_1} (-1)^{M_1} (J\,J, -M_1, M_2 \mid n\nu)\, \rho(JM_2JM_1), \quad (67,24)$$

где

$$0 \leqslant n \leqslant 2J, \quad -J \leqslant \nu \leqslant J.$$

Состояние поляризации пучка частиц со спином J определяется совокупностью спин-тензоров $G^J_{n\nu}$, ранг которых не превышает $2J$. Таким образом для полного определения поляризации надо знать $(2J+1)^2$ величин. В частном случае частиц со спином $^1/_2$ общее состояние поляризации определяется тензором нулевого ранга (беспорядочная поляризация) и тремя компонентами тензора первого ранга $G_{1\nu}$, т. е. четырьмя величинами.

Если начальное спиновое состояние системы характеризуется спин-тензором частицы $G^i_{l\lambda}$, а ядра не поляризованы, то в (67,23) надо положить равными нулю все компоненты спин-тензоров $G^J_{n\nu}$, кроме G^J_{00}, наоборот, при поляризованных ядрах и неполяризованном пучке частиц надо положить равными нулю все компоненты $G^i_{l\lambda}$, кроме G^i_{00}.

Явное выражение спин-тензора $G^J_{n\nu}$, определяющего спиновые состояния частицы, может быть найдено, если мы вспомним, что $G^J_{n\nu}$ при вращении системы координат преобразуются как ν-я компонента неприводимого тензора ранга n. Поэтому тензорные компоненты $G^J_{n\nu}$ могут отличаться только на постоянную величину от соответствующих компонент любых других неприводимых тензоров, построенных из операторов спина частицы. Так, например, связь между $G^J_{1\nu}$ и компонентами тензора

$$g^J_{10} = \frac{\hat{J}_z}{\sqrt{J(J+1)}}, \quad g^J_{1,\pm 1} = \mp \frac{\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y}{\sqrt{2J(J+1)}} \quad (67,25)$$

должна иметь вид

$$G^J_{1\nu} = A g^J_{1\nu}. \quad (67,26)$$

Для определения постоянной A, можно, например, вычислить G^J_{10} для частного случая состояния, характеризующегося волновой функцией χ_{JJ}.

В этом случае в равенстве

$$G_{10}^J = \sum_{M_2} (-1)^{M_2} (J,\ J,\ M_1, -M_2 \mid 10)\, \rho\, (JM_2JM_1),$$

связывающем G_{10}^J с матрицей плотности, надо положить

$$\rho\,(JM_2JM_1) = \delta_{M_2J}\delta_{M_1J}.$$

Таким образом,

$$\langle JJ \mid G_{10}^J \mid JJ \rangle = (-1)^J (JJ, -JJ \mid 10).$$

В том же состоянии

$$\langle JJ \mid g_{10}^J \mid JJ \rangle = \left(\frac{J}{J+1}\right)^{\frac{1}{2}},$$

поэтому из (67,26) находим:

$$A = (-1)^J (JJ, -JJ \mid 10) \sqrt{\frac{J}{J+1}}.$$

Таким образом, явное выражение спин-тензора $G_{1\nu}^J$ будет иметь вид

$$G_{1\nu}^J = (-1)^J \frac{(JJ, -JJ \mid 10)\sqrt{J}}{\sqrt{J+1}}\, g_{1\nu}^J.$$

Если использовать общую формулу для коэффициентов векторного сложения (см. приложение I, (Б, 16), то получим:

$$(JJ, -JJ \mid 10) = (-1)^{2J-1} (JJJ, -J \mid 10) =$$
$$= (-1)^{2J-1} (2J)!\, \sqrt{3}\, [(2J+2)!\, (2J-1)!]^{-\frac{1}{2}}. \qquad (67,27)$$

§ 68. Разложение матрицы плотности спиновых состояний по базисным матрицам спинового пространства и спин-тензорам

Спин-тензоры $G_{n\nu}^J$ преобразуются при вращениях системы координат согласно представлениям D^n трехмерной группы вращения (см. (67,18)), однако они не являются эрмитовскими.

В некоторых случаях вместо спин-тензоров $G_{n\nu}^J$ для описания спиновых состояний потока частиц удобно использовать полную систему $(2J+1)^2$ эрмитовских матриц ω^μ в спиновом пространстве частицы со спином J.

Выберем эрмитовские матрицы ω^μ в спиновом пространстве $(2J+1)$ измерений так, чтобы они удовлетворяли условию ортогональности и нормировки

$$\mathrm{Sp}\,(\omega^\mu \omega^\nu) = (2J+1)\, \delta_{\mu\nu}. \qquad (68,1)$$

Полную систему эрмитовских матриц спинового пространства частицы со спином J, удовлетворяющих условиям (62,1), будем называть *базисной системой матриц.*