

получено это собственное значение  $H^\varepsilon$ , второй индекс указывает, какое представление группы  $K$  соответствует самому собственному значению  $H^\varepsilon$ . Индекс  $i$  можно применять только тогда, когда  $\varepsilon$  достаточно мало, так что для любых различных отщепленных собственных значений можно проследить, из каких первоначальных значений они возникли.

Если  $K$  коммутативна и  $l(k, i)$  принимает значения только 0 и 1, то для заданных  $k, i$  и данного собственного значения будет существовать не более чем одномерное собственное подпространство и стационарное состояние системы будет полностью описываться заданием энергии и двух индексов  $k, i$ .

### 3.4 Сферическая симметрия и спин

Рассмотрим каноническое квантование классической системы, состоящей из одной частицы, движущейся в „поле центральных сил“. Гамильтониан такой системы равен

$$\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \mathcal{V}(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}),$$

где  $\mathcal{V}$  — действительная функция, задающая потенциальную энергию как функцию расстояния от „центра сил“,  $m$  — масса частицы. Если  $m$  — масса электрона и  $\mathcal{V}(r) = -e^2/r$ , где  $e$  — заряд электрона, то мы получаем модель Резерфорда для атома водорода (без учета движения значительно более тяжелого ядра). Соответствующий динамический оператор является некоторым самосопряженным расширением формального дифференциального оператора

$$\psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + \mathcal{V}(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2})\psi,$$

действующего в гильбертовом пространстве  $\mathcal{L}^2(E^3)$ . Пусть  $G$  — группа всех вращений около точки  $(0, 0, 0)$  в  $E^3$ . Для каждого вращения  $\alpha \in G$  оператор

$$(U_\alpha f)(x, y, z) = f(\alpha^{-1}(x, y, z))$$

будет унитарным оператором в  $\mathcal{L}^2(E^3)$ , который коммутирует с  $H$ , и  $\alpha \rightarrow U_\alpha$  будет представлением группы  $G$  в  $\mathcal{L}^2(E^3)$ . Таким образом, мы можем применить теорию, развитую в предыдущем разделе, и получить естественное разложение  $\mathcal{L}^2(E^3)$  в прямую сумму  $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots$ , где каждое  $\mathcal{H}_j$  инвариантно относительно  $H$  и  $U_\alpha$  и представление  $U$ , ограниченное на  $\mathcal{H}_j$ , примарно.

Мы можем выбрать обозначения так, чтобы ограничение  $U$  на  $\mathcal{H}_j$ , было прямой суммой представлений  $D_j$  размерности  $2i + 1$ , описанных в разд. 3.2. Можно показать, что каждое  $D_j$  входит в разложение  $U$  с кратностью  $\infty$ . Действительно, мы можем рассматривать  $E^3$  как  $S^2 \times \mathbb{R}^+$ , где  $S^2$  — единичная сфера в  $E^3$ , а  $\mathbb{R}^+$  — положительная часть действительной оси. Таким образом,  $\mathcal{L}^2(E^3)$  естественным образом изоморфно  $\mathcal{L}^2(S^2) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$ , а  $U_\alpha$  имеет вид  $U'_\alpha \otimes I_\alpha$ , где  $\alpha \rightarrow I_\alpha$  — единичное представление  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$  и  $\alpha \rightarrow U'_\alpha$  — представление в  $\mathcal{L}^2(S^2)$ , индуцированное действием в  $S^2$  группы вращений. Далее, группа вращений действует на  $S^2$  транзитивно, и подгруппа, оставляющая на месте одну точку  $(0, 0, 1)$ , является группой  $K_z$  всех вращений относительно оси  $z$ .

Из общей теоремы теории представлений следует, что  $U'$  содержит каждое  $D_j$  ровно столько раз, сколько раз ограничение  $D_j$  на  $K_z$  содержит единичное представление, т. е. один раз. Таким образом,  $U' = D_1 \oplus D_2 \oplus D_3 \oplus \dots$ . Пусть  $\mathcal{H}'_j$  — однозначно определенное подпространство  $\mathcal{L}^2(S^2)$ , на котором  $U'$  сводится к  $D_j$ ; тогда  $\mathcal{H}_j = \mathcal{H}'_j \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$  и  $U$  содержит  $D_j$  бесконечно того раз.

Рассмотрим ограничение  $H$  на  $\mathcal{H}_j$ . Поскольку это ограничение  $H_j$  коммутирует со всеми  $U_\alpha$ , нетрудно доказать, что оно должно иметь вид  $I \otimes H'_j$ , где  $H'_j$  — некоторый самосопряженный оператор в  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$ . Непосредственные вычисления показывают, что  $H'_j$

представляет собой самосопряженное расширение дифференциального оператора второго порядка

$$\psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) - \frac{j(j+1)}{r^2} \psi \right) + \mathcal{V}(r)\psi.$$

Для тех  $\mathcal{V}$ , которые нас будут интересовать, этот оператор имеет и непрерывный, и точечный спектр, который является *простым*; мы будем интересоваться только точечным спектром.

Обозначим через  $\mathcal{H}_j''$  дискретную часть пространства  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$  относительно оператора  $H_j'$ , т. е. сумму собственных подпространств оператора  $H_j'$ . Тогда  $\mathcal{H}_j'$  будет прямой суммой одномерных подпространств, в каждом из которых оператор  $H_j'$  постоянен, и поэтому  $\mathcal{H}_j^0 = \mathcal{H}_j' \otimes \mathcal{H}_j''$  — дискретная часть  $\mathcal{H}_j'$  относительно оператора  $H_j$  — будет прямой суммой  $(2j+1)$ -мерных подпространств, в каждом из которых оператор  $H_j$  постоянен, а представление  $U$  сводится к  $D_j$ . В частном случае, когда  $\mathcal{V}(r) = -a^2/r$ , собственные значения  $H_j$  равны

$$-\frac{ma^4}{2\hbar^2(k+j+1)^2},$$

где  $k = 0, 1, 2, \dots$ . Здесь  $k$ -е собственное значение  $H_j$  равно  $(k+j-j')$ -му собственному значению  $H_{j'}$ , т. е. имеет место случайное вырождение. Каждое собственное значение соответствует нескольким различным  $D_j$  и имеет кратность, равную сумме их размерностей. Принято называть  $k+j+1 = n$  *полным* или *главным* квантовым числом собственных векторов с собственным значением  $-ma^4/(2\hbar^2n^2)$  (это пространство имеет размерность  $1+3+\dots$ ). О собственных векторах, лежащих в  $\mathcal{H}_j$ , говорят, что они имеют *орбитальное* квантовое число  $j$ .

Мы рассмотрим только тот случай, когда  $\mathcal{V}(r)$  достаточно близко к  $-a^2/r$  для некоторого  $a$ , так что собственные значения задаются формулой

$$-\frac{ma^4}{2\hbar^2(k+j+1+x_{j,k})^2},$$

где  $x_{j,k}$  лежит между 0 и  $1/2$  и зависит главным образом от  $j$ , стремясь к нулю при возрастании  $j$ . В этом случае собственные значения, соответствующие некоторому определенному  $j$ , можно расположить в порядке возрастания и по аналогии с предыдущим случаем мы будем считать, что собственные векторы, соответствующие  $k$ -му собственному значению в этом ряду, имеют главное квантовое число  $k+j$  и орбитальное квантовое число  $j$ . Множество всех собственных векторов оператора  $H$  с главным квантовым числом  $n$  и орбитальным квантовым числом  $j$  будет тогда  $(2j+1)$ -мерным подпространством пространства  $\mathcal{L}^2(E^3)$ .

Главное квантовое число собственного вектора  $H$  определяет (приблизительно) энергию соответствующего стационарного состояния. Как обстоит дело с орбитальным квантовым числом? Определяет ли и оно значение некоторой наблюдаемой? Мы увидим, что ответ на этот вопрос положителен. Вспомним, что наблюдаемыми моментами импульса являются инфинитезимальные образующие однопараметрических групп вращений относительно различных осей, умноженные на  $\hbar$ . Отсюда следует, что каждая наблюдаемая момента импульса переводит  $\mathcal{H}_j$  в себя и коммутирует с  $H$ . Далее, квадрат наблюдаемой *полного момента импульса*, т. е. сумма квадратов моментов импульса относительно трех взаимно перпендикулярных осей, коммутирует со всеми  $U_\alpha$  и поэтому равен постоянной на каждом неприводимом подпространстве  $\mathcal{H}_j$ . Эта постоянная может зависеть только от  $j$ , и вычисление показывает, что она равна  $j(j+1)\hbar^2$ . Таким образом, в состоянии с главным квантовым числом  $n$  и орбитальным квантовым числом  $j$  энергия и полный момент импульса имеют определенные значения с вероятностью 1, причем значение полного момента импульса равно  $\hbar\sqrt{j(j+1)}$ .

Вырождение, вызванное сферической симметрией, можно устраниТЬ, нарушив симметрию. На самом деле достаточно нарушить симметрию хотя бы частично. При изучении атома для этого наиболее удобно поместить атом в однородное магнитное поле; при этом группой симметрии станет подгруппа  $K$  группы  $G$ , состоящая из всех вращений относительно прямой, проходящей через начало координат и параллельной направлению поля. Поскольку  $K$  абелева, она имеет только одно неприводимое представление и соответствующая симметрия не вызывает вырождений. Применяя теорию, развитую в предыдущем разделе, и учитывая, что  $D_j$ , ограниченное на  $K$ , распадается на  $2j + 1$  одномерных представлений, мы должны ожидать, что каждое собственное значение, соответствующее состоянию с орбитальным квантовым числом  $j$ , распадается на  $2j + 1$  различных значений, когда сферическая симметрия заменится цилиндрической. Расщепление на отдельные собственные значения, т. е. расщепление спектральных линий в магнитном поле, называется *эффектом Зеемана*.

Если мы выберем определенную ось, например ось  $z$ , то ограничение  $U$  на  $K_z$  и на  $(2j + 1)$ -мерное подпространство всех собственных векторов с основным квантовым числом  $n$  и орбитальным квантовым числом вызовет разбиение этого  $(2j + 1)$ -мерного пространства на  $2j + 1$  одномерных инвариантных подпространств. Векторы, лежащие в одномерном инвариантном подпространстве, на котором ограничение  $U$  на  $K$  имеет вид  $\theta \rightarrow e^{im\theta} I$ , называют векторами, имеющими *магнитное* квантовое число  $m$ . Заданной тройке квантовых чисел соответствует в точности одно стационарное состояние, так что эти тройки могут служить индексами для некоторого базиса собственных векторов дискретной части  $H$ . Конечно, эти три квантовых числа не могут принимать произвольные значения независимо друг от друга; имеются следующие ограничения:

$$|m| \leq j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n - 1, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Магнитное квантовое число  $m$  также имеет непосредственный физический смысл. Нетрудно подсчитать, что состояние с магнитным квантовым числом  $m$  — это такое состояние, в котором компонента момента импульса относительно оси  $z$  равна  $\hbar m$  с вероятностью 1.

Важно отметить, что магнитное квантовое число всегда связано с выбором определенного направления в пространстве. Моменты импульса относительно различных осей не коммутируют друг с другом, и в состоянии с магнитным квантовым числом  $m$ , в котором момент импульса относительно некоторой оси имеет определенное значение  $\hbar m$ , моменты импульса относительно других осей будут обладать дисперсией и будут принимать всевозможные значения с ненулевой вероятностью.

Проведенный выше анализ применим не только к атому водорода, но и к некоторым другим атомам, таким, как атомы лития, натрия и калия; в этих атомах основную роль играет единственный „внешний“ электрон, который можно считать движущимся в сферически симметричном поле. Однако при точном исследовании спектров этих элементов оказывается, что вместо каждого значения энергии, предсказываемого теорией (при  $j \neq 0$ ), на самом деле имеются два очень близких значения. Далее, в магнитном поле это предсказываемое собственное значение должно было бы распадаться на  $2j + 1$  значений; вместо этого две компоненты собственного значения расщепляются на  $2j$  и  $2j + 2$  значений соответственно. В атome водорода этот эффект маскируется релятивистским эффектом, который его полностью компенсирует.

Нетрудно модифицировать нашу теорию таким образом, чтобы она давала объяснение этим явлениям. Если мы заменим гильбертово пространство  $\mathcal{L}^2(E^3)$  на  $\mathcal{L}^2(E^3) \times \mathcal{H}_0$ , где  $\mathcal{H}_0$  — некоторое гильбертово пространство конечной размерности  $n$ , и заменим каждый самосопряженный оператор  $Q$  в  $\mathcal{L}^2(E^3)$  на  $Q \otimes I$ , то мы получим квантовую систему, совершенно аналогичную первоначальной; изменение будет состоять только в том, что

кратности всех собственных значений умножается на  $n$ , а также в том, что появятся некоторые новые наблюдаемые.

Дополнительное вырождение  $H \otimes I$  связано с тем, что  $H \otimes I$  коммутирует со всеми операторами вида  $I \otimes V$ , где  $V$  — унитарный оператор в  $\mathcal{H}_0$ . Если устраниТЬ это вырождение „малым возмущением“ оператора  $H \otimes I$ , то каждое собственное значение  $H \otimes I$  распадается на  $n$  частей. Для того чтобы получить наблюдаемое расщепление на две части, достаточно взять  $n = 2$ . Как можно согласовать этот переход от  $\mathcal{L}^2(E^3)$  к  $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}_0$  с теми соображениями, которые привели нас к каноническому квантованию? Оглядываясь назад, мы видим, что этот переход находится в противоречии только с одним нашим предположением, которое мы приняли в качестве наиболее простой рабочей гипотезы, а именно с тем, что операторы  $Q$  образуют *полное* коммутирующее свойство. Далее, обсуждение этого вопроса на стр. 88 показывает, что переход от  $\mathcal{L}^2(E^3)$  к  $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}_0$  — единственный путь избавиться от этого предположения, не нарушая коммутационные соотношения Гейзенберга.

Как только мы примем  $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}_0$ , где  $\mathcal{H}_0$  — двумерное гильбертово пространство, в качестве гильбертова пространства нашей системы, у нас возникнет ряд вопросов:

(1) Какой член нужно добавить к  $H \otimes I$ , чтобы получить динамический оператор новой системы?

(2) Какой физический смысл имеют наблюдаемые, соответствующие самосопряженным операторам вида  $I \otimes T$ , где  $T$  — самосопряженный оператор в  $\mathcal{H}_0$ ?

(3) Какие изменения нужно внести в нашу теорию симметрий и квантовых чисел, чтобы она была согласована с новым пространством состояний и объясняла замену  $2j + 1$  на  $2j$  и  $2j + 2$ ?

Нам будет удобнее ответить на эти вопросы в обратном порядке и начать с некоторых кратких указаний относительно одного обобщения теории представлений групп. Представление  $U$  группы всегда определяет некоторый гомоморфизм этой группы в группу автоморфизмов структуры с ортогональным дополнением, которую образуют замкнутые подпространства гильбертова пространства  $\mathcal{H}(U)$ . Однако обратное не всегда верно, даже если наложить некоторые дополнительные требования непрерывности.

Каждый отдельный автоморфизм порождается некоторым унитарным оператором, но этот оператор определяется единственным образом только с точностью до постоянного множителя, и не всегда можно выбрать эту постоянную одновременно для всех элементов группы так, чтобы  $U_{xy} = U_x U_y$ . С другой стороны, независимо от того, как выбраны постоянные, мы имеем  $U_{xy} = \sigma(x, y) U_x U_y$ , где  $\sigma$  — некоторая функция на  $G \times G$  со значениями во множестве комплексных чисел, равных по модулю 1. Соответствие  $x \rightarrow U_x$  называется тогда  $\sigma$ -представлением или *проективным представлением, с мультипликатором  $\sigma$* . Если мы заменим  $U_x$  на  $\rho(x) U_x = U'_x$ , то  $x \rightarrow U'_x$  будет  $\sigma'$ -представлением, где

$$\sigma'(x, y) = \frac{\sigma(x, y) \rho(xy)}{\rho(x) \rho(y)}.$$

Мультипликаторы  $\sigma$  и  $\sigma'$  называются в этом случае подобными. Нетрудно видеть, что классы подобных мультипликаторов образуют группу относительно поточечного умножения. Если эта группа (которую называют группой мультипликаторов) сводится к единичной, то достаточно рассматривать только обычные представления. Как указано на стр. 77, дело обстоит именно так в случае, когда  $G$  — действительная прямая.

Однако, когда  $G$  — группа вращений  $E^3$ , группа множителей содержит один нетривиальный элемент и мы вынуждены рассматривать проективные представления. Очень просто описать все эти представления. Пусть  $SU(2)$  — группа всех квадратных унитарных матриц второго порядка с определителем, равным 1, а  $N$  — подгруппа, состоящая

из двух элементов ее центра:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Нетрудно показать, что  $SU(2)/N$  изоморфна группе вращений  $E^3$ . Поэтому неприводимые представления  $D_j$  определяют неприводимые представления  $D'_j$  группы  $SU(2)$ , которые сводятся к единичному представлению на  $N$ .

Пусть  $L$  — произвольное неприводимое представление  $SU(2)$ . Тогда по лемме Шура ограничение  $L$  на  $N$  должно быть константой, которая, очевидно, равна 1 или  $-1$ . Если она равна 1, то  $L$  определяет неприводимое представление на  $SU(2)/N$  и, следовательно, должно быть одним из  $D'_j$ . Если она равна  $-1$ , то каждому элементу из  $SU(2)/N$  соответствуют два унитарных оператора, отличающихся друг от друга знаком. Считая один из них произвольным (но измеримым), получаем проективное представление группы  $SU(2)/N$ , мультиплликатор которого нетривиален.

Оказывается, что  $SU(2)$  имеет одно и только одно такое представление для каждой четной размерности. Мы обозначаем это представление размерности  $2m$  через  $D'_{m-1/2}$ . Таким образом,  $D'_j$  определено для  $j = 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \dots$  и всегда имеет размерность  $2j+1$ . Когда  $j$  целое,  $D'_j$  определяет представление  $D_j$  группы  $SU(2)/N$ . Когда  $j$  полуцелое,  $D'_j$  определяет проективное представление  $SU(2)/N$ , которое мы также обозначим через  $D_j$ . Таким способом мы получим все проективные представления  $SU(2)/N$ . Оказывается, что формула Клебша—Гордана

$$D_j \otimes D_{j'} = D_{|j-j'|} \oplus D_{|j-j'|+1} \oplus \cdots \oplus D_{j+j'}$$

сохраняется независимо от того, являются ли  $j$  и  $j'$  целыми или полуцелыми, причем прямые суммы и тензорные произведения определяются для проективных представлений очевидным образом. Двумерное представление  $D'_{1/2}$  особенно просто описать: это — представление, которое переводит каждую матрицу из  $SU(2)$  в себя.

Возвращаясь к нашим вопросам, мы начнем с замены представления  $\alpha \rightarrow U_\alpha$  некоторым представлением, имеющим в качестве фазового пространства  $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}_0$ . Более глубокий анализ показал бы, что это представление должно иметь вид  $U \otimes L$ , где  $L$  — некоторое двумерное обычное или проективное представление нашей группы. Группа вращений имеет два таких представления:  $D_{1/2}$  и  $D_0 \otimes D_0$ . Из формулы Клебша—Гордана и наших предыдущих рассуждений следует, что неприводимыми подпредставлениями  $U \otimes L$  являются в первом случае  $D_{j-1/2}$  и  $D_{j+1/2}$ , во втором —  $D_j$ , где  $j = 0, 1, 2, \dots$ . Только первая из этих возможностей согласуется с тем экспериментальным фактом, что уровни энергии распадаются на  $2j$  и  $2j+2$  части вместо  $2j+1$ . Таким образом, мы приходим к предположению, что автоморфизм нашей системы, соответствующий вращению  $\alpha$  в пространстве, порождается унитарным оператором  $U_\alpha \otimes (D_{1/2})_\alpha$ , и это предположение объясняет наблюдаемое расщепление уровней энергии.

Замена  $U$  на  $U \otimes D_{1/2}$  оказывает влияние на наблюдаемые моментов импульса. Ограничение  $U \otimes D_{1/2}$  на однопараметрическую подгруппу  $K$  вращений вокруг оси  $z$  имеет инфинитезимальную образующую вида  $i(\Omega^z \otimes I + I \otimes \Omega_0^z)$ , где  $\hbar \Omega^z$  — самосопряженный оператор, соответствующий моменту импульса относительно оси  $z$  в нашей простейшей модели, а  $\Omega_0^z$  — некоторый самосопряженный оператор в двумерном пространстве  $\mathcal{H}_0$ .

В соответствии с нашим общим принципом мы определяем момент импульса относительно оси  $z$  как наблюдаемую, соответствующую оператору  $\hbar(\Omega^z \otimes I) + \hbar(I \otimes \Omega_0^z)$ . Он отличается от оператора, получающегося при каноническом квантовании, на член  $\hbar(I \otimes \Omega_0^z)$ , который, как оказывается, имеет собственные значения  $\pm \frac{1}{2}\hbar$ . Эта наблюдаемая называется спиновым моментом или спином (относительно оси  $z$ ). Такое название (от английского spin — вращение) связано с тем, что расщепление спектральных линий

на пары в старой квантовой теории „объяснялось“ приписыванием электрону лишней степени свободы — вращения вокруг собственной оси. Хотя электрон, как мы теперь понимаем, слишком мало похож на классическую частицу, чтобы можно было говорить о „настоящем вращении“, физики по-прежнему находят это представление достаточно полезным. С нашей точки зрения, основное содержание гипотезы о спине заключается в существовании дополнительной наблюдаемой типа момента импульса, соответствующей операторам  $\hbar(I \otimes \Omega_0^a)$ , где роль  $a$  может играть  $x$ ,  $y$  или  $z$ . По очевидным соображениям наблюдаемая, соответствующая члену  $\hbar(\Omega^z \otimes I)$ , называется орбитальным моментом импульса (относительно оси  $z$ ). Сохраняется, конечно, только полный момент импульса относительно какой-либо оси.

Одним из наиболее интересных свойств операторов, определяющих спин момента импульса, является то, что они коммутируют с операторами, определяющими наблюдаемые координаты. Операторы спина не коммутируют друг с другом, но при добавлении любого из них к операторам, определяющим наблюдаемые координаты, образуется полное коммутирующее семейство операторов. Более того, ясно, что любой самосопряженный оператор в  $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2})$  получается простой алгебраической комбинацией операторов вида  $A \otimes I$ , где  $A$  — самосопряженный оператор в  $\mathcal{L}^2(E^3)$ , и операторов спина. Таким образом, все новые наблюдаемые, образовавшиеся в результате перехода от  $\mathcal{L}^2(E^3)$  к  $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2})$ , появились вследствие существования спина и выражаются через него.

Динамический оператор нашей модифицированной системы можно записать в виде  $H \otimes I + J$ , где  $H$  — динамический оператор, получающийся в результате канонического квантования, а  $J$  — так называемое „спиновое возмущение“. Оператор  $J$  можно в простой и симметричной форме выразить через классический потенциал  $\mathcal{V}$  и наблюдаемые моменты импульса следующим образом:

$$J = -\frac{1}{2m^2c^2} \frac{\mathcal{V}'(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2})}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} (\Omega^x \otimes \Omega_0^x + \Omega^y \otimes \Omega_0^y + \Omega^z \otimes \Omega_0^z)$$

где  $c$  — скорость света. Как показывает присутствие  $c$ , мы не смогли бы объяснить эту формулу теоретически, не привлекая специальной теории относительности, что вывело бы нас за рамки этого курса.

Выясним теперь, как влияет существование спина на задание собственных векторов энергии с помощью квантовых чисел. Спиновое возмущение  $J$  настолько мало, что позволяет нам поставить в соответствие каждому собственному вектору  $H \otimes I + J$  собственный вектор  $H \otimes I$ , так что нам нужно перечислить только собственные векторы  $H \otimes I$ .

Пространство всех собственных векторов  $H$  с главным квантовым числом  $n$  и орбитальным квантовым числом  $l$  имеет размерность  $2l+1$  и определяет  $2(2l+1)$ -мерное подпространство собственных векторов  $H \otimes I$ . В соответствии с формулой Клебша-Гордана ограничение  $U \otimes D_{1/2}$  на это подпространство является прямой суммой  $D_{i-1/2} \oplus D_{i+1/2}$ . Соответственно наше пространство собственных векторов разлагается в прямую сумму двух пространств размерностей  $2l$  и  $2l+2$ .

Собственные векторы, которые лежат в первой части, имеют главное квантовое число  $n$ , орбитальное квантовое число 1, внутреннее квантовое число  $j = l - 1/2$  и спиновое квантовое число  $s = -1/2$ . Векторы, лежащие во второй части, имеют главное квантовое число  $n$ , орбитальное квантовое число  $l$ , внутреннее квантовое число  $j = l + 1/2$  и спиновое квантовое число  $s = 1/2$ . Зная любые два из трех квантовых чисел  $l, j, s$ , можно определить третье из равенства  $j + s = l$ . Квантовое число  $j$  в отличие от  $l$  и  $s$  имеет точное значение, не зависящее от предположения, что  $J$  мало. Главное квантовое число  $n$  определяет собственное значение энергии только с точностью до небольшой поправки, вносимой возмущением  $J$ .

Множество всех собственных векторов с данными значениями главного, орбитального и спинового квантовых чисел является  $(2j + 1)$ -мерным пространством, где  $j$  — внутреннее квантовое число. Собственные векторы полного момента импульса  $\hbar(\Omega^z \otimes I + I \otimes \Omega_0^z)$  относительно оси  $z$  образуют естественный базис в этом пространстве, причем соответствующие собственные значения меняются от  $-\hbar j$  до  $\hbar j$  с интервалом  $\hbar$ . Если  $j$  является полуцелым, то все собственные значения являются полуцелыми кратными  $\hbar$ . Эти полуцелые множители называются магнитными квантовыми числами  $m$  соответствующих векторов и состояний. Имеется в точности одно состояние с заданными главным, внутренним, магнитным и спиновым квантовыми числами  $n, j, m, s$ , причем три из них можно выбрать произвольным образом так, чтобы выполнялись следующие условия:  $s = \pm 1/2$ ,  $|m| \leq j$  и  $m$  — полуцелое,  $j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots, n$  — целое и больше чем  $j + s$ .

Поскольку основное встречающееся здесь представление группы вращений имеет вид  $U \otimes D_{1/2}$ , электрон считается „частицей со спином  $1/2$ “. Для других „элементарных частиц“ представление  $D_{1/2}$  может заменяться другими. Если эту роль играет  $D_j$ , то говорят о частице со спином  $j$ . Фотон, например, имеет спин 1, некоторые мезоны — спин 0.

### 3.5 Атом с $n$ электронами и принцип Паули

Классическая механическая система, соответствующая модели Резерфорда атома с  $n$  электронами, имеет гамильтониан

$$\sum_{j=1}^n \frac{(p_x^j)^2 + (p_y^j)^2 + (p_z^j)^2}{2m} - \sum_{j=1}^n \frac{ne^2}{\sqrt{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2}} - \sum_{\substack{i,j=1, \\ i \neq j}}^n \frac{e^2}{r_{ij}}$$

(мы по-прежнему пренебрегаем движением ядра). Здесь  $m$  и  $e$  — масса и заряд электрона соответственно и

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}.$$

При каноническом квантовании этой системы мы получили бы квантовую систему, гильбертовым пространством которой служило бы  $\mathcal{L}^2(E^3)$ , а динамическим оператором  $H$  — некоторое самосопряженное расширение формального дифференциального оператора

$$\psi \rightarrow -\frac{\hbar}{2m} \sum_{j=1}^n \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_j^2} \right) - \frac{ne^2}{\hbar} \sum_{j=1}^n \frac{\psi}{\sqrt{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2}} - \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\substack{i,j=1, \\ i \neq j}}^n \frac{\psi}{r_{ij}}$$

Положим  $H = H_0 + H''$ , где  $H_0$  — самосопряженное расширение формального дифференциального оператора, получаемого из  $H$  отбрасыванием последнего члена. Мы видим теперь, что если рассматривать  $\mathcal{L}^2(E^{3n})$  как  $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{L}^2(E^3) \otimes \dots \otimes \mathcal{L}^2(E^3)$  ( $n$  множителей, соответствующих  $n$  электронам), то оператор  $H_0$  можно записать в виде

$$H_0 = \sum_{j=1}^n I \otimes I \otimes \dots \otimes H' \otimes I \otimes \dots \otimes I,$$

$j$ -й множитель где  $H'$  — самосопряженное расширение формального дифференциального оператора

$$\psi \rightarrow -\frac{\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{\hbar \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \psi$$