8

УГЛОВОЙ МОМЕНТ И ГРУППА $\mathcal{R}_3$, ПРИЛОЖЕНИЕ К СТРУКТУРЕ АТОМА

В гл. 7 мы исследовали свойства группы $\mathcal{R}_3$ и отметили связь между инфинитезимальными операторами этой группы и операторами углового момента. В данной главе мы рассмотрим эту связь подробнее на примере сначала одной частицы, а затем и системы частиц, причем введем понятие внутреннего спина. Далее будет рассмотрен реальный пример атомной структуры, в котором неоднократно проявляется наличие симметрии $\mathcal{R}_3$. Мы не ограничимся атомом водорода, но рассмотрим также многоэлектронные атомы.

§ 1. ВРАЩАТЕЛЬНАЯ ИНВАРИАНТНОСТЬ И ЕЕ СЛЕДСТВИЯ

Если гамильтониан сферически-симметричен, что означает отсутствие выделенных направлений в пространстве, то его группой симметрии является группа $\mathcal{R}_3$. Поэтому для него будут справедливы все общие следствия, перечисленные в гл. 5. Познакомившись с группой $\mathcal{R}_3$ в гл. 7, мы можем теперь более детально рассмотреть эти следствия.

Прежде всего, каждое собственное значение несет индекс $j=0, {}^1/_2, 1, \ldots$ неприводимого представления $\mathsf{D}^{(j)}$ группы $\mathcal{R}_3$. Каждый уровень энергии E будет вырожденным с кратностью $2j+1$, причем соответствующие собственные функции образуют базис представления $\mathsf{D}^{(j)}$. Эти собственные функции можно различать по их поведению при поворотах вокруг некоторой выбранной оси (назовем ее осью z). Это соответствует разложению (7.38)

$$\mathsf{D}^{(j)} = \sum_{m=-j}^{j} \mathsf{T}^{(m)} \tag{8.1}$$

представления $\mathsf{D}^{(j)}$ на неприводимые представления $\mathsf{T}^{(m)}$ подгруппы $\mathcal{R}_2$. Поэтому все уровни энергии можно обозначать через $E(\gamma j)$, а волновые функции — через $\psi(\gamma jm)$, где γ — совокупность всех остальных квантовых чисел, не имеющих отношения к вращательной инвариантности.

Поэтому волновая функция $\psi(\gamma jm)$, как мы видели в гл. 7, является собственной функцией двух операторов: оператора J_z бесконечно малых вращений вокруг оси z и оператора Казимира $\mathbf{J}^2$. Из равенств (7.39) и (7.36) следует, что

$$\begin{aligned} \mathsf{J}_z\psi(\gamma jm) &= m\psi(\gamma jm), \\ \mathbf{J}^2\psi(\gamma jm) &= j(j+1)\psi(\gamma jm). \end{aligned} \tag{8.2}$$

На данном этапе мы не уточняли никаких свойств рассматриваемой физической системы, кроме ее сферической симметрии, так что пока нельзя говорить о явном виде и физическом смысле операторов J_q. Но тем не менее уже можно утверждать справедливость равенств (8.2).

Ввиду инвариантности гамильтониана операторы J_x, J_y, J_z, а также оператор $\mathbf{J}^2$ коммутируют с ним и поэтому сохраняются в обычном смысле этого термина (гл. 5, § 5).

Если мы классифицируем все операторы перехода соответственно их поведению при вращениях, то правила отбора по j следуют непосредственно из результатов гл. 5, § 4 совместно с правилом (7.44) для разложения произведения представлений группы $\mathcal{R}_3$. Пусть, например, j и j' — индексы, характеризующие начальное и конечное состояния системы по отношению к группе $\mathcal{R}_3$; далее, пусть рассматриваемый оператор перехода преобразуется по представлению $\mathsf{D}^{(k)}$. Тогда при данном значении j индекс конечного состояния j' может принимать лишь одно из следующих значений:

$$j' = (j+k),\ (j+k-1),\ \ldots,\ |j-k|. \tag{8.3}$$

Напомним (гл. 7, § 4, п. Д), что сферическая гармоника Y_q^k преобразуется по представлению $\mathsf{D}^{(k)}$. В частности, дипольные операторы перехода (гл. 5, § 4), преобразующиеся по векторному представлению $\mathcal{R}_3$, соответствуют значению $k=1$. Разложение (7.49) произвольной функции по сферическим гармоникам часто называется мультипольным разложением, причем член с Y_q^k соответст-

вует мультиполю степени 2^k. (Можно показать, что 2^k — это минимальное число точечных зарядов, необходимых для создания потенциального поля, пропорционального одной сферической гармонике Y_q^k с фиксированным k.) Переход, вызываемый оператором, преобразующимся по представлению $\mathsf{D}^{(k)}$, называют 2^k-польным, а именно: дипольным при $k=1$, квадрупольным при $k=2$, октупольным при $k=3$ и т. д.

Если расширить группу с $\mathcal{R}_3$ до O_3, включив в нее инверсию (отражение), то, поскольку группа $O_3=\mathcal{R}_3\times S_2$ есть прямое произведение групп, система будет наряду со свойствами, описанными выше в случае группы $\mathcal{R}_3$, иметь также свойства, соответствующие группе S_2 (гл. 5, § 6). Иными словами, состояния будут обозначаться индексами jm, а также четностью ± 1. В частности, нетрудно видеть, что в силу своего построения (гл. 7, § 4, п. Д) сферические гармоники Y_q^k имеют четность $(-1)^k$.

§ 2. ОРБИТАЛЬНЫЙ УГЛОВОЙ МОМЕНТ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ

В квантовой механике орбитальный угловой момент одной частицы получают путем замены $\mathbf{p}\to -i\hbar\nabla$ в классическом выражении $\mathbf{r}\times\mathbf{p}$. Таким образом, имеем (в единицах $\hbar$)

$$l_z=-i\,[\mathbf{r}\times\nabla]_z=-i\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}, \qquad (8.4)$$

где φ — угол в полярной системе координат на плоскости, перпендикулярной оси z. В то же время, как явствует из формулы (7.20), выражение для оператора бесконечно малых вращений в пространстве собственных функций одной частицы имеет вид

$$\mathsf{J}_z=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}=l_z. \qquad (8.5)$$

Таким образом, в случае одной частицы инфинитезимальный оператор вращений идентичен оператору углового момента (в единицах $\hbar$). (Ввиду того что выделение оси z не имеет особого смысла, тот же вывод в равной мере справедлив для всех трех компонент углового момента.)

Волновые функции с полуцелым значением углового момента неприемлемы в качестве решений (гл. 7, § 3,