

Окончательно эквивалентный оператор будет равен

$$\mathbf{L}_0^{(4)} + \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} (\mathbf{L}_+^{(4)} + \mathbf{L}_{-4}^{(4)}) = \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} \{ 14\mathbf{L}_z^4 - 12\mathbf{L}_z^2\mathbf{L}_z^2 + \frac{6}{5}(\mathbf{L}^2)^2 - \frac{12}{5}\mathbf{L}^2 + 10\mathbf{L}_z^2 + \mathbf{L}_+^4 + \mathbf{L}_{-4}^4 \}. \quad (\text{П5.21})$$

Для состояний с $L=3$ мы можем написать $\langle \mathbf{L}^2 \rangle = 12$, и тогда получим

$$\mathbf{L}_0^{(4)} + \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} (\mathbf{L}_+^{(4)} + \mathbf{L}_{-4}^{(4)}) = \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} \{ 14\mathbf{L}_z^4 - 134\mathbf{L}_z^2 + 144 + \mathbf{L}_+^4 + \mathbf{L}_{-4}^4 \}.$$

В M -базисе этот оператор можно вычислить непосредственно, пользуясь формулой (7.40) и равенством $\langle \mathbf{L}_z \rangle = M$ и не отыскивая значений коэффициентов связи. Разумеется, это приводит к тому же результату, что и в табл. П.5.

Наконец, заметим, что по формуле (П5.21) можно также вычислить расщепление каждого J -мультиплета, показанное в третьем столбце на рис. 9.8. Нужно лишь написать \mathbf{J}^2 вместо \mathbf{L}^2 и \mathbf{J}_z вместо \mathbf{L}_z . Относительные интенсивности расщеплений в различных J -мультиплетах могут быть вычислены по формуле (П5.14).

ЗАДАЧИ К ПРИЛОЖЕНИЯМ 4 И 5

- П.1.** Покажите, что выбор $\rho(c) = \rho(0)/(\partial c/\partial a)_{a=0}$ достаточен для того, чтобы обеспечить справедливость формулы (П4.14).
П.2. Исходя из соотношения ортогональности (П4.25), покажите, что обобщенный проекционный оператор (оператор перехода) для группы \mathcal{R}_3 можно записать в виде

$$\mathbf{P}_{m'm}^{(j)} = (2j+1) \int D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \mathbf{T}(\alpha, \beta, \gamma) \sin \beta \, d\alpha \, d\beta \, d\gamma / 8\pi^2,$$

где $\mathbf{T}(\alpha, \beta, \gamma)$ — оператор вращения.

- П.3.** Путем элементарных рассуждений покажите, что альтернативная форма записи простого проекционного оператора $\mathbf{P}^{(j)}$ такова:

$$\mathbf{P}^{(j)} = \prod_{j' \neq j} \{ \mathbf{J}^2 - j'(j'+1) \} / \prod_{j' \neq j} \{ j(j+1) - j'(j'+1) \},$$

где через $\prod_{j'=0, 1/2, 1, \dots}$ обозначено бесконечное произведение по индексу j' с условием $j' \neq j$.

- П.4.** Вычислите коэффициенты связи, требуемые для получения уравнения (П5.2). (Воспользуйтесь методом задачи 7.8.)
- П.5.** В задаче (7.12) отношения между матричными элементами тензорного оператора второго ранга по состояниям с $l=1$ вычислялись на основании теоремы Вигнера—Эккарта. Вычислите те же отношения методом эквивалентного оператора (гл. 7, § 4, п. Ж). [Начните с эквивалентного оператора $L_2^{(2)} = L_+L_-$ и постройте другие компоненты на основании формулы (7.52) с учетом формул (7.28) и (7.30). Затем, пользуясь формулой (7.40), найдите матричные элементы.]
- П.6.** Пользуясь формулой (П5.14), покажите, что матричные элементы дипольного оператора $L_0 + gS_0$ в схеме LS -связи даются выражением

$$\langle LSJ'M | L_0 + gS_0 | LSJM \rangle = gM\delta_{J,J} + (1-g)(-1)^{L+S+J+1} \times \\ \times C(J1J', M0M) \begin{Bmatrix} J' & J & 1 \\ L & L & S \end{Bmatrix} [L(L+1)(2L+1)(2J+1)]^{1/2}.$$

(Напишите $S_0 = J_0 - L_0$ и воспользуйтесь ответом задачи 7.13 относительно приведенного матричного элемента оператора углового момента.)

- П.7.** На основании формулы (П5.15) выведите формулу (П5.2). Рассматривая $P_k(\cos \theta_{12})$ как скалярное произведение $Y^{(k)}(1) \cdot Y^{(k)}(2)$ в силу теоремы сложения (П4.8), возьмите приведенные матричные элементы оператора $Y^{(k)}$ из формулы (П4.5). При расчете понадобятся следующие коэффициенты:

$$C(211,000) = -\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}, \quad \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{Bmatrix} = \frac{1}{3}, \quad \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{Bmatrix} = \frac{1}{6}, \quad \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \end{Bmatrix} = \frac{1}{20}.$$

- П.8.** Покажите, что для того, чтобы потенциал V_c в формуле (П5.18) был инвариантным относительно группы O , для коэффициентов должно выполняться соотношение $A_{-4}^4 = A_4^4 = (5/14)^{1/2}A_0^4$. [Рассмотрите вращение вокруг оси x второго и четвертого порядков, учитывая, что $Y_{\pm 4}^4 = N(x \pm iy)^4$, $Y_5^4 = N(2/35)^{1/2}(35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4)$.]

- П.9.** В приложении 5, § 5 было выведено выражение (П5.21) для оператора, эквивалентного оператору V ($k=4$, A_1). Предлагаем упрощенный метод получения того же результата. Искомый оператор должен быть полиномом четвертого порядка по операторам L_x, L_y, L_z . Но, как известно, $L_4^{(4)} = L_+^4$, а также, поскольку для $L_0^{(4)}$ мы имеем $q=0$, оператор $L_0^{(4)}$ должен иметь вид $L_0^{(4)} = C\{L^4 + \alpha L^2 L_z^2 + \beta L_z^4 + \gamma L^2 + \delta L_z^2\}$. Коэффициенты α , β , γ и δ можно найти, потребовав, чтобы оператор $L_0^{(4)}$ имел нулевые матричные элементы во всех состояниях с $L < 2$. Это необходимое условие для тензорного оператора четвертого ранга $k=4$. Выбор состояний $L=1, M=0; L=1, M=1; L=1/2, M=1/2, L=3/2, M=1/2$ достаточен для того, чтобы получить все четыре коэф-

фициента. Чтобы найти правильные относительные величины операторов $L_0^{(4)}$ и $L_4^{(4)}$, необходимо использовать группу симметрии O и выбрать C так, чтобы в полном выражении $L_0^{(4)} - (5/15)^{1/2} (L_4^{(4)} + L_{-4}^{(4)})$ коэффициенты при L_2^4 и L_x^4 были одинаковы.

П.10. Вычислите относительные расщепления при данном J в третьем столбце на рис. 9.8 с помощью эквивалентного оператора, аналогичного оператору (П5.21) для кристаллического поля.

П.11. Методом, указанным в задаче П.10, нельзя вычислить относительное расщепление, вызванное кристаллическим полем, в состояниях с разными значениями J . Вычислите это относительное расщепление, пользуясь формулой (П5.14) и таблицей коэффициентов из книги Ротенберга и др. (т. 1, гл. 7, литература).