Вычисление правой части равенства легко производится с помощью выражения (26,15) для оператора $\hat{l}_-$, согласно которому

$$\hat{l}_-[f(\theta)e^{im\varphi}] = e^{i(m-1)\varphi}\sin^{1-m}\theta\frac{d}{d\cos\theta}(f\sin^m\theta).$$

Повторное применение этой формулы дает

$$\hat{l}_-^{l-m}e^{il\varphi}\Theta_{ll} = e^{im\varphi}\sin^{-m}\theta\frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}}(\sin^l\theta\cdot\Theta_{ll}).$$

Наконец, используя эти соотношения и выражение (28,10) для Θ_{ll}, получим формулу

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-i)^l\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\frac{1}{2^l l!\sin^m\theta}\frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}}\sin^{2l}\theta, \tag{28,11}$$

совпадающую с (28,5).

§ 29. Матричные элементы векторов

Рассмотрим снова замкнутую систему частиц [1]), и пусть f есть любая характеризующая ее скалярная физическая величина, а $\hat{f}$ — соответствующий этой величине оператор. Всякий скаляр инвариантен по отношению к повороту системы координат. Поэтому скалярный оператор $\hat{f}$ не меняется под влиянием операции поворота, т. е. коммутирует с оператором поворота. Но мы знаем, что оператор бесконечно малого поворота с точностью до постоянного множителя совпадает с оператором момента, так что

$$\{\hat{f}, \hat{\mathbf{L}}\} = 0. \tag{29,1}$$

Из коммутативности $\hat{f}$ с оператором момента следует, что матрица величины f по отношению к переходам между состояниями с определенными значениями L и M диагональна по этим индексам. Более того, поскольку задание числа M определяет лишь ориентацию системы по отношению к координатным осям, а значение скалярной величины от этой ориентации вообще не зависит, то можно утверждать, что матричные элементы $\langle n'LM|f|nLM\rangle$ не зависят от значения M (буквой n условно обозначена совокупность всех остальных, помимо L и M, квантовых чисел, определяющих состояние системы). Формальное доказательство этого

---

[1]) Все результаты этого параграфа справедливы и для частицы в центрально-симметричном поле (вообще всегда, когда имеет место сохранение полного момента системы).

утверждения можно получить, воспользовавшись коммутативностью операторов $\hat{f}$ и $\hat{L}_+$:

$$\hat{f}\hat{L}_+ - \hat{L}_+\hat{f} = 0. \tag{29,2}$$

Напишем матричный элемент этого равенства для перехода $n, L, M \to n', L, M+1$. Учитывая, что матрица величины L_+ имеет только элементы с $n, L, M \to n, L, M+1$, находим

$$\langle n', L, M+1|f|n, L, M+1\rangle\langle n, L, M+1|L_+|n, L, M\rangle =$$
$$= \langle n', L, M+1|L_+|n', L, M\rangle\langle n', L, M|f|n, L, M\rangle,$$

и поскольку матричные элементы L_+ не зависят от индекса n, то

$$\langle n', L, M+1|f|n, L, M+1\rangle = \langle n', L, M|f|n, L, M\rangle, \tag{29,3}$$

откуда следует, что вообще все $\langle n', L, M|f|n, L, M\rangle$ с различными M (и одинаковыми остальными индексами) равны между собой.

Если применить этот результат к самому гамильтониану, то мы получим известную уже нам независимость энергии стационарных состояний от M, т. е. $(2L+1)$-кратное вырождение энергетических уровней.

Пусть, далее, **A** — некоторая векторная физическая величина, характеризующая замкнутую систему. При повороте системы координат (в частности, бесконечно малом повороте, т. е. при воздействии оператора момента) компоненты вектора преобразуются друг через друга. Поэтому и в результате коммутирования операторов $\hat{L}_i$ с операторами $\hat{A}_i$ должны получиться вновь компоненты того же вектора $\hat{A}_i$. Какие именно — можно найти, замечая, что в частном случае, когда **A** есть радиус-вектор частицы, должны получиться формулы (26,4). Таким образом, находим правила коммутации:

$$\{\hat{L}_i, \hat{A}_k\} = ie_{ikl}\hat{A}_l. \tag{29,4}$$

Эти соотношения позволяют получить ряд результатов относительно формы матриц компонент вектора **A** (*М. Борн, В. Гейзенберг, П. Иордан*, 1926). Прежде всего оказывается возможным найти *правила отбора*, определяющие, для каких переходов матричные элементы могут быть отличны от нуля. Мы, однако, не станем приводить здесь соответствующих, довольно громоздких, вычислений, поскольку в дальнейшем выяснится (§ 107), что эти правила являются в действительности непосредственным следствием общих трансформационных свойств векторных величин и могут быть получены из них по существу без всяких вычислений. Здесь же мы приведем эти правила без вывода.

Матричные элементы всех компонент вектора могут быть отличны от нуля только для таких переходов, в которых момент L меняется не более чем на единицу:

$$L \to L,\ L \pm 1. \tag{29,5}$$

Кроме того, имеет место дополнительное правило отбора, запрещающее переходы между всякими двумя состояниями с $L = 0$; это правило является очевидным следствием полной сферической симметрии состояний с равным нулю моментом.

Правила отбора по проекции момента M различны для разных компонент вектора. Именно, могут быть отличны от нуля матричные элементы для переходов со следующими изменениями значения M:

$$\begin{aligned} &\text{для } A_+ = A_x + iA_y \quad M \to M+1, \\ &\text{для } A_- = A_x - iA_y \quad M \to M-1, \\ &\text{для } A_z \qquad\qquad\quad\ \ M \to M. \end{aligned} \tag{29,6}$$

Далее, оказывается возможным определить в общем виде зависимость матричных элементов вектора от числа M. Эти важные, часто используемые формулы мы приведем здесь тоже без вывода, поскольку и они являются в действительности частным случаем более общих (относящихся к любым тензорным величинам) соотношений, которые будут получены в § 107.

Отличные от нуля матричные элементы величины A_z определяются следующими формулами:

$$\begin{aligned} \langle n'LM | A_z | nLM \rangle &= \frac{M}{\sqrt{L(L+1)(2L+1)}} \langle n'L \| A \| nL \rangle, \\ \langle n'LM | A_z | n, L-1, M \rangle &= \sqrt{\frac{L^2 - M^2}{L(2L-1)(2L+1)}} \langle n'L \| A \| n, L-1 \rangle, \\ \langle n', L-1, M | A_z | nLM \rangle &= \sqrt{\frac{L^2 - M^2}{L(2L-1)(2L+1)}} \langle n', L-1 \| A \| nL \rangle. \end{aligned} \tag{29,7}$$

Здесь символ

$$\langle n'L' \| A \| nL \rangle$$

обозначает так называемые *приведенные матричные элементы* — величины, не зависящие от квантового числа M [1]). Они связаны

[1]) Появление в формулах (29,7), (29,9) зависящих от L знаменателей соответствует общим обозначениям, введенным в § 107. Целесообразность этих знаменателей проявляется, в частности, в простом виде, который принимает формула (29,12) для матричных элементов скалярного произведения двух векторов. Символ приведенного матричного элемента надо понимать как единое целое (в отличие от того, что было сказано в связи с символом матричного элемента (11,17)).

друг с другом соотношениями

$$\langle n'L' \| A \| nL \rangle = \langle nL \| A \| n'L' \rangle^*, \tag{29,8}$$

непосредственно следующими из эрмитовости оператора $\widehat{A}_z$.

Через те же приведенные элементы выражаются матричные элементы величин A_- и A_+. Отличные от нуля матричные элементы A_- равны

$$\begin{aligned}
&\langle n', L, M-1 | A_- | nLM \rangle = \\
&\qquad = \sqrt{\frac{(L-M+1)(L+M)}{L(L+1)(2L+1)}} \langle n'L \| A \| nL \rangle, \\
&\langle n', L, M-1 | A_- | n, L-1, M \rangle = \\
&\qquad = \sqrt{\frac{(L-M+1)(L-M)}{L(2L-1)(2L+1)}} \langle n'L \| A \| n, L-1 \rangle, \\
&\langle n', L-1, M-1 | A_- | nLM \rangle = \\
&\qquad = -\sqrt{\frac{(L+M-1)(L+M)}{L(2L-1)(2L+1)}} \langle n', L-1 \| A \| nL \rangle.
\end{aligned} \tag{29,9}$$

Матричные элементы A_+ не требуют особых формул, поскольку в силу вещественности A_x и A_y имеем

$$\langle n'L'M' | A_+ | nLM \rangle = \langle nLM | A_- | n'L'M' \rangle^*. \tag{29,10}$$

Отметим формулу, выражающую матричные элементы скаляра **AB** через приведенные матричные элементы двух векторных величин **A** и **B**. Вычисление удобно производить, представив оператор $\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{B}}$ в виде

$$\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{B}} = \frac{1}{2}(\widehat{A}_+\widehat{B}_- + \widehat{A}_-\widehat{B}_+) + \widehat{A}_z\widehat{B}_z. \tag{29,11}$$

Матрица величины **AB** (как и всякого скаляра) диагональна по L и M. Вычисление с помощью (29,7)—(29,9) приводит к результату:

$$\langle n'LM | \mathbf{AB} | nLM \rangle = \frac{1}{2L+1} \sum_{n'', L''} \langle n'L \| A \| n''L'' \rangle \langle n''L'' \| B \| nL \rangle, \tag{29,12}$$

где L'' пробегает значения L, $L \pm 1$.

Выпишем, для справок, приведенные матричные элементы для самого вектора **L**. Из сравнения формул (29,9) и (27,12) находим

$$\langle L \| L \| L \rangle = \sqrt{L(L+1)(2L+1)},$$
$$\langle L-1 \| L \| L \rangle = \langle L \| L \| L-1 \rangle = 0. \tag{29,13}$$

Часто встречающейся в применениях величиной является единичный вектор $\mathbf{n}$ в направлении радиуса-вектора частицы; найдем его приведенные матричные элементы. Для этого достаточно вычислить, например, матричные элементы от $n_z = \cos\theta$ при равной нулю проекции момента: $m = 0$. Имеем

$$\langle l-1,\ 0|n_z|l0\rangle = \int_0^\pi \Theta^*_{l-1,\,0}\cos\theta\,\Theta_{l0}\sin\theta\,d\theta$$

с функциями Θ_{l0} из (28,11). Вычисление интеграла приводит к результату [1])

$$\langle l-1,\ 0|n_z|l0\rangle = il/\sqrt{(2l-1)(2l+1)}.$$

Матричные же элементы для переходов $l \to l$ равны нулю (как и для всякого полярного вектора, относящегося к отдельной частице — см. ниже (30,8)). Сравнение с (29,7) дает теперь

$$\langle l-1\|n\|l\rangle = -\langle l\|n\|l-1\rangle = i\sqrt{l},\quad \langle l\|n\|l\rangle = 0. \qquad (29,14)$$

Задача

Усреднить тензор $n_i n_k - \frac{1}{3}\delta_{ik}$ (где $\mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении радиуса-вектора частицы) по состоянию с заданной абсолютной величиной вектора $\mathbf{l}$, но не его направлением (т. е. неопределенным l_z).

Решение. Искомое среднее значение есть оператор, который может выражаться лишь через оператор $\hat{\mathbf{l}}$. Ищем его в виде

$$\overline{n_i n_k} - \frac{1}{3}\delta_{ik} = a\left[\hat{l}_i\hat{l}_k + \hat{l}_k\hat{l}_i - \frac{2}{3}\delta_{ik}l(l+1)\right];$$

это есть наиболее общий вид составленного из компонент $\hat{\mathbf{l}}$ симметричного тензора второго ранга с равным нулю следом. Для определения постоянной a умножаем написанное равенство слева на $\hat{l}_i$ и справа на $\hat{l}_k$ (с суммированием по i и k). Поскольку вектор $\mathbf{n}$ перпендикулярен к вектору $\hbar\hat{\mathbf{l}} = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}]$, то $n_i\hat{l}_i = 0$. Произведение $\hat{l}_i\hat{l}_i\hat{l}_k\hat{l}_k = (\hat{\mathbf{l}}^2)^2$ заменяем его собственным значением $l^2(l+1)^2$, а произведение $\hat{l}_i\hat{l}_k\hat{l}_i\hat{l}_k$ преобразуем с помощью соотношений коммутации (26,7) следующим образом:

$$\hat{l}_i\hat{l}_k\hat{l}_i\hat{l}_k = \hat{l}_i\hat{l}_i\hat{l}_k\hat{l}_k - ie_{ikl}\hat{l}_i\hat{l}_l\hat{l}_k = (\hat{\mathbf{l}}^2)^2 - \frac{i}{2}e_{ikl}\hat{l}_i(\hat{l}_l\hat{l}_k - \hat{l}_k\hat{l}_l) =$$

$$= (\hat{\mathbf{l}}^2)^2 + \frac{1}{2}e_{ikl}e_{lkm}\hat{l}_i\hat{l}_m = (\hat{\mathbf{l}}^2)^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 = l^2(l+1)^2 - l(l+1)$$

[1]) Вычисление осуществляется $(l-1)$-кратным интегрированием по частям по $d\cos\theta$. Общую формулу для интегралов такого вида — см. (107,14).

(мы воспользовались тем, что $e_{ikl}e_{mkl} = 2\delta_{im}$). После простого приведения получим в результате

$$a = -\frac{1}{(2l-1)(2l+3)}.$$

§ 30. Четность состояния

Наряду с параллельными переносами и поворотами системы координат (инвариантность по отношению к которым выражает соответственно однородность и изотропию пространства) существует еще одно преобразование, оставляющее неизменным гамильтониан замкнутой системы. Это — так называемое преобразование *инверсии*, заключающееся в одновременном изменении знака всех координат, т. е. изменении направления всех осей на обратное; правовинтовая система координат переходит при этом в левовинтовую, и наоборот. Инвариантность гамильтониана по отношению к этому преобразованию выражает собой симметрию пространства по отношению к зеркальным отражениям[1]). В классической механике инвариантность функции Гамильтона по отношению к инверсии не приводит к каким-либо новым законам сохранения. В квантовой же механике ситуация существенно иная.

Введем оператор инверсии $\hat{P}$ [2]), действие которого на волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ заключается в изменении знака координат:

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \tag{30,1}$$

Легко найти собственные значения P этого оператора, определяемые уравнением

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = P\psi(\mathbf{r}). \tag{30,2}$$

Для этого замечаем, что двукратное воздействие оператора инверсии приводит к тождеству — аргументы функции вообще не меняются. Другими словами, имеем $\hat{P}^2\psi = P^2\psi = \psi$, т. е. $P^2 = 1$, откуда

$$P = \pm 1. \tag{30,3}$$

Таким образом, собственные функции оператора инверсии либо не меняются вовсе под его воздействием, либо меняют свой знак. В первом случае волновую функцию (и соответствующее состояние) называют *четной*, а во втором — *нечетной*.

Инвариантность гамильтониана по отношению к инверсии (т. е. коммутативность операторов $\hat{H}$ и $\hat{P}$) выражает собой, следо-

---

[1]) Инвариантен по отношению к инверсии также и гамильтониан системы частиц, находящихся в центрально-симметричном поле (причем начало координат должно совпадать с центром поля).

[2]) От английского слова parity — четность.