матричные элементы, соответствующие переходу $n-1 \to n$, т. е. переходу с увеличением квантового числа n на единицу. У оператора $\hat{a}$ отличны от нуля матричные элементы, соответствующие переходу $n \to n-1$. В этой связи операторы и называются операторами соответственно поглощения и рождения возбуждения. Для операторов $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$ имеют место, как это следует из (50,12), следующие перестановочные соотношения:

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1. \tag{50,13}$$

Оператор $\hat{H}$, выраженный через операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+) \tag{50,14}$$

и с учетом (50,12) мы снова приходим к (50,10). Пользуясь матричным методом, можно также получить выражение для волновых функций осциллятора[1]).

§ 51. Матричные элементы оператора момента[2])

При исследовании свойств момента количества движения, проведенном в § 30 гл. III, мы исходили непосредственно из выражений (30,1) и (30,2) для операторов момента. В настоящем параграфе мы будем основываться только на перестановочных соотношениях (30,3), (30,3′). Оказывается, что такая постановка вопроса носит более общий характер. В частности, конкретные выражения для операторов (30,1) и (30,2) не могут быть использованы при исследовании свойств собственного момента количества движения — спина, который будет рассмотрен в гл. VIII. Между тем, перестановочные соотношения вида (30,3) остаются справедливыми и для собственного момента количества движения (см. § 60). Исследование свойств момента количества движения, основывающееся на соответствующих перестановочных выражениях, удобно проводить в матричной форме. Будем обозначать матрицы, отвечающие проекциям момента количества движения на оси x, y, z, через $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$. Изменение обозначений связано с тем, что результаты, полученные в этом параграфе, будут справедливы не только для момента количества движения, связанного с пространственным движением, орбитального момента $\hat{\boldsymbol{l}} = \frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{r} \times \nabla)$, но и для момента количества движения,

---

[1]) Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 95.

[2]) Вопросы, затронутые в этом и следующих параграфах этой главы, более подробно рассмотрены в книгах Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 111, и Е. Кондон и Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, 1949.

не связанного с пространственным движением — спина, а также для полного момента количества движения (см. § 62). Введем также матрицу $\hat{J}^2$, отвечающую квадрату момента количества движения $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + J_y^2 + \hat{J}_z^2$. Итак, возьмем за основу следующие перестановочные соотношения:

$$\left.\begin{aligned} \hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x &= i\hbar\hat{J}_z, \\ \hat{J}_y\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{J}_y &= i\hbar\hat{J}_x, \\ \hat{J}_z\hat{J}_x - \hat{J}_x\hat{J}_z &= i\hbar\hat{J}_y. \end{aligned}\right\} \tag{51,1}$$

Прежде всего из этих соотношений следуют правила коммутации (доказательство аналогично приведенному в § 30):

$$\left.\begin{aligned} \hat{J}_x\hat{J}^2 - \hat{J}^2\hat{J}_x &= 0, \\ \hat{J}_y\hat{J}^2 - \hat{J}^2\hat{J}_y &= 0, \\ \hat{J}_z\hat{J}^2 - \hat{J}^2\hat{J}_z &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{51,2}$$

Мы выберем то представление, в котором диагональны матрицы $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ и $\hat{H}$. Действительно, в § 47 мы доказали, что коммутирующие между собой матрицы могут быть одновременно приведены к диагональному виду. Коммутация некоторой матрицы с матрицей $\hat{H}$ выражает закон сохранения соответствующей величины (см. § 32). Поэтому предположение коммутации матриц $\hat{J}^2$ и $\hat{J}_z$ с $\hat{H}$ означает лишь выполнение законов сохранения.

Строки и столбцы рассматриваемых матриц будем нумеровать индексами m, j, n. Вещественное число m определяет проекцию момента количества движения на ось z, $J_z = m\hbar$. Число j характеризует величину полного момента, а число n связано с уровнем энергии системы. Поскольку все рассматриваемые матрицы коммутируют с матрицами $\hat{J}^2$ и $\hat{H}$, они диагональны по индексам j и n. Следовательно, можем написать, используя обозначения Дирака, матричные элементы интересующих нас матриц в виде (мы будем употреблять круглые скобки)

$$\left.\begin{aligned} (m'j'n' \mid \hat{H} \mid mjn) &= E_{jn}\delta_{jj'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}, \\ (m'j'n' \mid \hat{J}^2 \mid mjn) &= J_j^2\delta_{jj'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}, \\ (m'j'n' \mid \hat{J}_z \mid mjn) &= m\hbar\delta_{jj'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}, \\ (m'j'n' \mid \hat{J}_x \mid mjn) &= (J_x)_{m'm}\,\delta_{jj'}\delta_{nn'}, \\ (m'j'n' \mid \hat{J}_y \mid mjn) &= (J_y)_{m'm}\,\delta_{jj'}\delta_{nn'}. \end{aligned}\right\} \tag{51,3}$$

Здесь через J_j^2 мы обозначили собственное значение квадрата момента количества движения. Для дальнейшего нам будет удобно ввести также матрицы $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$ и $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$. Очевидно, что эти матрицы, как и исходные матрицы $\hat{J}_x$ и $\hat{J}_y$, диагональны по индексам j и n. Учитывая последнее, мы будем в дальнейшем опускать индексы j и n.

Нашей задачей является определение спектра возможных значений проекции момента количества движения на произвольно ориентированную ось, установление связи этих величин с абсолютной величиной момента $\sqrt{J_j^2}$ и нахождение матриц $(J_x)_{m'm}$ и $(J_y)_{m'm}$. Прежде всего покажем, что спектр возможных значений проекций момента при заданном полном моменте ограничен сверху и снизу. Для этого воспользуемся матричным соотношением

$$\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2.$$

Приравнивая диагональные матричные элементы левой и правой части, получим

$$J_j^2 - m^2\hbar^2 = \sum_k [(J_x)_{mk}(J_x)_{km} + (J_y)_{mk}(J_y)_{km}] = \sum_k |(J_x)_{mk}|^2 + |(J_y)_{mk}|^2. \tag{51,4}$$

При этом мы воспользовались эрмитовостью матриц J_x и J_y. Итак, правая часть равенства (51,4) заведомо не отрицательна. Отсюда вытекает неравенство

$$m^2\hbar^2 \leqslant J_j^2 \tag{51,5}$$

или

$$-\sqrt{J_j^2} \leqslant m\hbar \leqslant \sqrt{J_j^2}.$$

Обозначим через m_1 и m_2 значения квантового числа m, отвечающие соответственно наибольшей и наименьшей возможной проекции момента на ось z. Спектр возможных значений чисел m найдем с помощью матриц $\hat{J}_+$ и $\hat{J}_-$. Для этого находим коммутатор этих матриц с матрицей $\hat{J}_z$. Пользуясь (51,1), получаем

$$\hat{J}_z\hat{J}_+ - \hat{J}_+\hat{J}_z = \hbar\hat{J}_+, \qquad \hat{J}_z\hat{J}_- - \hat{J}_-\hat{J}_z = -\hbar\hat{J}_-. \tag{51,6}$$

Раскроем первое из этих соотношений

$$(J_zJ_+)_{m'm''} - (J_+J_z)_{m'm''} = \hbar(J_+)_{m'm''}.$$

Вычисляя матричный элемент от произведения по правилу (45,6) и учитывая, что матрица J_z диагональна, находим:

$$\hbar(m' - m'')(J_+)_{m'm''} = \hbar(J_+)_{m'm''}. \tag{51,7}$$

Из равенства (51,7) следует, что матрица $\hat{J}_+$ имеет отличные от нуля матричные элементы $(J_+)_{m'm''}$ лишь при условии $m' - m'' = 1$, т. е. для переходов, соответствующих увеличению квантового числа m на единицу $m \to m + 1$. Аналогичным образом из второго равенства (51,6) легко показать, что матрица $\hat{J}_-$ имеет отличные от нуля матричные элементы лишь для переходов с уменьшением квантового числа m на единицу, т. е. $m \to m - 1$. Таким образом, мы приходим к выводу, что, если при заданном J_j^2 оказывается возможным некоторое значение $m\hbar$ проекции момента на ось z, то возможны также значения проекции $(m+1)\hbar$, $(m-1)\hbar$, $(m+2)\hbar$, $(m-2)\hbar$ и т. д. Мы выяснили, однако, ранее, что спектр возможных значений числа m должен быть ограничен $m_2 \leqslant m \leqslant m_1$. Положив в равенстве (51,7) $m'' = m_1$ и учитывая, что в нем m' не может принимать значение $m_1 + 1$, мы видим, что оно выполняется только при обращении в нуль матричного элемента $(J_+)_{m_1+1,\, m_1}$. Следовательно,

$$(m_1 + 1 \mid J_+ \mid m_1) = 0. \tag{51,8}$$

Аналогичную ситуацию имеем и при минимальных возможных значениях числа m. Соответствующее равенство здесь также выполняется за счет обращения в нуль матричного элемента $(J_-)_{m_2-1,\, m_2}$

$$(m_2 - 1 \mid J_- \mid m_2) = 0. \tag{51,9}$$

Таким образом, возможные значения проекции момента равны $m_2\hbar$, $(m_2+1)\hbar$, $(m_2+2)\hbar$, ..., $(m_1-1)\hbar$, $m_1\hbar$. При этом разность $m_1 - m_2$ может быть равной только целому положительному числу (включая и нуль). Покажем, что значения чисел m_1 и m_2 определяют величину J_j^2. Действительно, матрицу $\hat{J}^2$ можно представить в виде

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z. \tag{51,10}$$

Беря диагональные матричные элементы от левой и правой частей, соответствующие переходу $m_1 \to m_1$, имеем

$$J_j^2 = \sum_k (J_-)_{m_1 k} (J_+)_{k m_1} + m_1^2\hbar^2 + \hbar^2 m_1.$$

Здесь возможно лишь $k = m_1 + 1$, но при этом обращается в нуль матричный элемент от J_+ (51,8). Следовательно,

$$J_j^2 = \hbar^2 m_1 (m_1 + 1).$$

С другой стороны, равенство (51,10) можно переписать также и в такой форме:

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z. \tag{51,11}$$

Если в последнем выражении приравнять диагональные матричные элементы $m_2 \to m_2$, то получим:

$$J_j^2 = \hbar^2 m_2 (m_2 - 1)$$

и, следовательно,

$$m_1 (m_1 + 1) = m_2 (m_2 - 1).$$

Это равенство удовлетворяется при условии $m_2 = m_1 + 1$ и $m_2 = -m_1$. Поскольку, однако, всегда $m_2 \leqslant m_1$, мы должны оставить лишь второй корень $m_2 = -m_1$. Следовательно, максимальная (равная $m_1\hbar$) и минимальная (равная $m_2\hbar$) возможные проекции момента количества движения на ось z равны по абсолютной величине. Квадрат полного момента равен, как мы выяснили, величине $\hbar^2 m_1 (m_1 + 1)$. С другой стороны, мы условились характеризовать эту величину квантовым числом j. Поэтому естественно положить $m_1 = j$. При этом имеем:

$$J_j^2 = \hbar^2 j (j + 1). \tag{51,12}$$

Возможные значения проекции момента J_z соответственно равны

$$J_z = j\hbar,\ (j-1)\hbar,\ (j-2)\hbar,\ \ldots,\ (-j+1)\hbar,\ -j\hbar. \tag{51,13}$$

Всего проекция момента принимает $2j + 1$ значений. Заметим, что, поскольку $2j + 1$ — целое положительное число, квантовое число j может принимать лишь целые или полуцелые значения $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ и т. д. Для орбитального момента количества движения это число, как мы выяснили в § 30, принимает лишь целые значения $j = l$. Мы увидим, однако, в гл. VIII, что для собственного момента количества движения j может принимать и полуцелые значения.

Так как ось z заранее ничем не выделена, то проекция момента количества движения на любую другую ось также дается формулой (51,13). Отметим, что, если число j — целое, то проекции момента на любую ось также целочисленны (в единицах $\hbar$); если же j полуцелое, то проекции момента принимают полуцелые значения.

Найдем теперь матрицы $\hat{J}_x$ и $\hat{J}_y$. Для этого можем воспользоваться, например, соотношением (51,10), взяв диагональные матричные элементы левой и правой части. Учитывая также (51,12), имеем:

$$\hbar^2 j (j + 1) = \sum_k (J_-)_{mk} (J_+)_{km} + \hbar^2 m^2 + \hbar^2 m,$$

причем отличен от нуля лишь член суммы с $k = m + 1$.

Из эрмитовости матриц J_x и J_y следует, что

$$(J_+)_{km} = (J_-)^*_{mk}.$$

Следовательно, предыдущее равенство дает

$$|(J_+)_{m+1,m}|^2 = \hbar^2[j(j+1) - m(m+1)] = \hbar^2(j-m)(j+m+1).$$

Для матричного элемента $(J_+)_{m+1,\,m}$ имеем

$$(m+1|J_+|m) = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,e^{i\beta}.$$

Фазу β без ограничения общности можно положить равной нулю. Окончательно получаем

$$\begin{aligned}(m+1|J_+|m) &= (J_x+iJ_y)_{m+1,\,m} = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)},\\ (m|J_-|m+1) &= (J_x-iJ_y)_{m,\,m+1} = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)},\end{aligned} \tag{51,14}$$

т. е.

$$(J_+)_{m+1,\,m} = (J_-)_{m,\,m+1}. \tag{51,15}$$

Из определения матриц J_+ и J_- следует, что

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \qquad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-).$$

Используя (51,14), получаем

$$\begin{aligned}(m+1|J_x|m) &= (m|J_x|m+1) = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)},\\ (m+1|J_y|m) &= -(m|J_y|m+1) = -\frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}.\end{aligned} \tag{51,16}$$

В качестве примера выпишем матрицы, которые получаются при $j = 1$:

$$\hat{J}_x = \begin{pmatrix} (J_x)_{11} & (J_x)_{10} & (J_x)_{1,\,-1}\\ (J_x)_{01} & (J_x)_{00} & (J_x)_{0,\,-1}\\ (J_x)_{-1,\,1} & (J_x)_{-1,\,0} & (J_x)_{-1,\,-1}\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},$$

$$\hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}; \quad \hat{J}_z = \hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, \tag{51,17}$$

$$\hat{J}^2 = \hbar^2\cdot 2\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}.$$

§ 52. Сложение моментов количества движения

Определим возможные значения момента количества движения $\boldsymbol{J}$, равного сумме двух моментов $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2$. Пусть $\boldsymbol{J}_1$ и $\boldsymbol{J}_2$ — моменты количества движения, относящиеся к двум подсистемам, взаимодействием между которыми можно пренебречь.