

При $m = 0$ эти выражения совпадают

$$Y_l^0(\theta, \phi) = c_l \sqrt{\frac{1}{(2l)!}} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} (1 - \cos^2 \theta)^l.$$

С точностью до множителя получили полином Лежандра $P_l(\cos \theta)$ (ур. (B. 71))

$$Y_l^0(\theta, \phi) = (-1)^l \frac{c_l 2^l l!}{\sqrt{(2l)!}} P_l(\cos \theta) = (-1)^l \frac{c_l}{|c_l|} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta).$$

Условие вещественности и положительности $Y_l^0(0, 0)$ определяет выбор фазы

$$\frac{c_l}{|c_l|} = (-1)^l.$$

Тем самым полностью определены выражения (37) и (39) для $Y_l^m(\theta, \phi)$.

Большинство свойств сферических функций, которые перечислены в Дополнении Б, можно легко получить из компактных формул (37) и (39). Отметим, в частности, что

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_l^{m*}(\theta, \phi),$$

Y_l^m является произведением $e^{im\phi} \sin^{|m|} \theta$ и полинома по $\cos \theta$ степени $l - |m|$ и четности $(-1)^{l-|m|}$, а четность Y_l^m (задача 4) равна $(-1)^l$, т. е.

$$Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi).$$

Раздел III. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА И ВРАЩЕНИЯ

§ 10. Определение вращений. Углы Эйлера

В этом параграфе мы напомним некоторые свойства вращений в обычном пространстве.

По определению, вращением вокруг точки O называется такое перемещение точек пространства как целого, при котором точка O остается неподвижной. При таком перемещении, каждая точка P переходит в новое положение P' и существует взаимнооднозначное соответствие между P и P' . Можно было бы определить вращение вокруг O как взаимнооднозначное соответствие между точками пространства, при котором точке O соответствует она сама и которое сохраняет как расстояния

(а следовательно, и углы), так и ориентацию координатных осей¹⁾.

Единичный вектор u и угол φ определяют конкретное вращение $\mathcal{R}_u(\varphi)$ — поворот на угол φ вокруг оси, направленной по u (положительное вращение вокруг этой оси определяется обычным образом). Этот способ задания вращения не единственный. Для выполнения $\mathcal{R}_u(\varphi) = \mathcal{R}_{u_1}(\varphi)$, необходимо и достаточно, чтобы

$$\begin{aligned} u_1 &= u \\ \varphi_1 &= \varphi + 2n\pi \quad \text{или} \quad u_1 = -u \\ \varphi_1 &= -\varphi + 2n\pi \end{aligned}$$

$(n$ — произвольное целое число).

Будем называть вращение *инфinitезимальным*, если $\varphi = \varepsilon$ бесконечно мало. Легко написать вектор V' , в который при инфинитезимальном вращении $\mathcal{R}_u(\varepsilon)$ переходит вектор V :

$$V' \approx V + \varepsilon(u \times V) \quad (\varepsilon \ll 1). \quad (40)$$

Другой способ задания вращения состоит в фиксации углов Эйлера α, β, γ . Пусть $Oxyz$ — правая система осей, а $OXYZ$ — система осей, получаемая из предыдущей вращением, Ou — одна из двух ориентированных осей, перпендикулярных плоскости OzZ (рис. 1). Углами Эйлера будут²⁾

$$\alpha = (Oy, Ou), \beta = (Oz, Oz), \gamma = (Ou, OY).$$

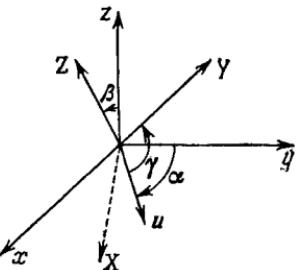


Рис. 1. Определение углов Эйлера.

Полное вращение является результатом трех последовательных вращений

$\mathcal{R}_z(\alpha)$ — вращение на угол α вокруг Oz (Oy переходит в Ou);
 $\mathcal{R}_u(\beta)$ — вращение на угол β вокруг Ou (Oz переходит в OZ);
 $\mathcal{R}_z(\gamma)$ — вращение на угол γ вокруг OZ (Ou переходит в OY).

Обозначим результирующее вращение через $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ и запишем

$$\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{R}_z(\gamma) \mathcal{R}_u(\beta) \mathcal{R}_z(\alpha). \quad (41)$$

Углы α, β, γ являются алгебраическими величинами. Они положительны или отрицательны в зависимости от того, является ли вращение вокруг осей Oz, Ou, OZ положительным

¹⁾ В отличие от отражений, которые сохраняют расстояния, но меняют ориентацию координатных осей.

²⁾ Принятое здесь определение несколько отличается от используемого обычно в теории гироскопа.

или отрицательным. Для выбранной системы $Oxyz$ одно и то же вращение может быть задано несколькими наборами углов Эйлера. Необходимыми и достаточными условиями равенства $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma) = \mathcal{R}(\alpha_1\beta_1\gamma_1)$ являются

$$\begin{aligned} a_1 &= \alpha + 2\pi n_a & a_1 &= \alpha + \pi + 2\pi n_a \\ \beta_1 &= \beta + 2\pi n_\beta & \text{или} & \beta_1 = -\beta + 2\pi n_\beta \\ \gamma_1 &= \gamma + 2\pi n_\gamma & \gamma_1 &= \gamma - \pi + 2\pi n_\gamma \\ (n_a, n_\beta, n_\gamma) & \text{ произвольные целые числа}. \end{aligned} \quad (42)$$

С каждым вращением можно связать некоторую матрицу 3×3 , определяемую следующим образом. Фиксируем правую декартову систему координатных осей $Oxyz$ с единичными векторами a_1, a_2, a_3 в направлении осей Ox, Oy, Oz соответственно. При вращении они преобразуются в три новых вектора A_1, A_2, A_3 , образующих новую декартову систему $OXYZ$. Каждый из векторов A_i является линейной комбинацией векторов a_1, a_2, a_3 ¹⁾

$$A_i = \mathcal{R}[a_j] = a_i \mathcal{R}_{ij}, \quad \mathcal{R}_{ij} = (a_i \cdot A_j).$$

Коэффициенты \mathcal{R}_{ij} трех линейных комбинаций являются элементами матрицы 3×3 , которую мы обозначим той же буквой \mathcal{R} , что и само вращение. Эта матрица полностью определяет вращение. Действительно, пусть $V = a_j V_j$ — некоторый вектор в пространстве, определяемый его координатами (V_1, V_2, V_3) в системе $Oxyz$. При вращении он преобразуется в вектор

$$V' = \mathcal{R}[V] = A_i V_j = a_i \mathcal{R}_{ij} V_j.$$

Компоненты V' в системе координат $Oxyz$ равны

$$V'_j = \mathcal{R}_{ij} V_j. \quad (43)$$

Так как векторы A_i образуют декартову систему, то вещественная матрица \mathcal{R} ортогональна и унимодулярна

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}^*, \quad \tilde{\mathcal{R}} = \mathcal{R}^{-1}, \quad \det \mathcal{R} = 1.$$

Для фиксированной системы осей $Oxyz$ матрица, связанная с вращением, определена однозначно. Верно и обратное, каждой вещественной, ортогональной, унимодулярной матрице соответствует одно и только одно вращение.

В Дополнении В (формула (B.45)) дано выражение элементов матрицы, соответствующей вращению $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$, через углы Эйлера. В качестве примера приведем закон преобразования

¹⁾ В этом разделе мы будем систематически пользоваться соглашением о суммировании по повторяющимся индексам, так:

$$a_i \mathcal{R}_{ij} = a_1 \mathcal{R}_{1j} + a_2 \mathcal{R}_{2j} + a_3 \mathcal{R}_{3j}.$$

координат рассмотренного выше вектора \mathbf{V} при вращении $\mathcal{R}_z(\alpha)$ на угол α вокруг Oz

$$\begin{aligned} V'_1 &= V_1 \cos \alpha - V_2 \sin \alpha, \\ V'_2 &= V_1 \sin \alpha + V_2 \cos \alpha, \\ V'_3 &= V_3. \end{aligned} \quad (44)$$

Произведение двух вращений \mathcal{R}_1 и \mathcal{R}_2 , т. е. преобразование $\mathcal{R} \equiv \mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1$, которое получается последовательным выполнением вращений \mathcal{R}_1 , а затем \mathcal{R}_2 , также является вращением. Соотношение (41) дает пример такого произведения. Углы Эйлера для \mathcal{R} трудно выразить в виде функций от углов Эйлера \mathcal{R}_1 и \mathcal{R}_2 . В то же время, матрица, соответствующая \mathcal{R} , легко получается как произведение матриц \mathcal{R}_1 и \mathcal{R}_2

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1.$$

§ 11. Вращение физической системы. Оператор вращения

При обсуждении свойств физической системы, связанных с вращениями, — все сказанное ниже справедливо для любого преобразования пространства — можно принять одну из двух точек зрения, которые следует четко различать. Согласно первой (иногда ее называют пассивной) производят вращение координатных осей, оставляя фиксированной каждую точку P пространства и связанные с ней физические величины. Согласно второй (иногда ее называют активной) фиксированными остаются оси координат, а вращают физическую систему. Обе точки зрения эквивалентны. Поворот координатных осей или поворот физической системы в противоположном направлении приводят к одному и тому же результату. Далее, если не оговорено противное, мы будем придерживаться второй точки зрения (будем вращать физическую систему).

Определение «вращения физической системы» в квантовой механике требует большей осторожности, чем в классической, так как связь между динамическими переменными и динамическими состояниями значительно сложнее. Рассмотрим для простоты вначале случай одной частицы. Обозначим a — возможное динамическое состояние частицы и $\psi(\mathbf{r})$ — соответствующую волновую функцию. Состояние, получаемое после вращения \mathcal{R} , обозначим a' и соответствующую a' волновую функцию — $\psi'(\mathbf{r})$

$$a' \equiv \mathcal{R}[a], \quad \psi'(\mathbf{r}) \equiv \mathcal{R}[\psi(\mathbf{r})].$$

Когда мы говорим, что состояние a переходит при вращении \mathcal{R} в состояние a' , мы имеем в виду, что результаты любых наблюдений над системой в состоянии a' могут быть получены посредством вращения \mathcal{R} из результатов, которые дали бы те же

наблюдения, выполненные над системой в состоянии a . Рассмотрим, например, измерение координаты. Распределение вероятности для состояний a и a' равно $|\psi(\mathbf{r})|^2$ и $|\psi'(\mathbf{r})|^2$ соответственно. Согласно приведенному выше утверждению последнее получается из первого при вращении \mathcal{R} , т. е. значение второй функции в данной точке \mathbf{r} равно значению первой функции в точке \mathbf{r}_1 , которая переходит в \mathbf{r} при вращении \mathcal{R}

$$|\psi'(\mathbf{r})|^2 = |\psi(\mathbf{r}_1)|^2, \quad \mathbf{r}_1 = \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}. \quad (45)$$

Аналогично, если $\phi(\mathbf{p})$ и $\phi'(\mathbf{p})$ — волновые функции в импульсном пространстве, отвечающие ψ и ψ' , то имеем

$$|\phi'(\mathbf{p})|^2 = |\phi(\mathbf{p}_1)|^2, \quad \mathbf{p}_1 = \mathcal{R}^{-1}\mathbf{p}. \quad (46)$$

Ясно, что для того чтобы выполнялись все эти условия, достаточно равенства значений функции ψ' в точке \mathbf{r} и функции ψ в точке \mathbf{r}_1 , т. е.

$$\psi'(\mathbf{r}) \equiv \mathcal{R}[\psi(\mathbf{r})] = \psi(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}). \quad (47)$$

Можно показать, что это равенство является и необходимым условием¹⁾. Следовательно, волновая функция определена однозначно.

Соотношение (47) устанавливает взаимно однозначное соответствие между ψ и ψ' . Ясно, что это соответствие — линейное, т. е. существует оператор R такой, что

$$\psi' = R\psi.$$

Оператор R — унитарный, так как нормы ψ и ψ' равны,

$$\int |\psi'(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int |\psi(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int |\psi(\mathbf{r}_1)|^2 d\mathbf{r}_1$$

(последний интеграл получается заменой переменной $\mathbf{r}_1 = \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}$ с учетом того факта, что при вращении сохраняется элемент объема $d\mathbf{r}$).

Все эти рассуждения без труда обобщаются на систему N частиц; при вращении \mathcal{R} волновая функция $\psi(r^{(1)}, r^{(2)}, \dots, r^{(N)})$ переходит в

$$\begin{aligned} \mathcal{R}[\psi(r^{(1)}, \dots, r^{(N)})] &= \psi(\mathcal{R}^{-1}r^{(1)}, \dots, \mathcal{R}^{-1}r^{(N)}) = \\ &= R\psi(r^{(1)}, \dots, r^{(N)}). \end{aligned} \quad (48)$$

Как и выше, оператор вращения R — линейный и унитарный.

¹⁾ Общее доказательство будет дано в § XV.6. В действительности функция ψ' определяется этими условиями только с точностью до фазового множителя. Этот произвол исчезает, если потребовать, чтобы определенные далее операторы R образовывали группу, изоморфную группе вращений; именно так мы и поступаем.

В общем случае, с каждым вращением \mathcal{R} физической системы связан унитарный оператор R ; действие R на вектор $|a\rangle$, представляющий динамическое состояние системы до вращения, дает вектор $|a'\rangle$, представляющий ее динамическое состояние после вращения,

$$RR^\dagger = R^\dagger R = 1, \quad (49)$$

$$|a'\rangle = R|a\rangle. \quad (50)$$

Используя закон преобразования (50) и определение оператора плотности, легко получить закон его преобразования. Пусть ρ — оператор плотности, представляющий некоторое (чистое или смешанное) состояние системы, а ρ' — оператор плотности, представляющий состояние, получившееся в результате вращения \mathcal{R} . Тогда имеем

$$\rho' \equiv \mathcal{R}[\rho] = R\rho R^\dagger. \quad (51)$$

§ 12. Вращение наблюдаемых

Кроме вращения исследуемой системы, можно вращать также приборы, с помощью которых производятся наблюдения над ней. Выше мы определили закон преобразования векторов состояния, определим теперь закон преобразования наблюдаемых, представляющих различные измерительные операции, которые можно выполнить над системой.

Пусть Q — наблюдаемая, а $Q' = \mathcal{R}[Q]$ — ее преобразование при вращении \mathcal{R} .

По физическому смыслу с наблюдаемой Q связана некоторая операция измерения, и преобразование Q в Q' соответствует вращению измеряющего прибора. Следовательно, среднее значение при измерении Q для системы в состоянии $|a\rangle$ равно среднему значению при измерении Q' для системы в состоянии $|a'\rangle = \mathcal{R}[|a\rangle]$, т. е.

$$\langle a | Q | a \rangle = \langle a' | Q' | a' \rangle.$$

Так как $|a'\rangle = \mathcal{R}|a\rangle$, предыдущее равенство можно переписать в виде

$$\langle a | Q | a \rangle = \langle a | R^\dagger Q' R | a \rangle.$$

Из того, что оно справедливо для любого $|a\rangle$, имеем (ср. § VII. 5)

$$Q = R^\dagger Q' R,$$

или

$$Q' = R Q R^\dagger. \quad (52)$$

Другими словами, при вращении \mathcal{R} наблюдаемые преобразуются под действием того же унитарного оператора, что и векторы состояний.

В частности, если наблюдаемая S является скалярной величиной, т. е. инвариантна относительно вращений¹⁾, то для любого R

$$S' \equiv RSR^\dagger = S.$$

Поскольку оператор R — унитарный, это равенство можно переписать так:

$$[R, S] = 0. \quad (53)$$

Следовательно, инвариантная относительно вращений наблюдаемая коммутирует со всеми операторами вращений.

Другой интересный случай представляют векторные операторы. Будем использовать обозначения § 10 и дополнительно буквой K обозначим векторный оператор с компонентами $K_i = (Ka_i)$. Если действовать вращением \mathcal{R} на оператор K_1 — компоненту K по оси Ox , то получим оператор K'_1 — компоненту K по оси OX . В общем случае $\mathcal{R}[Ka] = Ka'$, где $a' = \mathcal{R}[a]$; итак

$$K'_1 \equiv \mathcal{R}[K_1] = KA_i = K_j \mathcal{R}_{ii}.$$

Получили закон преобразования декартовых компонент векторного оператора K

$$K'_i \equiv RK_i R^\dagger = \tilde{\mathcal{R}}_{ij} K_j. \quad (54)$$

Отметим, что в отличие от закона (43) здесь фигурирует матрица $\tilde{\mathcal{R}}$ — обратная матрице \mathcal{R} : компоненты K преобразуются при вращении \mathcal{R} так же, как компоненты вектора при вращении \mathcal{R}^{-1} .

§ 13. Момент импульса и инфинитезимальные вращения

Теперь мы можем установить фундаментальную связь между моментом импульса системы и операторами бесконечно малых (инфinitезимальных) вращений.

Как и в § 11, рассмотрим вначале случай одной частицы. Согласно (47) вращение $\mathcal{R}_z(\alpha)$ на угол α вокруг оси Oz переводит функцию $\psi(x, y, z)$ (см. ур. (44)) в

$$\mathcal{R}_z(\alpha)[\psi(x, y, z)] = \psi(x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z).$$

¹⁾ Такое определение скаляра будет использовано в настоящей главе. В дальнейшем величины, инвариантные относительно вращений, будут разделены на скаляры и псевдоскаляры. При отражениях первые не изменяются, а вторые умножаются на -1 .

В результате бесконечно малого вращения $\mathcal{R}_z(\epsilon)$, оставляя в правой части только члены первого порядка по ϵ тейлоровского разложения в точке (x, y, z) , получаем

$$\begin{aligned} R_z(\epsilon)[\psi(x, y, z)] &\approx \psi(x + y\epsilon, -xe + y, z) \\ &\approx \psi(x, y, z) + \epsilon \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \\ &\approx (1 - i\epsilon l_z) \psi(x, y, z). \end{aligned}$$

Последнее равенство следует из определения дифференциального оператора l_z ($\hbar = 1$). Следовательно, оператор инфинитезимального вращения имеет вид

$$R_z(\epsilon) \approx 1 - i\epsilon l_z.$$

Для инфинитезимального вращения вокруг вектора u , используя аналогичные рассуждения, имеем

$$R_u(\epsilon) \approx 1 - i\epsilon(l \cdot u).$$

Тот же результат получается для системы N частиц. Для этого достаточно, исходя из (48), проделать те же преобразования, что и в случае одной частицы (47)

$$R_z(\epsilon) \approx 1 - i\epsilon L_z,$$

или в более общем виде

$$R_u(\epsilon) \approx 1 - i\epsilon(L \cdot u),$$

где L — полный момент импульса системы.

Итак, справедливо утверждение.

Если J — полный момент импульса системы, то его компонента по произвольной оси u связана с оператором инфинитезимального вращения вокруг этой оси соотношением

$$R_u(\epsilon) \approx 1 - i\epsilon(J \cdot u). \quad (55)$$

В случае, когда система не имеет классического аналога, это фундаментальное соотношение служит определением момента импульса.

Для согласованности этого определения нужна уверенность в том, что оператор $(J \cdot u)$ является компонентой некоторого векторного оператора J по направлению u . Для этого достаточно¹⁾, чтобы каждому инфинитезимальному вращению $\mathcal{R}_u(\epsilon)$ соответствовал один и только один оператор инфинитезимального вращения $R_u(\epsilon)$. Согласно закону преобразования векторов (40)

¹⁾ Это равносильно предположению, что операторы вращений образуют группу.

операция $\mathcal{R}_u(\epsilon)$ эквивалентна, в первом порядке по ϵ , произведению операций $\mathcal{R}_x(\epsilon u_x) \mathcal{R}_y(\epsilon u_y) \mathcal{R}_z(\epsilon u_z)$, что дает

$$R_u(\epsilon) \approx R_x(\epsilon u_x) R_y(\epsilon u_y) R_z(\epsilon u_z) \approx 1 - i\epsilon(u_x J_x + u_y J_y + u_z J_z).$$

Из этого определения следует, что любой скалярный оператор S коммутирует с компонентами J (ур. (53))

$$[(u \cdot J), S] = 0. \quad (56)$$

Из соотношения (55) получаются также правила коммутации компонент J с компонентами произвольного векторного оператора K . Пусть $K_a \equiv K a$ — компонента K по направлению вектора a . По определению, ее преобразование при вращении $\mathcal{R}_u(\epsilon)$ равно

$$K'_a \equiv R_u(\epsilon) K_a R_u^\dagger(\epsilon) \approx K_a - i\epsilon [J_u, K_a].$$

Кроме того, согласно закону преобразования вектора a (ур. (40)), имеем

$$K'_a = K \cdot a' \approx K[a + \epsilon(u \times a)].$$

Приравнивая в этих выражениях члены первого порядка по ϵ , получаем

$$[J_u, K_a] = iK(u \times a),$$

или иначе

$$[(uJ), (aK)] = i((u \times a) \cdot K). \quad (57)$$

Подставляя вместо K оператор J , снова получаем коммутационные соотношения, характеризующие момент импульса (ур. (4)).

Следующее определение *полного* момента импульса эквивалентно данному ранее:

Если фундаментальными наблюдаемыми системы являются скалярные операторы S_1, S_2, \dots и компоненты векторных операторов K_1, K_2, \dots , то, по определению, *полный* момент импульса системы — это *векторный оператор* J , компоненты которого коммутируют со всеми S и удовлетворяют коммутационным соотношениям (57) с компонентами операторов K .

Если соотношения (57) выполняются не для всех векторных операторов K_1, K_2, \dots , то J не является полным моментом импульса системы, даже если выполняются коммутационные соотношения (4). Так, для рассмотренного в § 11 случая N частиц любой векторный оператор, являющийся суммой некоторого числа моментов $I^{(i)}$ отдельных частиц, будет удовлетворять соотношениям (4), но только сумма L всех $I^{(i)}$ равна полному моменту импульса.

§ 14. Построение оператора $R(\alpha\beta\gamma)$

Произвольное конечное вращение можно рассматривать как последовательность инфинитезимальных вращений. Соответствующий оператор будет произведением операторов инфинитезимальных вращений, и так как последние являются функциями полного момента (ур. (55)), то и оператор произвольного конечного вращения тоже будет функцией полного момента импульса.

Вращение $\mathcal{R}_u(\phi)$ является последовательностью инфинитезимальных вращений вокруг оси u . В частности,

$$\mathcal{R}_u(\phi + d\phi) = \mathcal{R}_u(d\phi) \mathcal{R}_u(\phi).$$

Полагая $J_u = (J \cdot u)$ и используя формулу (55), получаем

$$R_u(\phi + d\phi) = R_u(d\phi) R_u(\phi) = (1 - iJ_u d\phi) R_u(\phi),$$

или иначе

$$\frac{d}{d\phi} R_u(\phi) = -iJ_u R_u(\phi) \quad (R_u(0) = 1).$$

Это дифференциальное уравнение легко интегрируется и дает

$$R_u(\phi) = e^{-i\phi J_u}. \quad (58)$$

Рассмотрим теперь вращение $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$, определяемое углами Эйлера (α, β, γ) . Как показано в § 10, $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ можно рассматривать как последовательность вращений на углы α, β, γ вокруг осей Oz, Ou, Oz соответственно (см. рис. 1). Следовательно, имеем

$$R(\alpha\beta\gamma) = R_z(\gamma) R_u(\beta) R_z(\alpha).$$

Используя (58), три вращения в правой части можно выразить через компоненты J_z, J_u и J_z момента импульса

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_z} e^{-i\beta J_u} e^{-i\alpha J_z}. \quad (59)$$

Обратим внимание на порядок экспонент в правой части.

Преобразуем выражение (59) к виду, в котором фигурируют только компоненты момента импульса вдоль координатных осей. Вращение $\mathcal{R}_z(\alpha)$ переводит оператор J_y в оператор J_u , что в силу закона преобразования операторов (52) дает

$$J_u = R_z(\alpha) J_y R_z^\dagger(\alpha) = e^{-i\alpha J_z} J_y e^{+i\alpha J_z}.$$

Итак,

$$e^{-i\beta J_u} = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{+i\alpha J_z}.$$

Подставляя это выражение в правую часть (59), получаем

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_z} e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y}.$$

§ 14. Построение оператора $R(\alpha\beta\gamma)$

Произвольное конечное вращение можно рассматривать как последовательность инфинитезимальных вращений. Соответствующий оператор будет произведением операторов инфинитезимальных вращений, и так как последние являются функциями полного момента (ур. (55)), то и оператор произвольного конечного вращения тоже будет функцией полного момента импульса.

Вращение $\mathcal{R}_u(\phi)$ является последовательностью инфинитезимальных вращений вокруг оси u . В частности,

$$\mathcal{R}_u(\phi + d\phi) = \mathcal{R}_u(d\phi) \mathcal{R}_u(\phi).$$

Полагая $J_u = (J \cdot u)$ и используя формулу (55), получаем

$$R_u(\phi + d\phi) = R_u(d\phi) R_u(\phi) = (1 - iJ_u d\phi) R_u(\phi),$$

или иначе

$$\frac{d}{d\phi} R_u(\phi) = -iJ_u R_u(\phi) \quad (R_u(0) = 1).$$

Это дифференциальное уравнение легко интегрируется и дает

$$R_u(\phi) = e^{-i\phi J_u}. \quad (58)$$

Рассмотрим теперь вращение $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$, определяемое углами Эйлера (α, β, γ) . Как показано в § 10, $\mathcal{R}(\alpha\beta\gamma)$ можно рассматривать как последовательность вращений на углы α, β, γ вокруг осей Oz, Oy, Oz соответственно (см. рис. 1). Следовательно, имеем

$$R(\alpha\beta\gamma) = R_z(\gamma) R_y(\beta) R_z(\alpha).$$

Используя (58), три вращения в правой части можно выразить через компоненты J_z, J_y и J_z момента импульса

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\alpha J_z}. \quad (59)$$

Обратим внимание на порядок экспонент в правой части.

Преобразуем выражение (59) к виду, в котором фигурируют только компоненты момента импульса вдоль координатных осей. Вращение $\mathcal{R}_z(\alpha)$ переводит оператор J_y в оператор J_u , что в силу закона преобразования операторов (52) дает

$$J_u = R_z(\alpha) J_y R_z^\dagger(\alpha) = e^{-i\alpha J_z} J_y e^{+i\alpha J_z}.$$

Итак,

$$e^{-i\beta J_u} = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{+i\alpha J_z}.$$

Подставляя это выражение в правую часть (59), получаем

$$R(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\gamma J_z} e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y}.$$

Тем не менее можно показать (доказательство мы опускаем), что каждому конечному вращению соответствует самое большее два оператора R' и R'' , отличающиеся «вращением на 2π »,

$$R'' = DR'. \quad (62)$$

В рассматриваемых до сих пор физических системах момент импульса мог принимать только целочисленные значения, в этом случае $D = 1$ и $R' = R''$, так что каждому вращению \mathcal{R} соответствует один и только один оператор вращения. Если же система имеет состояния с полуцелым угловым моментом, то операторы R' и R'' не совпадают.

Обсудим факт существования двух различных операторов, описывающих одно и то же вращение. То, что вращение на 2π кет-вектора не дает в результате тот же вектор, не ведет к принципиальным трудностям, если только это не приводит к наблюдаемому эффекту. Ясно, что результаты эксперимента не изменятся, если заранее повернуть некоторые из приборов наблюдения на угол 2π ; два тождественных прибора, занимая одно и то же положение, дадут один и тот же результат. Следовательно, если наблюдаемая Q представляет измеримую величину, то она должна быть инвариантна при вращении на 2π ; говоря более общим образом, если выполняется вращение \mathcal{R} над Q , то полученная в результате наблюдаемая не должна зависеть от конкретного выбора способа вращения

$$R'QR'^+ = R''QR''^+.$$

Инвариантность относительно «вращения на 2π » гарантирует выполнение этого более общего свойства. Формально ее можно записать как

$$[D, Q] = 0. \quad (63)$$

По определению, наблюдаемая является эрмитовым оператором, имеющим полный набор собственных векторов. Каждый оператор, представляющий физическую величину, должен быть наблюдаемой — необходимое условие самосогласованности квантовой механики. Однако совсем не обязательно, чтобы было верно обратное. Будем называть *физическими наблюдаемыми* наблюдаемую, связанную с физически измеряемой величиной. Предшествующий анализ показал, что любая физическая наблюдаемая должна удовлетворять¹⁾ соотношению (63). При

¹⁾ Все наблюдаемые физических систем, которые рассматриваются в этой книге, удовлетворяют соотношению (63). Таким образом, между наблюдаемыми и физическими наблюдаемыми имеется лишь чисто академическое различие. Однако можно представить себе физические системы, для которых не все наблюдаемые удовлетворяют соотношению (63); пример такой системы имеется в задаче 15.

изучении физической системы обычно неявно предполагают, что все наблюдаемые системы являются физическими наблюдаемыми; хотя такое предположение часто упрощает обсуждение, оно несущественно и может быть заменено на более ограничительное, без серьезных модификаций в интерпретации теории. Соотношение (63) представляет одно из таких ограничений; с другими мы встретимся при обсуждении тождественных частиц¹⁾.

Таким образом, существование полуцелых моментов импульса не противоречит никаким принципам квантовой механики. Действительно, полуцелые моменты существуют в природе.

§ 16. Неприводимые инвариантные подпространства. Матрицы вращений $R^{(J)}$

Как установлено в конце § 5, выражение (60) показывает, что любой оператор вращения есть функция компонент полного момента импульса. Следовательно, векторы пространства $\mathcal{E}^{(J)}$, построенного в § 5, преобразуются при вращении в векторы $\mathcal{E}^{(J)}$, т. е. пространство $\mathcal{E}^{(J)}$ инвариантно относительно вращений²⁾.

Точнее, если $|u\rangle$ — произвольно выбранный вектор этого пространства, то множество векторов $R|u\rangle$, получаемых из $|u\rangle$ вращением, натягивают все пространство $\mathcal{E}^{(J)}$. Пространство, обладающее этим свойством, называется *неприводимым по отношению к вращениям*. Если же, напротив, в $\mathcal{E}^{(J)}$ существовал бы по крайней мере один вектор $|v\rangle$ такой, что множество векторов $R|v\rangle$ натягивало $\mathcal{E}^{(J)}$ лишь частично, то $\mathcal{E}^{(J)}$ было бы приводимым по отношению к вращениям.

Неприводимость $\mathcal{E}^{(J)}$ можно показать следующим образом. Обозначим пространство, натянутое на векторы $R|u\rangle$, через $\mathcal{E}_1^{(J)}$. Тогда $J_+|u\rangle$ принадлежит $\mathcal{E}_1^{(J)}$, так как

$$J_+|u\rangle \equiv (J_x + iJ_y)|u\rangle = \frac{1}{\epsilon}(1 - i + iR_x(\epsilon) - R_y(\epsilon))|u\rangle.$$

То же верно для $J_-|u\rangle$. Более того, любой вектор, полученный применением J_+ или J_- к векторам $\mathcal{E}_1^{(J)}$, принадлежит $\mathcal{E}_1^{(J)}$. Рассмотрим разложение $|u\rangle = \sum_M |JM\rangle \langle JM|u\rangle$ и обозначим m наименьшее значение M , для которого $\langle JM|u\rangle \neq 0$. Следуя методам § 5, получаем, что $J_+^{J-m}|u\rangle$ — ненулевой вектор, пропорци-

¹⁾ Общее обсуждение соотношений типа (63) и их следствий — правил супертбора — приведено в статье G. Wick, A. Wightman, E. Wigner. Phys. Rev. 88, 101 (1952). (При наличии русского перевода дается ссылка только на этот перевод. *Прим. перев.*)

²⁾ Далее будем использовать заглавные буквы J , M для обозначения квантовых чисел полного момента импульса.

нальный $|JJ\rangle$; отсюда $|JJ\rangle$ принадлежит $\mathcal{E}_1^{(J)}$ и поскольку последовательным применением J_- к $|JJ\rangle$, мы получаем все состояния $|JM\rangle$, они также принадлежат $\mathcal{E}_1^{(J)}$. Следовательно, $\mathcal{E}_1^{(J)}$ содержит полный набор базисных векторов $\mathcal{E}^{(J)}$, и, значит, эти два пространства совпадают. ■ *).

Как указано в § 6, пространство кет-векторов физической системы является прямой суммой некоторого числа $(2J + 1)$ -мерных подпространств $\mathcal{E}(\tau J)$. Напомним, что τ представляет собой набор квантовых чисел, которые позволяют различать полные наборы квантовых чисел, соответствующие одному собственному значению J^2 . Каждое из подпространств $\mathcal{E}(\tau J)$ является *неприводимым и инвариантным по отношению к вращениям*. В стандартном представлении $\{J^2 J_z\}$ компоненты J в каждом из этих подпространств задаются простыми матрицами, не зависящими от τ . Аналогично любой оператор вращения $R(\alpha\beta\gamma)$ выражается в каждом $\mathcal{E}(\tau J)$ некоторой $(2J + 1)$ -мерной матрицей $R^{(J)}(\alpha\beta\gamma)$, зависящей от J , но не зависящей от квантовых чисел τ . По определению:

$$R_{MM'}^{(J)}(\alpha\beta\gamma) \equiv \langle \tau JM | R(\alpha\beta\gamma) | \tau JM' \rangle \equiv \langle JM | e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_x} | JM' \rangle. \quad (64)$$

Эти матрицы образуют особенно удобное представление операторов $R(\alpha\beta\gamma)$ и используются всякий раз, когда необходимо изменить ориентацию векторов состояния или наблюдаемых. Их называют *матрицами вращений*. Основные свойства этих матриц и явный вид некоторых матриц приведены в Дополнении B (раздел IV).

Непосредственно из определения матриц вращения следует, что $(2j + 1)$ базисных векторов подпространства $\mathcal{E}(\tau J)$ преобразуются при вращении $R(\alpha\beta\gamma)$ по закону

$$R(\alpha\beta\gamma) | \tau JM \rangle = \sum_{M'} | \tau JM' \rangle R_{M'M}^{(J)}(\alpha\beta\gamma). \quad (65)$$

Легко показать и обратное, а именно: если $(2J + 1)$ векторов $|u_M\rangle$ ($M = -J, -J + 1, \dots, +J$) преобразуются при вращении согласно закону

$$R(\alpha\beta\gamma) | u_M \rangle = \sum_{M'} | u_{M'} \rangle R_{M'M}^{(J)}(\alpha\beta\gamma); \quad (66)$$

то они удовлетворяют уравнениям на собственные значения

$$J^2 | u_M \rangle = J(J + 1) | u_M \rangle, \quad J_z | u_M \rangle = M | u_M \rangle$$

и получаются один из другого действием операторов J_+ и J_- в соответствии с соотношениями (24) — (25).

*) Знаком ■ отмечается конец доказательства. (Прим. ред.)

§ 17. Инвариантность относительно вращений и сохранение момента импульса

Инвариантность некоторой величины относительно вращений всегда может быть выражена как ее специальное свойство по отношению к моменту импульса. Действительно, любое вращение можно рассматривать как произведение бесконечно малых вращений, а инвариантность данной величины относительно последних означает ее инвариантность и относительно всех вращений. В силу соотношений (55) момент импульса фигурирует в условии инвариантности относительно бесконечно малых вращений.

Итак, для инвариантности волновой функции или кет-вектора $|\rangle$ относительно вращений необходимо и достаточно, чтобы применение к ним любой компоненты полного момента импульса давало нуль

$$\mathbf{J} |\rangle = 0.$$

Фактически достаточно, чтобы выполнялось равенство

$$\mathbf{J}^2 |\rangle = 0. \quad (67)$$

Этим свойством обладают, например, волновые функции частицы в s -состоянии, которые зависят только от переменной \mathbf{r} . Другой пример — волновые функции нескольких частиц, зависящие только от расстояний между частицами и от углов между радиусами-векторами частиц¹⁾.

Для того чтобы наблюдаемая S была инвариантна относительно вращений (условие (53)), необходимо и достаточно, чтобы она коммутировала с компонентами момента импульса

$$[\mathbf{J}, S] = 0. \quad (68)$$

Инвариантность гамильтониана относительно вращений заслуживает особого рассмотрения. Если для любого R

$$[R, H] = 0, \quad (69)$$

то *уравнения движения инвариантны относительно вращений*: два вектора состояний, из которых данное вращение преобразует один в другой в момент времени t_0 , будут связаны тем же соотношением во все остальные моменты. Это очевидно, поскольку, если $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера, то для любого R имеем

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) R |\psi(t)\rangle = R \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) |\psi(t)\rangle = 0$$

¹⁾ Это свойство можно сравнить с равенством $(l + l')P_l(\cos \alpha) = 0$, возникающим при доказательстве теоремы сложения (задача 5).

и, следовательно, $R|\psi(t)\rangle$ также является решением уравнения Шредингера.

Аналогично, если $| \rangle$ — собственный вектор H , то все векторы вида $R| \rangle$, которые могут быть получены вращением данного, также являются собственными векторами H , отвечающими тому же собственному значению. Другими словами, подпространство каждого собственного значения H инвариантно относительно вращений.

Все следствия инвариантности уравнений движения относительно вращений можно получить из соотношений

$$[J, H] = 0, \quad (70)$$

выражающих инвариантность H по отношению к бесконечно малым вращениям.

При выполнении этих соотношений, операторы J^2 , J_z и H попарно коммутируют, и решение задачи на собственные значения значительно упрощается: достаточно найти собственные функции H среди общих собственных функций J^2 и J_z . Более того, энергетические спектры, отвечающие данному значению J — одни и те же, собственные функции, отвечающие $(2J + 1)$ возможным значениям M , получаются одна из другой последовательным применением J_+ или J_- . Другими словами, собственные значения энергии не зависят от M ; каждому собственному значению E_J , соответствующему данному значению J , отвечает одна или несколько серий $(2J + 1)$ собственных векторов; вектора данной серии получаются друг из друга последовательным применением J_+ или J_- и натягивают неприводимое и инвариантное по отношению к вращениям подпространство. Такой тип вырождения спектра энергии называется *ротационным вырождением*.

Случай частицы в центральном поле (гл. IX) служит хорошей иллюстрацией приведенного обсуждения. Гамильтониан частицы в центральном поле, очевидно, должен быть инвариантен относительно вращений; непосредственно проверяется, что он коммутирует с тремя компонентами момента импульса \mathbf{l} . Метод, использованный в главе IX, и состоит в нахождении собственных функций H среди общих собственных функций \mathbf{l}^2 и l_z , отвечающих собственным значениям $l(l+1)$ и m соответственно, т. е. среди функций вида

$$\chi_l(r) Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Задача сводится к решению обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка по r . Более того, поскольку m не фигурирует в уравнении, то по каждой радиальной функции мы можем построить $(2l + 1)$ собственных функций H , отвечающих одному и тому же собственному значению.

Как отмечалось ранее, мы имеем здесь удивительную аналогию между классической и квантовой механикой. Инвариантность уравнений движения классической системы относительно вращений координатных осей приводит к сохранению полного момента импульса системы. Это свойство позволяет получить первые интегралы движения и значительно упростить решение уравнений. Точно так же инвариантность относительно вращений уравнений движения в квантовой механике ведет к сохранению полного момента; однако из-за некоммутативности компонент момента импульса законы сохранения в этом случае выражаются не столь просто.

Раздел IV. СПИН

§ 18. Гипотеза спина электрона

Теория Шредингера, вытекающая из простого применения принципа соответствия, не может объяснить свойств сложных атомов, даже оставляя в стороне релятивистские поправки. Необходимы две важные модификации, причем ни одна из них не имеет каких-либо аналогий в классической механике, которые позволили бы предсказать их существование. Одна из этих модификаций заключается в выборе только тех решений уравнения Шредингера, которые обладают определенными свойствами симметрии относительно перестановки координат электронов. Это требование известно как принцип Паули и будет рассматриваться в главе XIV; при нижеследующем изложении оно может быть опущено. Другая модификация — гипотеза спина электрона.

Основное экспериментальное подтверждение этой гипотезы следует из анализа поведения сложных атомов в магнитном поле (эффект Зеемана, эксперимент Штерна — Герлаха).

Уравнение Шредингера для атома с Z бесспиновыми электронами уже было приведено выше (ур. (II. 30)). Если считать ядро бесконечно тяжелым, а его положение совпадающим с центром масс, то гамильтониан в системе центра масс имеет простой вид

$$H_0 = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}. \quad (71)$$

Для того чтобы получить гамильтониан того же атома, помещенного в статическое магнитное поле, которое описывается потенциалом $A(\mathbf{r})$, достаточно заменить в выражении (71) каждое p_i на $p_i - eA(\mathbf{r}_i)/c$. В частности, для постоянного магнитного