Такой формулой мы уже пользовались при качественном рассмотрении вращательной теплоемкости молекул (см. т. II, § 69).

Впрочем, необходимо заметить, что идеализированное представление о ротаторе, как и представление об идеально твердом теле, несовместимо с принципом неопределенностей Гейзенберга. В самом деле, в модели идеально твердого тела его размеры в любом направлении (например, в направлении оси X) строго определены и не могут меняться во времени, т. е. неопределенность координаты $\Delta x = 0$. Но тогда для импульса в том же направлении из соотношения неопределенностей следует, что $\Delta p_x = \infty$. В теле неизбежно возникнут колебания, меняющие величину момента инерции I. Например, вращающуюся молекулу можно для некоторых целей рассматривать как жесткий ротатор и пользоваться формулой (31.19), если изменения I, связанные с вращением, невелики.

§ 32. Сложение угловых моментов

1. Понятие углового момента можно распространить и на системы частиц. Ради простоты будем предполагать, что система состоит только из двух частиц: 1 и 2. Координаты (радиус-вектор) первой частицы обозначим через $\boldsymbol{r}_1$, второй — через $\boldsymbol{r}_2$. Оператором углового момента $\hat{\boldsymbol{l}}$ системы называют сумму операторов угловых моментов ее частей $\hat{\boldsymbol{l}}_1$ и $\hat{\boldsymbol{l}}_2$:

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \hat{\boldsymbol{l}}_1 + \hat{\boldsymbol{l}}_2. \tag{32.1}$$

Так же определяется и оператор проекции углового момента системы на избранное направление. Например,

$$\hat{l}_z = \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z}. \tag{32.2}$$

Будем предполагать, что частицы не взаимодействуют между собой. Тогда волновая функция первой частицы $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ будет одна и та же независимо от того, есть вторая частица или нет. Эту функцию можно умножить на произвольную постоянную, которая может зависеть от $\boldsymbol{r}_2$ как от параметра. В частности, за нее можно принять волновую функцию $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ второй частицы. Тогда волновая функция первой частицы представится произведением $\Psi = \Psi_1(\boldsymbol{r}_1)\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$. Но очевидно из тех же соображений, что в таком же виде представится и волновая функция второй частицы. Поэтому $\Psi = \Psi_1\Psi_2$ можно рассматривать как волновую функцию системы невзаимодействующих частиц 1 и 2. При этом для нее будет сохранена нормировка

$$\int |\Psi|^2 dV_1\, dV_2 = \int |\Psi_1|^2 dV_1 \int |\Psi_2|^2 dV_2 = 1. \tag{32.3}$$

2. Если ограничиться действием операторов только на функцию $\Psi = \Psi_1\Psi_2$, то из доказанного следует, что операторы $\hat{\boldsymbol{l}}_1$ и $\hat{\boldsymbol{l}}_2$

перестановочны. В самом деле, поскольку оператор $\hat{\boldsymbol{l}}_1$ действует только на функцию Ψ_1 и не действует на функцию Ψ_2, а оператор $\hat{\boldsymbol{l}}_2$, наоборот, действует только на Ψ_2 и не действует на Ψ_1, можно написать

$$\hat{\boldsymbol{l}}_1\hat{\boldsymbol{l}}_2\Psi = \hat{\boldsymbol{l}}_1\hat{\boldsymbol{l}}_2(\Psi_1\Psi_2) = \hat{\boldsymbol{l}}_1(\Psi_1\hat{\boldsymbol{l}}_2\Psi_2) = (\hat{\boldsymbol{l}}_2\Psi_2)(\hat{\boldsymbol{l}}_1\Psi_1) = (\hat{\boldsymbol{l}}_1\Psi_1)(\hat{\boldsymbol{l}}_2\Psi_2).$$

К тому же результату приводит и действие оператора $\hat{\boldsymbol{l}}_2\hat{\boldsymbol{l}}_1$. Значит, для функций вида $\Psi = \Psi_1\Psi_2$ справедливо операторное равенство $\hat{\boldsymbol{l}}_1\hat{\boldsymbol{l}}_2 = \hat{\boldsymbol{l}}_2\hat{\boldsymbol{l}}_1$, что и доказывает наше утверждение. Таким же путем докажем для функций того же вида и перестановочность операторов проекций углового момента в случае системы независимых частиц, например $\hat{l}_{1x}$ и $\hat{l}_{2x}$. Из доказанного следует, что правила коммутации (31.6) и все следствия из них для отдельной частицы распространяются без всяких изменений и на системы независимых частиц.

Ввиду коммутации операторов $\hat{\boldsymbol{l}}_1$ и $\hat{\boldsymbol{l}}_2$ оператор квадрата углового момента $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ будет равен

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2 = (\hat{\boldsymbol{l}}_1 + \hat{\boldsymbol{l}}_2)^2 = \hat{\boldsymbol{l}}_1^2 + 2(\hat{\boldsymbol{l}}_1\hat{\boldsymbol{l}}_2) + \hat{\boldsymbol{l}}_2^2. \tag{32.4}$$

Теперь выясним, как коммутирует оператор квадрата углового момента $\hat{\boldsymbol{l}}^2 = \hat{\boldsymbol{l}}_x^2 + \hat{\boldsymbol{l}}_y^2 + \hat{\boldsymbol{l}}_z^2$ с оператором одной из проекций его, например $\hat{l}_x = \hat{l}_{1x} + \hat{l}_{2x}$. Очевидно, операторы $\hat{l}_{1x}$ и $\hat{l}_{2x}$ коммутируют с $\hat{\boldsymbol{l}}_1^2$ и с $\hat{\boldsymbol{l}}_2^2$. Остается только проверить коммутативность операторов $\hat{\boldsymbol{l}}_1\hat{\boldsymbol{l}}_2$ и $\hat{l}_x$. Имеем

$$(\hat{\boldsymbol{l}}_1\hat{\boldsymbol{l}}_2)\hat{l}_x = (\hat{l}_{1x}\hat{l}_{2x} + \hat{l}_{1y}\hat{l}_{2y} + \hat{l}_{1z}\hat{l}_{2z})(\hat{l}_{1x} + \hat{l}_{2x}) =$$
$$= (\hat{l}_{1x}\hat{l}_{2x} + \hat{l}_{1y}\hat{l}_{2y} + \hat{l}_{1z}\hat{l}_{2z})\hat{l}_{1x} + (\hat{l}_{1x}\hat{l}_{2x} + \hat{l}_{1y}\hat{l}_{2y} + \hat{l}_{1z}\hat{l}_{2z})\hat{l}_{2x}.$$

Аналогично

$$\hat{l}_x(\hat{\boldsymbol{l}}_1\hat{\boldsymbol{l}}_2) = \hat{l}_{1x}(\hat{l}_{1x}\hat{l}_{2x} + \hat{l}_{1y}\hat{l}_{2y} + \hat{l}_{1z}\hat{l}_{2z}) + \hat{l}_{2x}(\hat{l}_{1x}\hat{l}_{2x} + \hat{l}_{1y}\hat{l}_{2y} + \hat{l}_{1z}\hat{l}_{2z}).$$

Если воспользоваться правилами коммутации (31.6) и тем обстоятельством, что операторы $\hat{\boldsymbol{l}}_1$ и $\hat{\boldsymbol{l}}_2$ действуют на волновые функции разных частиц, то последнее выражение легко привести к предыдущему. Итак, оператор $\hat{\boldsymbol{l}}^2 = (\hat{\boldsymbol{l}}_1 + \hat{\boldsymbol{l}}_2)^2$ коммутирует с операторами проекций $\boldsymbol{l}$ на любое направление. Поэтому существует состояние системы, в котором l^2 и одна из проекций на любое направление имеют определенные значения.

3. Состояние первой частицы можно характеризовать значениями l_1 и m_1, второй — значениями l_2 и m_2. Число l_1 определяет квадрат углового момента первой частицы $l_1(l_1+1)$, число l_2 — квадрат такого же момента второй частицы $l_2(l_2+1)$. Числа m_1 и m_2 определяют проекции на ось Z угловых моментов $\boldsymbol{l}_1$ и $\boldsymbol{l}_2$ (в единицах $\hbar$). Очевидно, совокупность чисел l_1, l_2, m_1, m_2

характеризует некоторое состояние системы обеих независимых частиц. Волновую функцию такого состояния будем обозначать через $\varphi_{l_1 l_2 m_1 m_2}$. Определим число состояний такого типа, т. е. число линейно независимых функций φ при заданных значениях l_1 и l_2. При заданном l_1 число m_1 может принимать $(2l_1+1)$ значений (см. § 31, пункт 7), при заданном l_2 число значений m_2 равно $(2l_2+1)$. Таким образом, при заданных l_1 и l_2 искомое число состояний с волновыми функциями типа φ равно $(2l_1+1)(2l_2+1)$. Из таких $(2l_1+1)(2l_2+1)$ состояний путем их линейных комбинаций можно составить любое состояние системы с заданными l_1 и l_2.

Но линейно независимые состояния, из которых может быть составлено любое состояние системы с заданными l_1 и l_2, можно выбрать и иначе. Должно оставаться постоянным лишь общее число таких линейно независимых состояний, т. е. это число по-прежнему должно быть равно $(2l_1+1)(2l_2+1)$. Ввиду справедливости для всей системы правил коммутации (31.6) существуют при заданных l_1 и l_2 состояния всей системы с определенными значениями квадрата $l(l+1)$ полного углового момента $\boldsymbol{l}$ и его проекции m на ось Z. Волновые функции таких состояний будем обозначать через $\psi_{l_1 l_2 l m}$. Из них путем линейных комбинаций можно составить волновую функцию любого состояния с заданными l_1 и l_2. Поэтому число линейно независимых функций типа $\psi_{l_1 l_2 l m}$ с заданными l_1 и l_2 должно быть равно $(2l_1+1)(2l_2+1)$.

Убедимся в этом путем прямого вычисления. Из формулы (32.2) непосредственно следует, что если проекции m_1 и m_2 имеют определенные значения, то и проекция m также имеет определенное значение m, причем $m = m_1 + m_2$. Ради определенности будем предполагать, что $l_1 > l_2$. Тогда при заданных l_1 и l_2 возможные положительные значения m, получаемые таким путем, представятся следующей таблицей:

m_1	m_2	m
l_1	l_2	l_1+l_2
l_1 l_1-1	l_2-1 l_2	l_1+l_2-1
l_1 l_1-1 l_1-2	l_2-2 l_2-1 l_2	l_1+l_2-2
. . . .	. . . . .	. . . . .
l_1	$-l_2$	l_1-l_2

Отберем теперь всевозможные состояния (при заданных l_1 и l_2), для которых максимальные значения проекции m соответ-

ственно равны (l_1+l_2), (l_1+l_2-1), ... Это будут состояния с определенным значением l, равным

$$l=(l_1+l_2),\quad l_1+(l_2-1),\quad \ldots,\quad l_1-l_2.$$

Число таких состояний равно $2l_2+1$. В каждом из этих состояний m может принимать $(2l+1)$ значений. Таким образом, число всевозможных состояний (при заданных l_1 и l_2) с линейно независимыми функциями типа $\psi_{l_1l_2lm}$ будет

$$2(l_1+l_2)+1+2(l_1+l_2-1)+1+\ldots+2(l_1-l_2)+1.$$

Это — арифметическая прогрессия с разностью -2 и общим числом членов $2l_2+1$. Ее сумма равна

$$\frac{2(l_1+l_2)+1+2(l_1-l_2)+1}{2}(2l_2+1)=(2l_1+1)(2l_2+1),$$

что и требовалось доказать.

4. Полученные результаты относятся не только к сложению угловых моментов двух невзаимодействующих частиц. Они распространяются без всяких изменений и на произвольные сложные системы, состоящие из двух невзаимодействующих частей 1 и 2. Квадраты их угловых моментов (если они имеют определенные значения) определяются выражениями $L_1(L_1+1)$ и $L_2(L_2+1)$, где L_1 и L_2 — целые положительные числа. Соответствующие проекции на ось Z (если таковые также имеют определенные значения) могут принимать значения:

$$M_1=-L_1,\quad -(L_1-1),\quad \ldots,\quad +(L_1-1),\quad +L_1,$$
$$M_2=-L_2,\quad -(L_2-1),\quad \ldots,\quad +(L_2-1),\quad +L_2.$$

Тогда квадрат результирующего углового момента всей системы может принимать значения $L(L+1)$, где L меняется в пределах

$$L=L_1+L_2,\quad L_1+L_2-1,\quad \ldots,\quad L_1-L_2, \tag{32.5}$$

причем предполагается, что $L_1>L_2$. Соответствующие проекции на ось Z могут принимать целочисленные значения от $M=-L$ до $M=+L$. Полученный результат называется *правилом сложения угловых моментов*.

В полученном состоянии сложной системы имеют определенные значения также скалярные произведения $\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}_2$, $\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}_1$ и $\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}_2$, т. е. собственные значения соответствующих операторов $\hat{\boldsymbol{L}}_1\hat{\boldsymbol{L}}_2$, $\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{L}}_1$ и $\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{L}}_2$. Это следует из формулы (32.4), если написать ее для операторов $\hat{\boldsymbol{L}}$, $\hat{\boldsymbol{L}}_1$, $\hat{\boldsymbol{L}}_2$. Например,

$$\hat{\boldsymbol{L}}_1\hat{\boldsymbol{L}}_2={}^1/_2\left[\hat{\boldsymbol{L}}^2-\hat{\boldsymbol{L}}_1^2-\hat{\boldsymbol{L}}_2^2\right], \tag{32.6}$$

или, переходя к собственным значениям,

$$\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}_2={}^1/_2\left[L(L+1)-L_1(L_1+1)-L_2(L_2+1)\right]. \tag{32.7}$$

Аналогично

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}_1 = {}^1/_2\,[L(L+1) + L_1(L_1+1) - L_2(L_2+1)], \qquad (32.8)$$

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}_2 = {}^1/_2\,[L(L+1) + L_2(L_2+1) - L_1(L_1+1)]. \qquad (32.9)$$

5. Изложенные результаты принято представлять на векторных диаграммах. Складываемые векторы $\boldsymbol{L}_1$ и $\boldsymbol{L}_2$ изображаются стрелками с длинами $\sqrt{L_1(L_1+1)}$ и $\sqrt{L_2(L_2+1)}$, а результирующий вектор $\boldsymbol{L}$ — стрелкой с длиной $\sqrt{L(L+1)}$. В качестве примера на рис. 59 приведена векторная диаграмма для $L_1 = 2$ и $L_2 = 1$ при различных углах между векторами $\boldsymbol{L}_1$ и $\boldsymbol{L}_2$. Получается всего три возможных случая, в соответствии с тем, что L может принимать значения $L_1 + L_2 = 3$, $L_1 + L_2 - 1 = 2$ и $L_1 + L_2 - 2 = 1$. Такая диаграмма правильно передает длины всех векторов и их скалярные произведения. Но она не отражает истинную квантовую природу угловых моментов, поскольку последние, имея определенные длины, не имеют определенных направлений в пространстве.

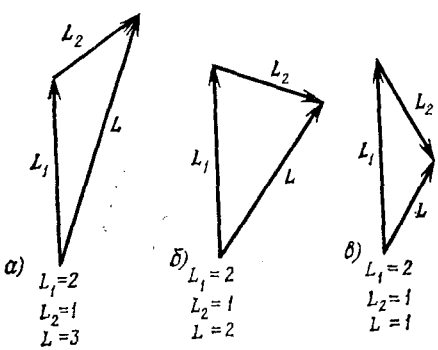

Рис. 59

Если системы 1 и 2 не взаимодействуют и нет внешних сил, то сохраняется не только результирующий угловой момент системы $\boldsymbol{L}$, но и оба момента $\boldsymbol{L}_1$ и $\boldsymbol{L}_2$. При наличии взаимодействия между системами 1 и 2 моменты $\boldsymbol{L}_1$ и $\boldsymbol{L}_2$ в отдельности не сохраняются, а сохраняется только общий момент $\boldsymbol{L}$ (при отсутствии внешних сил). Если взаимодействие слабое, то по аналогии с классической механикой следует ожидать, что длины векторов $\boldsymbol{L}_1$ и $\boldsymbol{L}_2$ при этом практически не будут изменяться. На векторной диаграмме векторы $\boldsymbol{L}_1$ и $\boldsymbol{L}_2$ будут совершать прецессию, т. е. вращаться вокруг вектора $\boldsymbol{L}$ с одной и той же угловой скоростью. К такому же выводу приводит и последовательное квантовое рассмотрение.

§ 33. Квантование водородного атома в общем случае

1. В § 27 была рассмотрена задача о квантовании водородного (или водородоподобного) атома в предположении, что волновая функция ψ радиально симметрична, т. е. зависит только от r. В таком случае угловой момент электрона в атоме равен нулю, так как оператор момента действует только на угловые