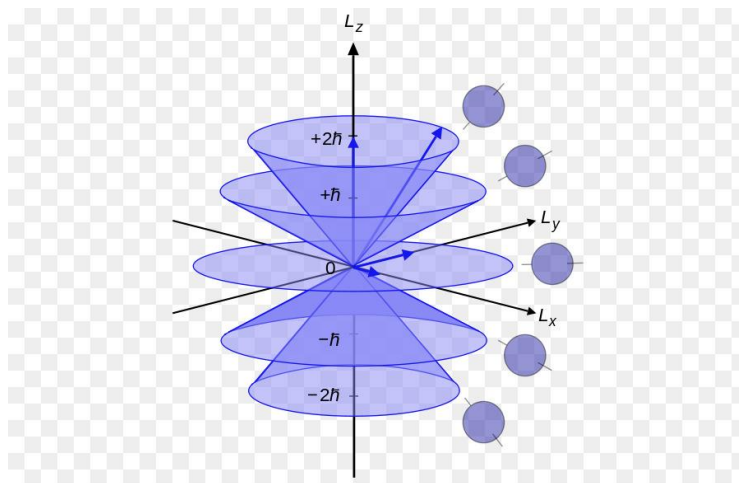


Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт»
Петербургский институт ядерной физики
им.Б.П.Константинова

И. А. Митропольский

АППАРАТ УГЛОВОГО МОМЕНТА
В ТЕОРИИ АТОМНОГО ЯДРА

Учебное пособие для аспирантов



Гатчина
2019

УДК 539.1.01
ББК 22.314

Митропольский Иван Андреевич - доктор физико-математических наук.

*Печатается по решению Учёного совета Института
(протокол от 28.11.2019 №8).*

Митропольский И.А. Аппарат углового момента в теории атомного ядра. – Гатчина Ленинградской обл.: Изд-во НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, 2019 – 48 с.

Учебное пособие «Аппарат углового момента в теории атомного ядра» рассчитано на аспирантов, осваивающих образовательную программу высшего образования по направлению 03.06.01 «Физика и астрономия» направленности 01.04.16 «Физика атомного ядра и элементарных частиц» в аспирантуре НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ. Оно также может быть полезно аспирантам, обучающимся по иным направленностям подготовки по данному направлению.

Содержание пособия углубляет и расширяет знания, полученные аспирантами на предыдущих уровнях обучения, в части применения современного аппарата углового момента в ядерной физике, в особенности в теории ядра и ядерных реакций.

Учебное пособие отражает материал лекций по курсу «Дополнительные главы квантовой механики в теории атомного ядра», читаемых автором на Физическом факультете СПбГУ. Оно представляет собой сводку основных формул с краткими комментариями, практические рекомендации по их использованию, иллюстративный материал в форме таблиц и рисунков, содержит задачи и упражнения, позволяющие закрепить содержание отдельных теоретических положений по изучаемым темам.

В принципе, этого пособия должно быть достаточно для практической работы молодого специалиста в избранной области. Дополнительный материал содержится в рекомендованной литературе.

© НИЦ «Курчатовский институт – ПИЯФ, 2019

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
СИСТЕМЫ КООРДИНАТ. КОМПОНЕНТЫ ВЕКТОРОВ	5
Декартовы, сферические, циклические координаты.	
Разложение векторов. Скалярное и векторное произведения.	
Векторные дифференциальные операции.	
УГЛОВЫЕ МОМЕНТЫ	11
Оператор полного углового момента. Операторы орбитального и спинового моментов. Поляризационные операторы.	
СФЕРИЧЕСКИЕ И СПИНОВЫЕ ФУНКЦИИ	15
Собственные функции операторов углового момента.	
Разложение по сферическим функциям, мультипольные моменты. Спиновые функции и матричные элементы.	
СЛОЖЕНИЕ ДВУХ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ.	
КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША – ГОРДАНА	19
Коэффициенты Клебша – Гордана, $3jm$ -символы Вигнера.	
Свойства симметрии и явный вид. Суммы произведений коэффициентов Клебша – Гордана.	
ОБОБЩЁННЫЕ СФЕРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ИЛИ D -ФУНКЦИИ ВИГНЕРА	27
Поворот системы координат, углы Эйлера. Свойства D -функций Вигнера. Формула сложения D -функций, рекуррентные соотношения. Интегралы с D -функциями.	
СЛОЖЕНИЕ ТРЁХ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ.	
КОЭФФИЦИЕНТЫ РАКА	33
Связь коэффициентов Рака с коэффициентами Клебша – Гордана. $6j$ -символы Вигнера. Свойства и явный вид коэффициентов Рака.	
ВЫСШИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ	
ПЕРЕСВЯЗКИ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ	38
Коэффициенты Фано и $3nj$ -символы Вигнера.	
ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.	
ТЕОРЕМА ВИГНЕРА-ЭККАРТА	39
Приведённые матричные элементы и правила сумм. Матричные элементы тензорных произведений и основных операторов.	
ПРИЛОЖЕНИЕ	45
Повороты системы координат.	
ЛИТЕРАТУРА	47

*Памяти профессора СПбГУ
Олега Михайловича КНЯЗЬКОВА,
приобщившего автора к красоте
аналитических вычислений*

ВВЕДЕНИЕ

Пособие ориентировано на аспирантов и студентов магистратуры, специализирующихся в области ядерной физики и прошедших подготовку по квантовой механике в университетском объёме. В нём подробно рассматриваются вопросы, связанные с угловым моментом сложных квантово-механических систем, в первую очередь атомных ядер.

Круг вопросов, рассматриваемых в пособии, наиболее полно мог бы быть отнесен к теоретико-групповым методам. Симметричный подход к проблеме вращения наиболее общий, он не только приводит к необходимым результатам, но и раскрывает глубокую взаимосвязь, на первый взгляд, независимых понятий и величин. Однако в теории ядра сложилась другая традиция, в ней используется индуктивный метод исследования по принципу «от частного к общему». Это находит отражение даже в терминологии. Данное пособие написано «ядерщиком» и ориентировано на «ядерщиков», поэтому выбор стиля изложения был предопределен однозначно.

Пособие не может рассматриваться как независимый учебник, скорее это конспект, содержащий основные формулы и краткие комментарии к ним. Теоретический материал иллюстрируется рисунками и таблицами, дополняется задачами и упражнениями. В конце приводится список рекомендованной литературы.

СИСТЕМЫ КООРДИНАТ. КОМПОНЕНТЫ ВЕКТОРОВ

В декартовой системе координат положение материальной точки M в пространстве определяется расстояниями x, y, z от неё до координатных плоскостей, рис. 1а. Радиус-вектор точки M

$$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z \quad (1)$$

задаётся декартовыми ортами $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$, которые образуют ортонормированный базис.

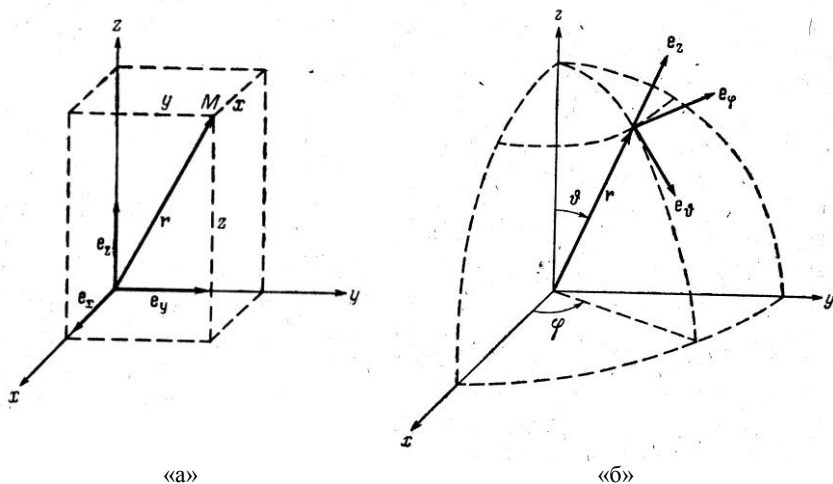


Рис.1. Положение материальной точки M в декартовой «а» и сферической «б» системах координат¹

В сферической системе координат, рис.1б, положение точки M определяется длиной радиуса-вектора r , полярным углом ϑ и азимутальным углом φ . Декартовы и сферические координаты связаны соотношениями:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, & r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, & 0 &\leq r < \infty, \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi, & \vartheta &= \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, & 0 &\leq \vartheta \leq \pi, \end{aligned} \quad (2)$$

¹ Для определённости далее рассматриваются только правые системы координат.

$$z = r \cos \vartheta, \quad \varphi = \arccos \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}, \quad \left(\operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x} \right), \quad 0 \leq \varphi < 2\pi.$$

Сферические орты $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\vartheta, \mathbf{e}_\varphi$, рис.1б, образуют ортонормированный базис, но в отличие от декартовых ортов зависят от углов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{e}_r &= 0, & \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{e}_\vartheta &= 0, & \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{e}_\varphi &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial \vartheta} \mathbf{e}_r &= \mathbf{e}_\vartheta, & \frac{\partial}{\partial \vartheta} \mathbf{e}_\vartheta &= -\mathbf{e}_r, & \frac{\partial}{\partial \vartheta} \mathbf{e}_\varphi &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_r &= \mathbf{e}_\varphi \sin \vartheta, & \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_\vartheta &= \mathbf{e}_\varphi \cos \vartheta, & \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_\varphi &= -\mathbf{e}_r \sin \vartheta - \mathbf{e}_\vartheta \cos \vartheta. \end{aligned} \quad (3)$$

Эти соотношения должны учитываться при дифференцировании векторов.

В теории угловых моментов широко используются циклические координаты x_μ , $\mu = \pm 1, 0$, которые определяются соотношениями²

$$\begin{aligned} x_{+1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) = -\frac{1}{\sqrt{2}} r \cdot \sin \vartheta \cdot e^{i\varphi}, \\ x_0 &= z = r \cos \vartheta, \\ x_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) = \frac{1}{\sqrt{2}} r \cdot \sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi}. \end{aligned} \quad (4)$$

Циклические орты $\mathbf{e}_{-1}, \mathbf{e}_0, \mathbf{e}_{+1}$ образуют комплексный ортонормированный базис.

Любой вектор может быть разложен по базисным ортам, т.е. представлен в виде

$$\mathbf{A} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha}. \quad (5)$$

В декартовых координатах

$$\mathbf{A} = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z, \quad (5.1)$$

в сферических –

$$\mathbf{A} = A_r \mathbf{e}_r + A_\vartheta \mathbf{e}_\vartheta + A_\varphi \mathbf{e}_\varphi. \quad (5.2)$$

В циклических координатах

$$\mathbf{A} = \sum_{\mu=\pm 1, 0} (-1)^\mu A_{-\mu} \mathbf{e}_{\mu}. \quad (5.3)$$

² Для простоты рассматриваются только ковариантные циклические координаты.

Связь между ортами в различных системах координат:

декартовы и сферические орты

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_x &= \mathbf{e}_r \sin \vartheta \cos \varphi + \mathbf{e}_\varrho \cos \vartheta \cos \varphi - \mathbf{e}_\varphi \sin \varphi, \\ \mathbf{e}_y &= \mathbf{e}_r \sin \vartheta \sin \varphi + \mathbf{e}_\varrho \cos \vartheta \sin \varphi + \mathbf{e}_\varphi \cos \varphi, \\ \mathbf{e}_z &= \mathbf{e}_r \cos \vartheta - \mathbf{e}_\varrho \sin \vartheta; \end{aligned} \quad (6.1)$$

декартовы и циклические орты

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_{-1} - \mathbf{e}_{+1}), \\ \mathbf{e}_y &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_{-1} + \mathbf{e}_{+1}), \\ \mathbf{e}_z &= \mathbf{e}_0; \end{aligned} \quad (6.2)$$

сферические и декартовы орты

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_r &= \mathbf{e}_x \sin \vartheta \cos \varphi + \mathbf{e}_y \sin \vartheta \sin \varphi + \mathbf{e}_z \cos \vartheta, \\ \mathbf{e}_\varrho &= \mathbf{e}_x \cos \vartheta \cos \varphi + \mathbf{e}_y \cos \vartheta \sin \varphi - \mathbf{e}_z \sin \vartheta, \\ \mathbf{e}_\varphi &= -\mathbf{e}_x \sin \varphi + \mathbf{e}_y \cos \varphi; \end{aligned} \quad (6.3)$$

сферические и циклические орты

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_r &= -\mathbf{e}_{+1} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi} + \mathbf{e}_0 \cos \vartheta + \mathbf{e}_{-1} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi}, \\ \mathbf{e}_\varrho &= -\mathbf{e}_{+1} \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \vartheta e^{-i\varphi} - \mathbf{e}_0 \sin \vartheta + \mathbf{e}_{-1} \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \vartheta e^{i\varphi}, \\ \mathbf{e}_\varphi &= \mathbf{e}_{+1} \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} + \mathbf{e}_{-1} \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\varphi}; \end{aligned} \quad (6.4)$$

циклические и декартовы орты

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{+1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y), \\ \mathbf{e}_0 &= \mathbf{e}_z, \\ \mathbf{e}_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y); \end{aligned} \quad (6.5)$$

циклические и сферические орты

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{+1} &= -\mathbf{e}_r \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi} - \mathbf{e}_\varrho \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \vartheta e^{i\varphi} - \mathbf{e}_\varphi \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\varphi}, \\ \mathbf{e}_0 &= \mathbf{e}_r \cos \vartheta - \mathbf{e}_\varrho \sin \vartheta, \end{aligned} \quad (6.6)$$

$$\mathbf{e}_{-1} = \mathbf{e}_r \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi} + \mathbf{e}_\vartheta \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \vartheta e^{-i\varphi} - \mathbf{e}_\varphi \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi}.$$

Связь между компонентами векторов в различных системах координат такая же, как связь между соответствующими ортами с заменой $\mathbf{e}_\alpha \rightarrow \mathbf{A}_\alpha$.

Скалярное произведение векторов коммутативно и не меняется при повороте системы координат,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z \quad (7.1)$$

в декартовых координатах;

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_r B_r + A_\vartheta B_\vartheta + A_\varphi B_\varphi \quad (7.2)$$

в сферических координатах, если вектора не являются дифференциальными операторами;

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = -A_{+1} B_{-1} + A_0 B_0 - A_{-1} B_{+1} \quad (7.3)$$

в циклических координатах.

Векторным произведением в декартовых координатах

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix} = \sum_{i=x,y,z} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_i \mathbf{e}_i \quad (8)$$

называется вектор, компоненты которого определяются как

$$\begin{aligned} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_x &= A_y B_z - A_z B_y, \\ [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_y &= A_z B_x - A_x B_z, \\ [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_z &= A_x B_y - A_y B_x. \end{aligned} \quad (8.1)$$

В сферических координатах, если вектора не являются дифференциальными операторами,

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_r & \mathbf{e}_\vartheta & \mathbf{e}_\varphi \\ A_r & A_\vartheta & A_\varphi \\ B_r & B_\vartheta & B_\varphi \end{vmatrix} = \sum_{\alpha=r,\vartheta,\varphi} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_\alpha \mathbf{e}_\alpha, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_r &= A_\vartheta B_\varphi - A_\varphi B_\vartheta, \\ [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_\vartheta &= A_\varphi B_r - A_r B_\varphi, \\ [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_\varphi &= A_r B_\vartheta - A_\vartheta B_r. \end{aligned} \quad (9.1)$$

В циклических координатах:

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = i \begin{vmatrix} \mathbf{e}_{+1} & \mathbf{e}_0 & \mathbf{e}_{-1} \\ A_{+1} & A_0 & A_{-1} \\ B_{+1} & B_0 & B_{-1} \end{vmatrix} = \sum_{\mu=\pm 1,0} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_{\mu} (-1)^{\mu} \mathbf{e}_{-\mu}, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_{+1} &= i(A_0 B_{+1} - A_{+1} B_0), \\ [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_0 &= i(A_{-1} B_{+1} - A_{+1} B_{-1}), \\ [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]_{-1} &= i(A_{-1} B_0 - A_0 B_{-1}). \end{aligned} \quad (10.1)$$

Векторное произведение антикоммутирует (если не содержит операторов дифференцирования).

Для произведений трёх и более векторов справедливы следующие равенства:

$$\mathbf{A} \cdot [\mathbf{B} \times \mathbf{C}] = \mathbf{B} \cdot [\mathbf{C} \times \mathbf{A}] = \mathbf{C} \cdot [\mathbf{A} \times \mathbf{B}], \quad (11)$$

$$\mathbf{A} \times [\mathbf{B} \times \mathbf{C}] = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}), \quad (12)$$

$$[\mathbf{A} \times \mathbf{B}] \cdot [\mathbf{C} \times \mathbf{D}] = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}), \quad (13)$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{A} \times \mathbf{B}] \times [\mathbf{C} \times \mathbf{D}] &= \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot [\mathbf{C} \times \mathbf{D}]) - \mathbf{A}(\mathbf{B} \cdot [\mathbf{C} \times \mathbf{D}]) = \\ &= \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot [\mathbf{B} \times \mathbf{D}]) - \mathbf{D}(\mathbf{A} \cdot [\mathbf{B} \times \mathbf{C}]). \end{aligned} \quad (14)$$

Оператор Гамильтона ∇ (градиент) является векторным дифференциальным оператором, его компоненты в декартовых координатах:

$$\nabla_x = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \nabla_y = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \nabla_z = \frac{\partial}{\partial z}. \quad (15)$$

В сферических координатах

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (16)$$

Здесь существенен порядок сомножителей, т.к. орты зависят от углов, см. равенства (3). В циклических координатах:

$$\nabla = \sum_{\mu=\pm 1,0} (-1)^{\mu} \mathbf{e}_{\mu} \nabla_{-\mu} = -\mathbf{e}_{+1} \nabla_{-1} + \mathbf{e}_0 \nabla_0 - \mathbf{e}_{-1} \nabla_{+1}, \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} \nabla_{+1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \nabla_0 &= \frac{\partial}{\partial z}, \end{aligned} \quad (17.1)$$

$$\nabla_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

Оператор Лапласа $\Delta = \nabla^2$ является скалярным дифференциальным оператором. В декартовых координатах он имеет вид

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (18)$$

в сферических –

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right\} + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left\{ \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right\} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (19)$$

Угловая часть оператора Лапласа, $\Delta = \frac{1}{r^2} (\Delta_r + \Delta_\Omega)$,

$$\Delta_\Omega = \frac{1}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left\{ \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right\} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (19.1)$$

связана с оператором квадрата орбитального момента

$$\Delta_\Omega = -\hat{L}^2. \quad (19.2)$$

Задачи и упражнения:

1. Используя соотношения между ортами, получить связь между компонентами произвольного вектора в декартовых, сферических и циклических координатах.
2. Используя определение скалярного произведения векторов в декартовых координатах $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$, получить выражения для скалярного произведения в сферических и циклических координатах.
3. Почему выражение $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_r B_r + A_\vartheta B_\vartheta + A_\varphi B_\varphi$ не может быть скалярным произведением в сферических координатах, если один из векторов содержит дифференцирование?
4. Получить выражение для оператора Лапласа в циклических координатах.
5. Доказать соотношение $e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots$

УГЛОВЫЕ МОМЕНТЫ

Оператором полного углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ системы называется псевдовекторный³ оператор, осуществляющий преобразование волновых функций и операторов при повороте системы координат на бесконечно малый угол $\delta\omega$:

$$\begin{aligned}\Psi &\rightarrow \Psi' = (1 - i\delta\omega \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}})\Psi, \\ \hat{O} &\rightarrow \hat{O}' = \hat{O} - i\delta\omega \mathbf{n} \cdot [\hat{\mathbf{J}}, \hat{O}].\end{aligned}\quad (20)$$

Вопросы, связанные с поворотом системы координат, вынесены в приложение. Он является эрмитовским оператором, т.е. $\hat{\mathbf{J}}^\dagger = \hat{\mathbf{J}}$. Для декартовых и циклических компонент условие эрмитовости означает:

$$\begin{aligned}(\hat{J}_i)^\dagger &= \hat{J}_i, \quad i = x, y, z; \\ (\hat{J}_\mu)^\dagger &= (-1)^\mu \hat{J}_{-\mu}, \quad \mu = \pm 1, 0.\end{aligned}\quad (21)$$

Определением оператора полного углового момента $\hat{\mathbf{J}}$ может служить коммутационное соотношение

$$[(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{J}}), (\mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{J}})] = i\hbar [\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \cdot \hat{\mathbf{J}}, \quad (22)$$

где \mathbf{a} и \mathbf{b} – произвольные постоянные вектора. Выбирая в качестве этих векторов координатные орты, можно получить коммутационные соотношения в соответствующих системах координат. В декартовых координатах проекции оператора полного углового момента удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned}[\hat{J}_x, \hat{J}_x] &= [\hat{J}_y, \hat{J}_y] = [\hat{J}_z, \hat{J}_z] = 0; \\ [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\hbar \hat{J}_z; \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x; \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y;\end{aligned}\quad (22.1)$$

Циклические компоненты –

$$\begin{aligned}[\hat{J}_{+1}, \hat{J}_{+1}] &= [\hat{J}_0, \hat{J}_0] = [\hat{J}_{-1}, \hat{J}_{-1}] = 0; \\ [\hat{J}_{+1}, \hat{J}_0] &= -\hbar \hat{J}_{+1}; \quad [\hat{J}_{+1}, \hat{J}_{-1}] = -\hbar \hat{J}_0; \quad [\hat{J}_0, \hat{J}_{-1}] = -\hbar \hat{J}_{-1}\end{aligned}\quad (22.2)$$

Компоненты операторов орбитального углового момента $\hat{\mathbf{L}}$ и спина $\hat{\mathbf{S}}$ подчиняются аналогичным коммутационным соотношениям⁴.

³ Псевдовектор или аксиальный вектор не меняет знака при инверсии координат $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$.

⁴ Далее используем систему единиц, где $\hbar = 1$.

Оператор квадрата полного момента \hat{J}^2 в декартовых координатах

$$\hat{J}^2 = \sum_i \hat{J}_i^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \quad (23.1)$$

в циклических –

$$\hat{J}^2 = \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \hat{J}_{-\mu} \hat{J}_{\mu} = -\hat{J}_{+1} \hat{J}_{-1} + \hat{J}_0 \hat{J}_0 - \hat{J}_{-1} \hat{J}_{+1}. \quad (23.2)$$

Так как $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$, эти операторы имеют общий набор собственных функций $\Phi_{JM} \equiv |JM\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 \Phi_{JM} &= J(J+1) \Phi_{JM}, \\ \hat{J}_z \Phi_{JM} &= M \Phi_{JM} \end{aligned} \quad (24)$$

с квантовыми числами J, M , имеющими смысл полного углового момента, $J = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ и его z -проекции, $-J \leq M \leq J$. Отличные от нуля матричные элементы остальных проекций

$$\langle JM \pm 1 | \hat{J}_x \pm \hat{J}_y | JM \mp 1 \rangle = [(J \mp M)(J \pm M + 1)]^{1/2} \quad (25)$$

содержат фазовые множители, связанные с выбором относительных фаз для состояний с разными M . Чаще всего полагают, что матричные элементы оператора \hat{J}_x вещественны, а матричные элементы \hat{J}_y – чисто мнимые.

Оператор орбитального момента в координатном представлении –

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla. \quad (26)$$

Его декартовы компоненты⁵:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i(y\nabla_z - z\nabla_y) = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ \hat{L}_y &= -i(z\nabla_x - x\nabla_z) = -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ \hat{L}_z &= -i(x\nabla_y - y\nabla_x) = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right); \end{aligned} \quad (27)$$

⁵ В определении (26) явно использована константа Планка, далее положено $\hbar = 1$.

сферические:

$$\hat{L}_r = 0, \quad \hat{L}_\vartheta = \frac{i}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{L}_\varphi = -i \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \quad (28)$$

и циклические компоненты:

$$\begin{aligned} \hat{L}_{+1} &= x_0 \nabla_{+1} - x_{+1} \nabla_0, \\ \hat{L}_0 &= x_{-1} \nabla_{+1} - x_{+1} \nabla_{-1}, \\ \hat{L}_{-1} &= x_{-1} \nabla_0 - x_0 \nabla_{-1}. \end{aligned} \quad (29)$$

Оператор спина $\hat{\mathbf{S}}$ представляется тремя (по числу компонент) квадратными матрицами размерности $(2S+1) \times (2S+1)$, где S спин частицы. Они действуют на спиновые функции и удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям, что и компоненты полного углового момента (22). Для спина $S = 1/2$ операторы декартовых проекций принято выражать через матрицы Паули:

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{1}{2} \hat{\sigma}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_y &= \frac{1}{2} \hat{\sigma}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_z &= \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (30)$$

Соответствующие собственные функции – спиноры $\chi_{1/2, \mu}$:

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 \chi_{1/2, \mu} &= \frac{3}{4} \chi_{1/2, \mu} \\ \hat{S}_z \chi_{1/2, \mu} &= \mu \chi_{1/2, \mu} \end{aligned} \quad (31)$$

Каноническое представление для спиноров:

$$\chi_{1/2, 1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{1/2, -1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (32)$$

В ядерной физике для описания явлений с поляризацией используются поляризационные операторы $\hat{T}_{LM}(S)$, L, M – целые числа, $L=0, 1, \dots, 2S$, $M \leq |L|$. Они действуют только на спиновые переменные и определяются выражением

$$\hat{T}_{LM}(S) = N_L(S) (\hat{\mathbf{S}} \cdot \nabla)^L \{ r^L Y_{LM}(\vartheta, \varphi) \}, \quad (33)$$

где $\hat{\mathbf{S}}$ – оператор спина, $N_L(S)$ – нормировочный множитель,

$$N_L(S) = \frac{2^L}{L!} \left[\frac{4\pi(2S-L)!}{(2S+L+1)!} \right]^{1/2}, \quad (33.1)$$

а $Y_{LM}(\vartheta, \varphi)$ – сферические функции. Явный вид матриц $\hat{T}_{LM}(S)$ зависит от выбора представления для спиновых функций. В частности, в циклическом базисе для $L=1$

$$\hat{T}_{1M}(S) = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{S(S+1)(2S+1)}} \hat{S}_M, \quad M = \pm 1, 0. \quad (34)$$

Поляризаационные операторы образуют полную систему линейно независимых матриц. Произвольная квадратная матрица \hat{A} размерности $(2S+1) \times (2S+1)$, S – целое или полуцелое число, может быть разложена по поляризаационным операторам:

$$\hat{A} = \sum_{L=0}^{2S} \sum_{M=-L}^L A_{LM} \hat{T}_{LM}(S), \quad (35)$$

с коэффициентами

$$A_{LM} = \text{Sp} \left\{ \hat{T}_{LM}^+(S) \hat{A} \right\}. \quad (35.1)$$

Задачи и упражнения:

1. Показать, что $[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$, $i = x, y, z$. Почему нельзя построить набор собственных функций общий для всех этих операторов?
2. Почему радиальная компонента орбитального момента $\hat{L}_r = 0$?
3. Показать, что $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{pmatrix}$.
4. Построить циклические компоненты оператора спина \hat{S} .
5. Как выглядит оператор орбитального момента \hat{L} в импульсном представлении?
6. Показать, что операторы компонент радиуса-вектора \mathbf{r} и импульса \mathbf{p} антикоммутируют с оператором отражения координат P , а операторы компонент углового момента \mathbf{L} коммутируют с P .
7. Показать, что угловая часть оператора Лапласа $\Delta = \hat{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ в сферических координатах совпадает с точностью до знака с оператором квадрата орбитального момента \hat{L}^2 .

СФЕРИЧЕСКИЕ И СПИНОВЫЕ ФУНКЦИИ

Сферические функции $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ являются собственными функциями оператора квадрата орбитального углового момента и его проекции:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= l(l+1)Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \\ L_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= mY_{lm}(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (36)$$

Это однозначные непрерывные комплексные функции двух вещественных переменных $0 \leq \vartheta \leq \pi$ и $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, характеризующиеся двумя параметрами l и m , $l = 0, 1, 2, \dots$ и $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ ($|m| \leq l$). При заданном l имеется $(2l+1)$ независимых функций с разными значениями m . Они характеризуют угловое распределение частиц, обладающих орбитальным моментом, квадрат которого равен $l(l+1)$.

Выражения (36) являются дифференциальными уравнениями второго порядка. В квантово-механических приложениях основной интерес представляют регулярные решения $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 < \infty$, которые определяются следующими граничными условиями:

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\vartheta, \varphi \pm 2\pi) &= Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \\ \left. \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \right|_{\vartheta=0} &= \left. \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \right|_{\vartheta=\pi} = 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Условие нормировки и ортогональности функций $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (38)$$

Выбор фаз по Кондону – Шортли фиксирует однозначный выбор сферических функций:

$$Y_{l0}(0,0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}, \quad (39.1)$$

$$Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta, -\varphi) = (-1)^m Y_{l-m}(\vartheta, \varphi). \quad (39.2)$$

Из этих соотношений следует, что функции $Y_{l0}(\vartheta, \varphi)$ вещественны при любых значениях аргументов.

Сферические функции выражаются через присоединённые полиномы Лежандра $P_l^m(x)$:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}. \quad (40)$$

Для малых значений индексов они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} Y_{00}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}}, \\ Y_{10}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta, \quad Y_{1\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{20}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1) = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (1 + 3 \cos 2\vartheta), \\ Y_{2\pm 1}(\vartheta, \varphi) &= \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta \cdot e^{\pm i\varphi} = \mp \frac{1}{4} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{2\pi}} \sin 2\vartheta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{2\pm 2}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cdot e^{\pm 2i\varphi} = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{2\pi}} (1 - \cos 2\vartheta) \cdot e^{\pm 2i\varphi} \text{ и т.д.} \end{aligned} \quad (41)$$

При больших значениях параметра l сферические функции имеют следующую асимптотику:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \propto \frac{\cos \left[(2l+1) \frac{\vartheta}{2} + (2m-1) \frac{\pi}{4} \right] e^{im\varphi}}{\sqrt{\sin \vartheta}} + O\left(\frac{1}{l}\right). \quad (42)$$

Сферические функции образуют полную систему $\sum_{lm} Y_{lm}^*(\omega) Y_{lm}(\omega) = \delta(\omega - \omega')$, что позволяет произвольную функцию $f(\vartheta, \varphi)$, определённую в области изменения аргументов $0 \leq \vartheta \leq \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$, представить в виде ряда

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (43)$$

где

$$a_{lm} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin \vartheta f(\vartheta, \varphi) Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi). \quad (43.1)$$

Это разложение можно рассматривать как интегральное преобразование функции f от непрерывных переменных ϑ, φ к дискретным l, m . Ряд (43) называется разложением по мультиполям, а коэффициенты a_{lm} – мультипольными моментами.

Спиновые функции $\chi(\sigma)$ описывают поляризационные состояния частиц с определённым спином. Спиновая переменная σ имеет смысл проекции спина на ось квантования (ось z , например) и принимает $2S+1$ значений: $\sigma = -S, -S+1, \dots, S-1, S$, где S – спин частицы⁶ (целое или полуцелое неотрицательное число). Спиновые функции χ_{Sm} состояний с определённым значением спина S и его проекции m называют базисными:

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \chi_{Sm} = S(S+1)\chi_{Sm}, \quad \hat{S}_z \chi_{Sm} = m\chi_{Sm}. \quad (44)$$

Из этого определения следует, что зависимость базисных функций от спиновой переменной даётся формулой $\chi_{Sm}(\sigma) = \delta_{m\sigma}$. Если их записывать в виде столбцов, то

$$\chi_{SS} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{SS-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots \quad \chi_{S-S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (45)$$

Совокупность $2S+1$ базисных функций χ_{Sm} с $m = S, S-1, \dots, -S$ образует полную систему,

$$\langle Sm | Sm' \rangle = \chi_{Sm}^+ \chi_{Sm'} = \delta_{mm'}, \quad (46)$$

ортономированных спиновых функций:

$$\sum_{m=-S}^S |Sm\rangle \langle Sm| = \sum_{m=-S}^S \chi_{Sm} \chi_{Sm}^+ = \hat{\mathbf{I}}, \quad (47)$$

где $\hat{\mathbf{I}}$ – единичная матрица размерности $(2S+1) \times (2S+1)$. Спиноры (32) являются частным случаем спиновых функций для спина $S = 1/2$.

Для декартовых компонент оператора спина \hat{S}_i , $i = x, y, z$, отличны от нуля только следующие матричные элементы:

$$\begin{aligned} \chi_{Sm\pm 1}^+ \hat{S}_x \chi_{Sm} &= \frac{1}{2} \sqrt{(S \mp m)(S \pm m + 1)}, \\ \chi_{Sm\pm 1}^+ \hat{S}_y \chi_{Sm} &= \mp \frac{i}{2} \sqrt{(S \mp m)(S \pm m + 1)}, \\ \chi_{Sm}^+ \hat{S}_z \chi_{Sm} &= m. \end{aligned} \quad (48)$$

⁶ Под словом «частица» имеются в виду не только элементарные частицы, но и сложные системы, ведущие себя в рассматриваемых явлениях как единое целое.

Для циклических компонент \hat{S}_μ , $\mu = \pm 1, 0$ –

$$\begin{aligned}\chi_{S_{m+1}}^+ \hat{S}_{+1} \chi_{S_m} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(S-m)(S+m+1)}, \\ \chi_{S_m}^+ \hat{S}_0 \chi_{S_m} &= m, \\ \chi_{S_{m-1}}^+ \hat{S}_{-1} \chi_{S_m} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(S+m)(S-m+1)}.\end{aligned}\tag{49}$$

Задачи и упражнения:

1. Доказать соотношения:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^m Y_{lm}(\vartheta, \varphi),$$

$$Y_{lm}(-\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}(\vartheta, \varphi),$$

$$Y_{lm}(\vartheta, -\varphi) = (-1)^m Y_{l-m}(\vartheta, \varphi).$$

2. Доказать, что $\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}$.

3. Почему циклические компоненты операторов углового момента $\hat{L}_{\pm 1}$ называют «повышающими» или «понижающими»?
4. Представить выражение $(\hat{\mathbf{g}}_1 \cdot \hat{\mathbf{g}}_2)^2$ в виде, содержащем матрицы Паули (30) в степени не выше первой⁷.
5. Состояние частицы со спином $\frac{1}{2}$ характеризуется определёнными значениями квантовых чисел l, m, s_z . Найти вероятности различных значений полного момента j .
6. Показать, что произвольную квадратную матрицу 2-го ранга \hat{A} можно представить в виде $\hat{A} = a_0 \hat{I} + a_x \hat{\sigma}_x + a_y \hat{\sigma}_y + a_z \hat{\sigma}_z \equiv a_0 + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, с коэффициентами $a_0 = \frac{1}{2} Sp \hat{A}$, $\mathbf{a} = \frac{1}{2} Sp (\hat{\sigma} \hat{A})$.
7. Показать, что из коммутационных соотношений $[\hat{L}_i, \hat{f}] = 0$ оператора физической величины f с компонентами углового момента следует, что матричные элементы $\langle n, L, M' | \hat{f} | n, L, M \rangle$ отличны от нуля только при $M=M'$ и не зависят от M .

⁷ Индексы 1, 2 у матриц означают, что они являются операторами, относящимися к разным частицам.

СЛОЖЕНИЕ ДВУХ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ.
КОЭФФИЦИЕНТЫ КЛЕБША – ГОРДАНА

Для системы, состоящей из двух не взаимодействующих подсистем, гамильтониан представим в виде $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, а волновая функция - в виде произведения $\Psi(1,2) = \psi(1)\psi(2)$. Например, это могут быть два нуклона в среднем поле ядра со сферической симметрией. Для каждой подсистемы можно определить операторы углового момента \hat{J}_1^2 и \hat{J}_{1z} , \hat{J}_2^2 и \hat{J}_{2z} . Обозначим волновые функции подсистем как $|j_1 m_1\rangle$ и $|j_2 m_2\rangle$. В этом случае для всей системы возможны два представления.

В первом представлении при заданных значениях j_1, j_2 образуем все возможные произведения $\Psi(1,2) = |j_1 m_1\rangle \cdot |j_2 m_2\rangle$, перебирая все значения проекций m_1 и m_2 . В таком случае число возможных состояний составной системы с гамильтонианом \hat{H} будет равно $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Эти состояния являются собственными для полного набора коммутирующих операторов: $\hat{H}, \hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}$.

Для той же системы в другом представлении можно построить оператор полного углового момента:

$$\hat{J}_i = \hat{J}_{1i} + \hat{J}_{2i}, \quad (i = x, y, z). \quad (50)$$

Для него также выполняются коммутационные соотношения (22). Для коммутирующих операторов квадрата полного углового момента и его проекции можно построить собственные функции $\tilde{\Psi}(1,2) = |JMj_1 j_2\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |JMj_1 j_2\rangle &= J(J+1) |JMj_1 j_2\rangle \\ \hat{J}_z |JMj_1 j_2\rangle &= M |JMj_1 j_2\rangle. \end{aligned} \quad (51)$$

Число состояний $\tilde{\Psi}$ также равно $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ по числу комбинаций «одночастичных» проекций m_i . Эти функции являются собственными для операторов \hat{J}_1^2 и \hat{J}_2^2 . Полный набор операторов во втором случае: $\hat{H}, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$. Отметим, что операторы \hat{J}_{1z} и \hat{J}_{2z} теперь уже не коммутируют с оператором квадрата полного момента \hat{J}^2 :

$$[\hat{J}_{1z(2z)}, \hat{J}^2] \neq 0. \quad (52)$$

Таким образом, эти два представления не совпадают друг с другом, но описывают одну и ту же систему. Следовательно, в соответствии с основными постулатами квантовой механики, они должны быть связаны унитарным преобразованием, $\tilde{\Psi} = \hat{U}\Psi$, или

$$|JMj_1j_2\rangle = \sum_{m_1m_2} C(j_1m_1, j_2m_2 | JM) |j_1m_1\rangle |j_2m_2\rangle. \quad (53)$$

Коэффициенты этого преобразования $C(j_1m_1, j_2m_2 | JM)$ называются коэффициентами Клебша – Гордана⁸. Они определяют амплитуду вероятности того, что угловые моменты j_1 и j_2 с проекциями m_1 и m_2 складываются в суммарный момент J с проекцией M (рис.2).

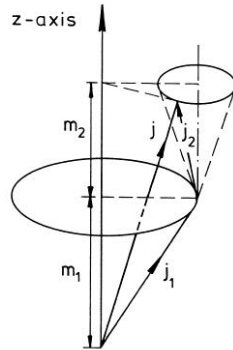


Рис.2. Графическое представление сложения угловых моментов в квазиклассическом пределе

Для значений моментов предполагается:

j_1, j_2, J – целые или полуцелые неотрицательные числа;

m_1, m_2, M – целые или полуцелые, положительные или отрицательные числа, $|m_1| \leq j_1, |m_2| \leq j_2, |M| \leq J$;

$j_1 + m_1, j_2 + m_2, J + M, j_1 + j_2 + J$ – целые неотрицательные числа.

В соответствии с правилами векторного сложения $\vec{j}_1 + \vec{j}_2 = \vec{J}$ отличны от нуля только те коэффициенты Клебша – Гордана, для которых выполняются следующие соотношения:

⁸ Для коэффициентов Клебша – Гордана используется несколько обозначений:

$$C(j_1m_1, j_2m_2 | JM) = C_{j_1m_1, j_2m_2}^{JM} = (j_1j_2m_1m_2 | j_1j_2jm) = C_{jm}^{j_1j_2}(m_1m_2) \text{ и др.}$$

$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$ – правило треугольника,

$M = m_1 + m_2$ – правило отбора по проекциям моментов.

Фазы коэффициентов Клебша – Гордана в преобразовании (53) выбираются так, чтобы они были вещественными (выбор фаз по Кондону – Шортли). В этом случае прямое преобразование совпадает с обратным:

$$|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = \sum_{JM} C(j_1 m_1, j_2 m_2 | JM) |JM j_1 j_2\rangle. \quad (54)$$

Ортонормированность коэффициентов Клебша – Гордана:

$$\sum_{m_1 m_2} C(j_1 m_1, j_2 m_2 | JM) \cdot C(j_1 m_1, j_2 m_2 | J'M') = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \quad (55.1)$$

$$\sum_{JM} C(j_1 m_1, j_2 m_2 | JM) \cdot C(j_1 m_1', j_2 m_2' | JM) = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}. \quad (55.1)$$

Примеры использования коэффициентов Клебша – Гордана.

1. Рассмотрим волновую функцию фотона со спином $s=1$. Спиновая волновая функция χ_{sv} фотона имеет три компоненты χ_{1-1} , χ_{10} и χ_{11} . Полный момент $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ (по правилу «треугольника» $j = l$ или $j = l \pm 1$), его проекция $\mu = m + v$. Соответствующая волновая функция

$$\begin{aligned} \psi_{j\mu s} &= \sum_v C(l \mu - v, s v | j\mu) Y_{l, \mu-v} \chi_{sv} = \\ &= \sum_{v=0, \pm 1} C(l \mu - v, 1 v | j\mu) Y_{l, \mu-v} \chi_{1v}. \end{aligned} \quad (56)$$

Эту волновую функцию часто называют векторной сферической функцией. Система этих функций ортонормирована и образует полный набор.

2. Волновая функция нуклона со спином $s=1/2$ и полным моментом $j = l \pm 1/2$

$$\begin{aligned} \psi_{j\mu s} &= \sum_v C(l \mu - v, s v | j\mu) Y_{l, \mu-v} \chi_{sv} = \\ &= \sum_{v=\pm 1/2} C\left(l \mu - v, \frac{1}{2} v | j\mu\right) Y_{l, \mu-v} \chi_{\frac{1}{2}v}. \end{aligned} \quad (57)$$

Эту функцию называют «сферический спинор». Система этих функций также ортонормирована и образует полный набор.

Для изучения симметрии коэффициентов Клебша – Гордана введём новый символ:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_3+m_3+2j_1} \frac{1}{\sqrt{2j_3+1}} C(j_1-m_1, j_2-m_2 | j_3 m_3), \quad (58.1)$$

и, наоборот,

$$C(j_1 m_1, j_2 m_2 | j_3 m_3) = (-1)^{j_1-j_2+m_3} \sqrt{2j_3+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix}, \quad (58.2)$$

который называется $3jm$ -символом Вигнера⁹. Он представляет собой амплитуду вероятности того, что три угловых момента j_1, j_2, j_3 с проекциями m_1, m_2, m_3 складываются в полный угловой момент равный нулю. Для $3j$ -символа справедливы следующие свойства симметрии:

а). нечётная перестановка столбцов приводит к появлению фазового множителя:

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}; \quad (59)$$

б). при циклической перестановке столбцов (т.е. любой чётной перестановке) $3j$ -символ не меняется:

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}; \quad (60)$$

в). изменение знаков у всех проекций моментов приводит к появлению фазового множителя:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (61)$$

Используя эти соотношения, можно установить соответствующие свойства симметрии коэффициентов Клебша – Гордана.

Приведём формулы для вычисления коэффициентов Клебша – Гордана при частных значениях индексов. Очевидно, что

$$C(jm, 00 | jm) = 1. \quad (62)$$

⁹ Для $3jm$ -символов Вигнера, или просто $3j$ -символов, также используется несколько обозначений:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = X(j_1 j_2 j_3, m_1 m_2 m_3) = (-1)^{j_1-j_2+j_3} S_{j_1 m_1 j_2 m_2 j_3 m_3} \quad \text{и др.}$$

Если все проекции $m_1 = m_2 = m_3 = 0$, то

$$C(a0, b0 | c0) = \begin{cases} 0, & \text{если } a + b + c = 2g + 1 \\ \frac{(-1)^{g-c} \sqrt{2c+1} g!}{(g-a)!(g-b)!(g-c)!} \times \\ \times \left[\frac{(2g-2a)!(2g-2b)!(2g-2c)!}{(2g+1)!} \right]^{1/2}, & \\ \text{если } a + b + c = 2g, \end{cases} \quad (63)$$

где g – целое число. В частности,

$$C(a0, b0 | a+b0) = \frac{(a+b)!}{a!b!} \left[\frac{(2a)!(2b)!}{(2a+2b)!} \right]^{1/2}, \quad (63.1)$$

$$C(a0, b0 | a-b0) = (-1)^b \frac{a!}{b!(a-b)!} \left[\frac{(2b)!(2a-2b+1)!}{(2a+1)!} \right]^{1/2}. \quad (63.2)$$

Если $c = \gamma$, то

$$C(a\alpha, b\beta | c\gamma) = \delta_{\alpha+\beta, \gamma} (-1)^{a-\alpha} \times \\ \times \left[\frac{(2c+1)!(a+b-c)!(a+\alpha)!(b+\beta)!}{(a+b+c+1)!(a-b+c)!(-a+b+c)!(a-\alpha)!(b-\beta)!} \right]^{1/2}. \quad (64)$$

В частности,

$$C(aa, bb | cc) = \delta_{a+b, c}, \quad (64.1)$$

$$C(aa, b-b | cc) = \delta_{a-b, c} \left[\frac{2c+1}{2a+1} \right]^{1/2}. \quad (64.2)$$

В таблицах 1 и 2 приведены выражения для коэффициентов Клебша – Гордана, когда один из моментов равен $\frac{1}{2}$ или 1. Этих формул достаточно, например, для изучения рассеяния нейтронов на протонах с учётом тензорных сил (триплетное состояние).

Существует несколько независимых представлений коэффициентов Клебша – Гордана в виде алгебраических сумм. Все они содержат Δ -символ:

$$\Delta(abc) = \left[\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!} \right]^{1/2}. \quad (65)$$

Δ -символ симметричен относительно перестановки моментов a, b, c . Если один из моментов равен 0, то

$$\Delta(ab0) = \frac{1}{\sqrt{2a+1}} \delta_{ab}. \quad (66)$$

Таблица 1. Коэффициенты Клебша – Гордана $C(jm, j'm' | JM)$ с $j' = 1/2$.

	$m' = 1/2$	$m' = -1/2$
$J = j + 1/2$	$\sqrt{\frac{j+M+1/2}{2j+1}}$	$\sqrt{\frac{j-M+1/2}{2j+1}}$
$J = j - 1/2$	$-\sqrt{\frac{j-M+1/2}{2j+1}}$	$\sqrt{\frac{j+M+1/2}{2j+1}}$

Таблица 2. Коэффициенты Клебша – Гордана $C(jm, j'm' | JM)$ с $j' = 1$.

	$m' = 1$	$m' = 0$	$m' = -1$
$J = j + 1$	$\sqrt{\frac{(j+M)(j+M+1)}{(2j+1)(2j+2)}}$	$\sqrt{\frac{(j-M+1)(j+M+1)}{(2j+1)(j+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j-M)(j-M+1)}{(2j+1)(2j+2)}}$
$J = j$	$-\sqrt{\frac{(j+M)(j-M+1)}{2j(j+1)}}$	$\frac{M}{\sqrt{j(j+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j-M)(j+M+1)}{2j(j+1)}}$
$J = j - 1$	$\sqrt{\frac{(j-M)(j-M+1)}{2j(2j+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(j-M)(j+M)}{j(2j+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j+M)(j+M+1)}{2j(2j+1)}}$

Наиболее часто используется следующее выражение для коэффициентов Клебша – Гордана:

$$\begin{aligned} C(a\alpha, b\beta | c\gamma) &= \delta_{\gamma, \alpha+\beta} \cdot \Delta(abc) \times \\ &\times [(a+\alpha)!(a-\alpha)!(b+\beta)!(b-\beta)!(c+\gamma)!(c-\gamma)!(2c+1)]^{1/2} \times \\ &\times \sum_z \frac{(-1)^z}{z!(a+b-c-z)!(a-\alpha-z)!(b+\beta-z)!(c-b+\alpha+z)!(c-a-\beta+z)!} \end{aligned} \quad (67)$$

Коэффициенты Клебша – Гордана можно представить в виде квазибинома $(u \pm v)^{(k)}$:

$$\begin{aligned} C(a\alpha, b\beta | c\gamma) &= \delta_{\gamma, \alpha+\beta} \frac{\Delta(abc)}{(a+b-c)!} \left[\frac{(c-\gamma)!(c+\gamma)!(2c+1)}{(a-\alpha)!(a+\alpha)!(b-\beta)!(b+\beta)!} \right]^{1/2} \times \\ &\times [(a+\alpha)(b-\beta) - (a-\alpha)(b+\beta)]^{(a+b-c)}. \end{aligned} \quad (68)$$

Для вычисления квазибином нужно раскрыть по формуле бинома Ньютона

$$(u \pm v)^{(k)} = \sum_z (\pm 1)^z \binom{k}{z} u^{(k-z)} v^{(z)}, \quad (69)$$

а степени заменить квазистепенями

$$u^{(z)} = \frac{\Gamma(u+1)}{\Gamma(u-z+1)}. \quad (70)$$

В случае целого положительного z

$$u^{(z)} = u(u-1) \cdots (u-z+1). \quad (71)$$

Если $c = a + b$, то

$$C(a\alpha, b\beta | a+b \ \alpha + \beta) = \left[\frac{(2a)!(2b)!(a+b+\alpha+\beta)!(a+b-\alpha-\beta)!}{(2a+2b)!(a+\alpha)!(a-\alpha)!(b+\beta)!(b-\beta)!} \right]^{1/2}, \quad (72)$$

в частности,

$$C(aa, b-b | a+b \ a-b) = \left[\frac{(2a)!(2b)!}{(2a+2b)!} \right]^{1/2}. \quad (72.1)$$

Если $c = a + b - 1$, то

$$C(a\alpha, b\beta | a+b-1 \ \alpha + \beta) = 2(b\alpha - a\beta) \times \left[\frac{(2a+2b-1)(2a-1)!(2b-1)!(a+b+\alpha+\beta-1)!(a+b-\alpha-\beta-1)!}{(2a+2b)!(a+\alpha)!(a-\alpha)!(b+\beta)!(b-\beta)!} \right]^{1/2}, \quad (73)$$

в частности,

$$C(aa, b-b | a+b-1 \ a-b) = \left[\frac{(2a)!(2b)!(2a-2b-1)!}{(2a+2b)!} \right]^{1/2}. \quad (73.1)$$

Если $c = a - b$ ($a \geq b$), то

$$C(a\alpha, b\beta | a-b \ \alpha + \beta) = (-1)^{b+\beta} \left[\frac{(a+\alpha)!(a-\alpha)!(2b)!(2a-2b+1)!}{(2a+1)!(a-b+\alpha+\beta)!(a-b-\alpha-\beta)!(b+\beta)!(b-\beta)!} \right]^{1/2}, \quad (74)$$

в частности,

$$C(aa, b-b | a-b \ a-b) = \sqrt{\frac{2a-2b+1}{2a+1}}. \quad (74.1)$$

Часто встречающиеся суммы и суммы произведений коэффициентов Клебша – Гордана:

$$\sum_{\alpha} C(a\alpha, b0 | a\alpha) = \delta_{b0}(2a+1), \quad (75.1)$$

$$\sum_{\alpha} (-1)^{a-\alpha} C(a\alpha, a-\alpha | c0) = \delta_{c0} \sqrt{(2a+1)}, \quad (75.2)$$

$$\sum_{\alpha\beta} C(a\alpha, b\beta | c\gamma) C(a\alpha, b\beta | c'\gamma') = \delta_{cc'} \delta_{\gamma\gamma'}, \quad (75.3)$$

$$\sum_{c\gamma} C(a\alpha, b\beta | c\gamma) C(a\alpha', b\beta' | c\gamma) = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}, \quad (75.4)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} (-1)^{b+\beta} C(a\alpha, b\beta | c\gamma) C(c'-\gamma', a\alpha | b-\beta) = \\ = \delta_{cc'} \delta_{\gamma\gamma'} (-1)^{c+\gamma} \sqrt{\frac{2b+1}{2c+1}}, \end{aligned} \quad (75.5)$$

$$\sum_{\alpha\beta} (-1)^{a+\alpha} C(b\beta, a\alpha | c\gamma) C(a-\alpha, c'\gamma' | b\beta) = \delta_{cc'} \delta_{\gamma\gamma'} \sqrt{\frac{2b+1}{2c+1}}, \quad (75.6)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} C(c\gamma, b\beta | a\alpha) C(c'-\gamma', a\alpha | b\beta) = \\ = \delta_{cc'} \delta_{\gamma\gamma'} (-1)^{b-a-\gamma} \frac{\sqrt{(2a+1)(2b+1)}}{(2c+1)}. \end{aligned} \quad (75.7)$$

В общем случае удобнее пользоваться более симметричными $3j$ -символами. В настоящее время существует ряд стандартных компьютерных программ для вычисления коэффициентов Клебша – Гордана с любыми аргументами.

Задачи и упражнения:

1. Доказать, что оператор полного углового момента \hat{J} имеет общие собственные функции с «одночастичными» операторами \hat{j}_1 и \hat{j}_2 .
2. Почему операторы \hat{j}_{1z} и \hat{j}_{2z} не коммутируют с квадратом полного углового момента \hat{J}^2 ?
3. Моменты l_1 и l_2 двух подсистем складываются в результирующий момент L . Показать, что в состояниях с определённым значением L скалярные произведения $\hat{\mathbf{l}}_1 \cdot \hat{\mathbf{l}}_2, \hat{\mathbf{l}}_1 \cdot \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{l}}_2 \cdot \hat{\mathbf{L}}$ также имеют определённые значения.
4. Используя $3j$ -символы, доказать, что коэффициенты прямого преобразования (53) совпадают с коэффициентами обратного (54).
5. Вычислить значение коэффициента $C\left(\frac{9}{2} \frac{5}{2}, 11 \left| \frac{11}{2} \frac{7}{2} \right.\right)$.

ОБОБЩЁННЫЕ СФЕРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ИЛИ D -ФУНКЦИИ ВИГНЕРА

При повороте системы координат (см. приложение), характеризуемом углами Эйлера α, β, γ (рис.3), угловая часть Ψ_{JM} волновых функций системы с определённым угловым моментом J и проекцией M преобразуются с помощью D -функций Вигнера:

$$\Psi_{JM'}(\vartheta', \varphi', \sigma') = \sum_{M=-J}^J D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) \Psi_{JM}(\vartheta, \varphi, \sigma), \quad (76)$$

где ϑ, φ и ϑ', φ' – сферические углы в исходной системе координат и в повернутой, соответственно, σ и σ' – спиновые координаты. Таким образом, D -функции $D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma)$ определяются как матричные элементы оператора поворота $\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma)$ в JM -представлении:

$$\langle JM | \hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) | J' M' \rangle = \delta_{JJ'} D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (77)$$

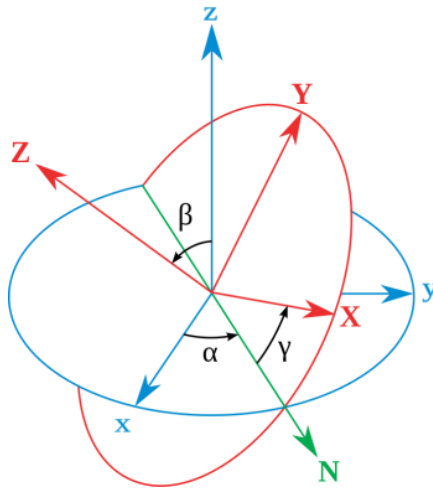


Рис.3. Углы Эйлера, описывающие поворот системы координат.

Функции $D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma)$ являются собственными функциями трёх операторов поворота, определяющих трёхмерное вращение:

$$\begin{aligned}
\hat{J}_z &= -i \frac{\partial}{\partial \alpha}, \\
\hat{J}_{z'} &= -i \frac{\partial}{\partial \gamma}, \\
\hat{J}^2 &= - \left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \operatorname{ctg} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 2 \cos \beta \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \gamma} + \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right) \right],
\end{aligned} \tag{78}$$

поэтому иногда их называют обобщёнными сферическими функциями. Операторы (78) можно рассматривать как операторы углового момента симметричного волчка при описании ядерного вращения (см. ниже). Дифференциальные уравнения

$$\begin{aligned}
\hat{J}_z D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= -M D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma), \\
\hat{J}_{z'} D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= -M' D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma), \\
\hat{J}^2 D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= J(J+1) D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma)
\end{aligned} \tag{79}$$

определяют D -функции Вигнера с точностью до нормировочного и фазового множителей. Для диагональных элементов поворота естественно положить

$$D_{MM'}^J(0,0,0) = \delta_{MM'}, \tag{80.1}$$

$$a \quad D_{MM'}^J(0, \pi, 0) = (-1)^{J+M} \delta_{M-M'}. \tag{80.2}$$

Фазовый выбор для D -функции Вигнера зависит от многих факторов. Например, какая, правая или левая, система координат используется, вокруг каких осей производятся повороты и в какой последовательности, в каком направлении отсчитываются углы (см. рис.3) и т.п.

Свойства D -функций Вигнера:

1) унитарность (обратное преобразование поворота)

$$D_{mm'}^{j*}(\alpha, \beta, \gamma) = D_{m'm}^j(-\gamma, -\beta, -\alpha); \tag{81}$$

2) комплексное сопряжение

$$\begin{aligned}
D_{mm'}^{j*}(\alpha, \beta, \gamma) &= D_{m'm}^j(-\gamma, -\beta, -\alpha) = e^{-im\alpha} d_{m'm}^j(-\beta) e^{-im'\gamma} = \\
&= e^{-im\alpha} (-1)^{m'-m} d_{-m-m'}^j(-\beta) e^{-im'\gamma} = (-1)^{m'-m} D_{-m-m'}^j(\alpha, \beta, \gamma);
\end{aligned} \tag{82}$$

3) условия полноты

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0, 1/2, 1, \dots}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \sum_{m'=-j}^j \frac{2j+1}{16\pi^2} D_{mm'}^{j*}(\alpha_1, \beta_1, \gamma_1) D_{mm'}^j(\alpha_2, \beta_2, \gamma_2) = \\
= \delta(\alpha_1 - \alpha_2) \delta(\cos \beta_1 - \cos \beta_2) \delta(\gamma_1 - \gamma_2).
\end{aligned} \tag{83}$$

D -функции Вигнера представимы в виде произведения трёх сомножителей, каждый из которых зависит от одного угла Эйлера:

$$D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-iM\alpha} d_{MM'}^J(\beta) e^{-iM'\gamma}, \quad (84)$$

где $d_{MM'}^J(\beta)$ - вещественная функция,

$$d_{MM'}^J(\beta) = (-1)^{J+M} [(J+M)!(J-M)!(J+M')!(J-M')]^{1/2} \times \\ \times \sum_k (-1)^k \frac{\left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2k-M-M'} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{2J+M+M'-2k}}{k!(J+M-k)!(J+M'-k)!(k-M-M')}. \quad (85)$$

Суммирование проводится по всем целым неотрицательным числам k от $\max\{0, M'-M\}$ до $\min\{J-M, J+M'\}$.

Связь D -функций Вигнера со сферическими функциями:

$$D_{M0}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2J+1}} (-1)^M Y_{JM}(\beta, \alpha). \quad (86)$$

Рассмотрим сложение угловых моментов двух независимых подсистем, формула (54). В повернутой системе координат:

$$\sum_{\mu_1} D_{m_1 \mu_1}^{j_1} |j_1 \mu_1\rangle \sum_{\mu_2} D_{m_2 \mu_2}^{j_2} |j_2 \mu_2\rangle = \sum_j C(j_1 m_1, j_2 m_2 | jm) \sum_{\mu} D_{m \mu}^j |j \mu\rangle = \\ = \sum_j C(j_1 m_1, j_2 m_2 | jm) \sum_{\mu} D_{m \mu}^j \sum_{\mu_1, \mu_2} C(j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j \mu) |j_1 \mu_1\rangle |j_2 \mu_2\rangle \quad (87)$$

(во втором равенстве использовано, что $|j \mu\rangle = \sum_{\mu_1, \mu_2} C(j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j \mu) |j_1 \mu_1\rangle |j_2 \mu_2\rangle$). Приравнивая коэффициенты при

одинаковых состояниях (полный набор), получаем разложение Клебша – Гордана для обобщённых сферических функций:

$$D_{m_1 \mu_1}^{j_1} D_{m_2 \mu_2}^{j_2} = \sum_{j \mu} C(j_1 m_1, j_2 m_2 | jm) C(j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j \mu) D_{m \mu}^j. \quad (88)$$

Слева значения μ_1, μ_2 фиксированы, поэтому суммирование по $\mu = \mu_1 + \mu_2$ можно опустить. Обратное соотношение,

$$D_{m \mu}^j = \sum_{\mu_1, m_1} C(j_1 m_1, j_2 m_2 | jm) C(j_1 \mu_1, j_2 \mu_2 | j \mu) D_{m_1 \mu_1}^{j_1} D_{m_2 \mu_2}^{j_2} \quad (89)$$

называется формулой сложения обобщённых сферических функций. Она позволяет, зная значения D -функций только для $j = 1/2$ и 1 , вычислить их для любых j .

На основе разложения Клебша – Гордана можно получить рекуррентные соотношения для D -функций. Например,

$$\begin{aligned} \cos \beta D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= \frac{\sqrt{(J^2 - M^2)(J^2 - M'^2)}}{J(2J + 1)} D_{MM'}^{J-1}(\alpha, \beta, \gamma) + \\ &+ \frac{MM'}{J(J + 1)} D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) + \\ &+ \frac{\sqrt{[(J + 1)^2 - M^2][(J + 1)^2 - M'^2]}}{(J + 1)(2J + 1)} D_{MM'}^{J+1}(\alpha, \beta, \gamma), \end{aligned} \quad (90)$$

$$\begin{aligned} \cos \frac{\beta}{2} e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}} D_{M+\frac{1}{2}, M'+\frac{1}{2}}^J(\alpha, \beta, \gamma) &= \\ &= \frac{\sqrt{(J + M + \frac{1}{2})(J + M' + \frac{1}{2})}}{2J + 1} D_{MM'}^{J-\frac{1}{2}}(\alpha, \beta, \gamma) + \\ &+ \frac{\sqrt{(J - M + \frac{1}{2})(J - M' + \frac{1}{2})}}{2J + 1} D_{MM'}^{J+\frac{1}{2}}(\alpha, \beta, \gamma). \end{aligned} \quad (91)$$

Интегралы с D -функциями:

$$\begin{aligned} \int D_{mm'}^j(\alpha, \beta, \gamma) d\theta &= \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma D_{mm'}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \\ &= 8\pi^2 \delta_{j0} \delta_{m0} \delta_{m'0}. \end{aligned} \quad (92)$$

Здесь нужно было воспользоваться стандартным интегралом

$$\int_0^{2\pi} e^{im\alpha} d\alpha = 2\pi \delta_{m0} \text{ и явным видом функции } d_{00}^j(\beta) = P^j(\cos \beta). \text{ Условие}$$

ортонормировки:

$$\int D_{m_1 \mu_1}^{j_1*} D_{m_2 \mu_2}^{j_2} d\theta = \frac{8\pi^2}{2j_1 + 1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{\mu_1 \mu_2} \delta_{m_1 m_2}. \quad (93)$$

Здесь использовано разложение Клебша – Гордана (88), сводящее задачу к вычисленному выше интегралу с одной D -функцией. В сочетании с условием полноты это условие позволяет разложить любую квадратично интегрируемую функцию углов Эйлера в ряд по D -функциям:

$$f(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{j=0, \frac{1}{2}, 1, \dots}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \sum_{m'=-j}^j a_{mm'}^j D_{mm'}^j(\alpha, \beta, \gamma) \quad (94)$$

с коэффициентами

$$a_{mm'}^j = \frac{2j+1}{16\pi^2} \iiint d\alpha \sin \beta d\beta d\gamma f(\alpha, \beta, \gamma) D_{mm'}^{j*}(\alpha, \beta, \gamma). \quad (94.1)$$

Последовательное применение разложения Клебша – Гордана позволяет вычислять интегралы, содержащие три и более D -функций –

$$\int D_{m_2 \mu_2}^{j_2 * } D_{m \mu}^j D_{m_1 \mu_1}^{j_1} d\theta = \frac{8\pi^2}{2j_2 + 1} C(j_1 m_1, j m | j_2 m_2) C(j_1 \mu_1, j \mu | j_2 \mu_2). \quad (95)$$

Эти и подобные интегральные формулы, и их обобщения позволяют проводить вычисления угловых характеристик в ядерной физике аналитически, оставляя численные методы только для радиальных интегралов.

Вращательная инвариантность нарушается во внутренней системе координат, связанной с деформированным ядром. Каждому внутреннему состоянию деформированного ядра соответствует вращательная полоса, отвечающая состояниям с разными значениями полного спина J ¹⁰. Если деформация сохраняет аксиальную симметрию ядра, вращение является плоским, т.е. осуществляется в плоскости, перпендикулярной оси симметрии.

Кроме полного момента J в качестве квантовых чисел можно рассматривать его проекцию M на ось z лабораторной системы координат и проекцию K на ось 3 внутренней системы координат, см. рис. 4. Эти квантовые числа являются канонически сопряжёнными к углам Эйлера и соответствует выбору в качестве коммутирующих операторов $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_3$. Последние два оператора коммутируют, т.к. действуют на разные переменные. Для них нормированная собственная функция (см. определение (78) и условие (93))

$$\Phi_{JMK}(\omega) = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} D_{MK}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (96)$$

где $\omega = \alpha, \beta, \gamma$ – углы Эйлера. Таким образом, D -функцию можно рассматривать как волновую функцию, характеризующую ориентацию

¹⁰ Эта ветвь коллективного движения восстанавливает спонтанно нарушенную симметрию (теорема Голдстоуна).

деформированного ядра в лабораторной системе координат. Зависимость углов Эйлера от времени в (96) определяет характер вращения ядра как целого.

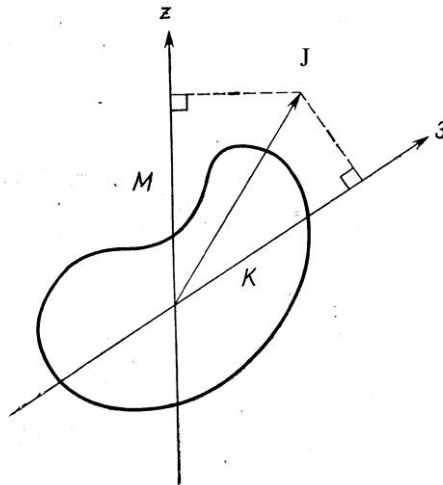


Рис.4. Квантовые числа, описывающие вращение деформированного ядра. Ось z относится к лабораторной системе координат, ось z – к системе координат, связанной с ядром

Если деформация ядра не имеет аксиальной симметрии, волновая функция (96) представляется в виде суперпозиции:

$$\Phi_{JM}(\omega) = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} \sum_K c_K(J) D_{MK}^J(\alpha, \beta, \gamma), \quad (96.1)$$

где коэффициенты c_K зависят от формы ядра.

Задачи и упражнения:

1. Почему вращательная полоса, построенная на основном состоянии чётно-чётного ядра, всегда имеет $K=0$?
2. Энергии вращательных состояний в полосе пропорциональны $J(J+1)$, почему нет линейного по моменту слагаемого?

СЛОЖЕНИЕ ТРЁХ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ.
КОЭФФИЦИЕНТЫ РАКА

Пусть теперь система состоит из трёх независимых подсистем, $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$. Каждая подсистема обладает своим угловым моментом с операторами: $\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}, \hat{j}_2^2, \hat{j}_{2z}, \hat{j}_3^2, \hat{j}_{3z}$. Поскольку взаимодействие между подсистемами отсутствует, можно построить произведения вида $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle$ – это собственные состояния полного набора операторов.

Рассмотрим попарное сложение трёх угловых моментов, рис.5.

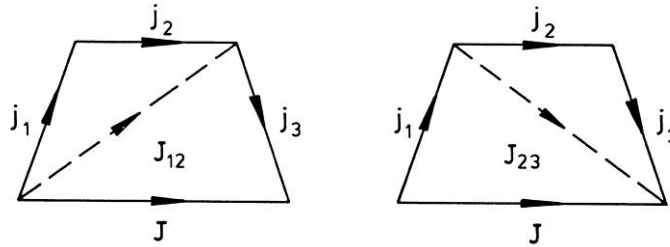


Рис.5. Схемы сложения трёх угловых моментов, промежуточный момент выделен штриховой линией

Первая схема сложения, рис.5 (слева):

$$\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 = \mathbf{j}_{12}, \quad \mathbf{j}_{12} + \mathbf{j}_3 = \mathbf{J} . \quad (97)$$

Для этой схемы полный набор коммутирующих операторов: $\hat{H}, \hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2, (\hat{j}_{12})^2, \hat{j}_3^2, \hat{J}^2$ и \hat{J}_z , а соответствующие собственные функции – $|JM(j_1 j_2 j_{12} j_3)\rangle$, скобками выделен порядок сложения моментов.

Другая схема сложения, рис.5 (справа):

$$\mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3 = \mathbf{j}_{23}, \quad \mathbf{j}_{23} + \mathbf{j}_1 = \mathbf{J} . \quad (98)$$

Полный набор коммутирующих операторов в этом случае: $\hat{H}, \hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2, \hat{j}_3^2, (\hat{j}_{23})^2, \hat{J}^2$ и \hat{J}_z , а соответствующие собственные функции – $|JM(j_2 j_3 j_{23} j_1)\rangle$.

Оба представления связаны унитарным преобразованием:

$$\begin{aligned} |JM(j_1 j_2 j_1 j_3)\rangle &= \sum_{j_{23}} \sqrt{(2j_{12}+1) \cdot (2j_{23}+1)} \cdot W(j_1 j_2 J j_3 | j_{12} j_{23}) \times \\ &\times |JM(j_2 j_3 j_{23} j_1)\rangle, \end{aligned} \quad (99)$$

коэффициенты W которого можно рассматривать как определение коэффициентов Рака. Это преобразование не зависит от ориентации системы координат и поэтому диагонально по M , а сами коэффициенты W не зависят от M .

Рассматривая попарное сложение моментов как в (53), коэффициенты Рака можно связать с коэффициентами Клебша - Гордана:

$$\begin{aligned} W(j_1 j_2 J j_3 | j_{12} j_{23}) &= \frac{1}{\sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)}} \sum_{m_1 m_2 m_3} C(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_{12} m') \times \\ &\times C(j_2 m' j_3 m_3 | JM) \cdot C(j_2 m_2 j_3 m_3 | j_{23} m'') \cdot C(j_{23} m'' j_1 m_1 | JM). \end{aligned} \quad (100)$$

Так как коэффициенты Клебша-Гордана вещественны, коэффициенты Рака также вещественны. Соотношение (100) фиксирует и фазу коэффициентов Рака. Значения всех моментов в коэффициентах Рака являются целыми или полуцелыми неотрицательными числами. Для каждой из четырёх троек моментов должны выполняться правила треугольника, в противном случае $W=0$.

Если один из шести моментов равен 0, коэффициент Рака –

$$W(abcd | 0f) = (-1)^{b+c-f} \frac{\delta_{ab} \delta_{cd}}{\sqrt{(2b+1)(2c+1)}}. \quad (101)$$

Эта формула широко используется в теории при описании S -волнового рассеяния.

Коэффициенты Рака обладают следующими свойствами симметрии:

$$\begin{aligned} W(abcd | ef) &= W(badc | ef) = W(cdab | ef) = W(acbd | fe) = \\ &= (-1)^{e+f-a-d} W(ebcf | ad) = (-1)^{e+f-b-c} W(aefd | bc). \end{aligned} \quad (102)$$

Вместо коэффициентов Рака часто используют $6j$ -символы Вигнера, отличающиеся только выбором фазы:

$$\begin{Bmatrix} abc \\ def \end{Bmatrix} = (-1)^{a+b+d+e} W(abed | cf). \quad (103)$$

Используя свойства симметрии (102) можно убедиться, что $6j$ -символы Вигнера инвариантны при любой перестановке столбцов и при перестановке верхних и нижних элементов в любых двух столбцах:

$$\begin{aligned}
\left\{ \begin{matrix} abc \\ def \end{matrix} \right\} &= \left\{ \begin{matrix} acb \\ dfe \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} bac \\ edf \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} bca \\ efd \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} cab \\ fde \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} cba \\ fed \end{matrix} \right\} = \\
&= \left\{ \begin{matrix} aef \\ dbc \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} afe \\ dcb \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} eaf \\ bdc \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} efa \\ bcd \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} fae \\ cdb \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} fea \\ cbd \end{matrix} \right\} = \dots
\end{aligned} \tag{104}$$

Подобные соотношения связывают $3! \times 4 = 24$ $6j$ -символов¹¹. Если хотя бы один из индексов равен 0, то перестановками столбцов и строк $6j$ -символ можно привести к виду (101) и вычислить.

Унитарность преобразования (99) означает, что его коэффициенты удовлетворяют условиям ортогональности и нормировки:

$$\begin{aligned}
\sum_c (2c+1)(2f+1) \left\{ \begin{matrix} abc \\ def \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} abc \\ def \end{matrix} \right\} &= \delta_{ff}, \\
\sum_f (2c+1)(2f+1) \left\{ \begin{matrix} abc \\ def \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} abc \\ def \end{matrix} \right\} &= \delta_{cc}.
\end{aligned} \tag{105}$$

В преобразовании (99), последовательно используя в его правой и левой части определение коэффициентов Клебша – Гордана (53), можно вернуться к первоначальному представлению $|j_1 m_1, j_2 m_2, j_3 m_3\rangle$. Приравнявая коэффициенты при одинаковых состояниях (полный набор), получим полезное соотношение:

$$\begin{aligned}
&C(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m_1 + m_2) \cdot C(j m_1 + m_2, j_3 m_3 | j_4 m_1 + m_2 + m_3) = \\
&= \sum_s \left\{ \sqrt{(2s+1)(2j+1)} \cdot C(j_2 m_2, j_3 m_3 | s m_2 + m_3) \times \right. \\
&\quad \left. \times C(j_1 m_1, s m_2 + m_3 | j_4 m_1 + m_2 + m_3) \cdot W(j_1 j_2 j_4 j_3 | j s) \right\},
\end{aligned} \tag{106}$$

которое используются для вычисления сложных выражений, содержащих коэффициенты Клебша – Гордана.

Пусть дана сумма с чётным числом коэффициентов Клебша – Гордана. Парно выбирая коэффициенты C из суммы и используя их симметрию, нужно привести аргументы к виду левой части тождества (106). Далее следует выразить эти пары согласно (106) через коэффициенты Рака и другую пару коэффициентов Клебша – Гордана, при этом суммы

¹¹ Если сопоставить шести символам $\left\{ \begin{matrix} abc \\ def \end{matrix} \right\}$ шесть сторон правильного тетраэдра, то $6j$ -символ не изменяется при любых перестановках ребер, сохраняющих тетраэдр. Четыре грани тетраэдра отражают четыре правила «треугольника» для моментов.

расцепятся по схеме $\sum_{m_i} C \cdot C \cdot C \cdot C \rightarrow \sum W \cdot W \cdot \sum_{m'_i} C \cdot C \sum_{m''_i} C \cdot C$. Для них

следует использовать соотношения ортонормировки. В результате останутся только символы Кронекера и коэффициенты Рака. Последних будет вдвое меньше, чем коэффициентов Клебша – Гордана в исходном выражении. Значения коэффициентов Рака табулированы во многих справочниках.

Для $6j$ -символов, или коэффициентов Рака, существует несколько независимых алгебраических выражений. Сам Рака предложил следующее:

$$\left\{ \begin{matrix} abc \\ def \end{matrix} \right\} = \Delta(abc)\Delta(cde)\Delta(aef)\Delta(bdf) \times \\ \times \sum_n (-1)^n (n+1)! \sqrt{\frac{(n-a-b-c)!(n-c-d-e)!(n-a-e-f)!}{\times (n-b-d-f)!(a+b+d+e-n)! \times (a+c+d+f-n)!(b+c+e+f-n)!}}, \quad (107)$$

где n – целое неотрицательное число, при котором все факториалы имеют смысл, а Δ -символ задан равенством (65).

Выражения для $6j$ -символов, когда один из индексов равен $\frac{1}{2}$ или 1, приведены в таблицах 4 и 5.

Таблица 3. $6j$ -символы $\left\{ \begin{matrix} a & bc \\ \frac{1}{2} & ef \end{matrix} \right\}$, $s = a + b + c$.

f	$e = c + \frac{1}{2}$
$b + \frac{1}{2}$	$(-1)^{s+1} \frac{1}{2} \left[\frac{(s+2)(s-2a+1)}{(2b+1)(b+1)(2c+1)(c+1)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$b - \frac{1}{2}$	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{(s-2c)(s-2b+1)}{b(2b+1)(2c+1)(c+1)} \right]^{\frac{1}{2}}$
f	$e = c - \frac{1}{2}$
$b + \frac{1}{2}$	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{(s-2c+1)(s-2b)}{(2b+1)(b+1)c(2c+1)} \right]^{\frac{1}{2}}$
$b - \frac{1}{2}$	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{(s+1)(s-2a)}{b(2b+1)c(2c+1)} \right]^{\frac{1}{2}}$

Таблица 4. $6j$ -символы $\begin{Bmatrix} abc \\ 1 ef \end{Bmatrix}$, $s = a + b + c$.

f	$e = c + 1$
$b + 1$	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{(s+2)(s+3)(s-2a+1)(s-2a+2)}{(2b+1)(b+1)(2b+3)(2c+1)(c+1)(2c+3)} \right]^{1/2}$
b	$(-1)^{s+1} \frac{1}{2} \left[\frac{(s+2)(s-2c)(s-2b+1)(s-2a+1)}{b(2b+1)(b+1)(2c+1)(c+1)(2c+3)} \right]^{1/2}$
$b - 1$	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{(s-2c-1)(s-2c)(s-2b+1)(s-2b+2)}{(2b-1)b(2b+1)(2c+1)(c+1)(2c+3)} \right]^{1/2}$
f	$e = c$
$b + 1$	$(-1)^{s+1} \frac{1}{2} \left[\frac{(s+2)(s-2c+1)(s-2b)(s-2a+1)}{(2b+1)(b+1)(2b+3)c(2c+1)(c+1)} \right]^{1/2}$
b	$(-1)^{s+1} \frac{1}{2} \left[\frac{-a(a+1)+b(b+1)+c(c+1)}{b(2b+1)(b+1)c(2c+1)(c+1)} \right]^{1/2}$
$b - 1$	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{(s+1)(s-2c)(s-2b+1)(s-2a)}{(2b-1)b(2b+1)c(2c+1)(c+1)} \right]^{1/2}$
f	$e = c - 1$
$b + 1$	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{(s-2c+1)(s-2c+2)(s-2b-1)(s-2b)}{(2b+1)(b+1)(2b+3)(2c-1)c(2c+1)} \right]^{1/2}$
b	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{(s+1)(s-2c+1)(s-2b)(s-2a)}{b(2b+1)(b+1)(2c-1)c(2c+1)} \right]^{1/2}$
$b - 1$	$(-1)^s \frac{1}{2} \left[\frac{s(s+1)(s-2a-1)(s-2a)}{(2b-1)b(2b+1)(2c-1)c(2c+1)} \right]^{1/2}$

ВЫСШИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕСВЯЗКИ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ

$9j$ -символы Вигнера или коэффициенты Фано можно определить как коэффициенты преобразования между различными схемами сложения четырёх угловых моментов (рис.6):

$$\langle j_1 j_2(j_{12}) j_3 j_4(j_{34}) j m | j_1 j_3(j_{13}) j_2 j_4(j_{24}) j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)(2j_{34}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}. \quad (108)$$

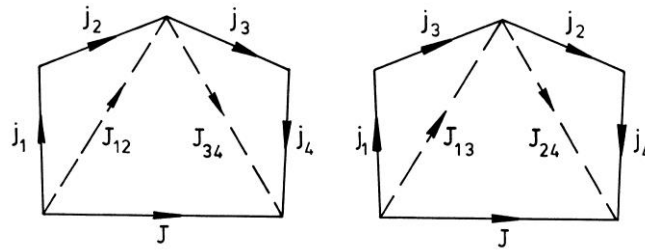


Рис.6. Схемы сложения четырёх угловых моментов

Они также могут быть представлены в виде суммы произведений шести коэффициентов Клебша – Гордана:

$$\sum_{m_i m_k} \left\{ C(j_1 m_1, j_2 m_2 | j_{12} m_{12}) C(j_3 m_3, j_4 m_4 | j_{34} m_{34}) C(j_{12} m_{12}, j_{34} m_{34} | j m) \times \right. \\ \left. \times C(j_1 m_1, j_3 m_3 | j_{13} m_{13}) C(j_2 m_2, j_4 m_4 | j_{24} m_{24}) C(j_{13} m_{13}, j_{24} m_{24} | j' m') \right\} = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)(2j_{34}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}. \quad (109)$$

В специальной литературе приводятся свойства коэффициентов Фано и их явный вид. Здесь отметим только их связь с $6j$ -символами:

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & j \end{Bmatrix} = \sum_x (-1)^{2x} (2x+1) \begin{Bmatrix} abc \\ f j x \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} def \\ b x h \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} g h f \\ x a d \end{Bmatrix} \quad (110)$$

Для систем, содержащих более четырёх угловых моментов, коэффициенты пересвязки можно выразить через инварианты с более высокой симметрией, $12j$ -, $15j$ -символы и т.д. Они обладают такими же свойствами, как $6j$ - и $9j$ -символы, и могут быть выражены через суммы произведений коэффициентов более низкого порядка.

ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.
ТЕОРЕМА ВИГНЕРА – ЭККАРТА

Неприводимым тензорным оператором \hat{T}_k ранга k (k – целое или полуцелое) называется совокупность $(2k+1)$ операторов \hat{T}_{kx} ($x=-k, -k+1, \dots, k-1, k$), удовлетворяющих следующим коммутационным соотношениям с циклическими компонентами полного углового момента $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_{\pm 1}, \hat{T}_{kx}] &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\pm i\delta} \sqrt{k(k+1) - x(x+1)} \hat{T}_{kx\pm 1}, \\ [\hat{J}_0, \hat{T}_{kx}] &= x \hat{T}_{kx}. \end{aligned} \quad (111)$$

Операторы \hat{T}_{kx} называются стандартными компонентами неприводимого тензорного оператора. Скалярный оператор, например, является неприводимым тензорным оператором ранга 0. Векторный оператор – неприводимый тензорный оператор ранга 1, его циклические компоненты являются стандартными компонентами.

Теорема Вигнера – Экарта определяет зависимость матричного элемента неприводимого тензорного оператора произвольного вида от ориентации системы координат, т.е. от проекций m, m' и x ,

$$\langle n' j' m' | \hat{T}_{kx} | n j m \rangle = (-1)^{2k} C(jm, kx | j' m') \frac{\langle n' j' | \hat{T}_k | n j \rangle}{\sqrt{2j'+1}}. \quad (112)$$

Здесь $|njm\rangle$ – волновые функции, описывающие состояние квантово-механической системы с определённым угловым моментом j и его проекцией m на ось квантования (n – совокупность остальных квантовых чисел, характеризующих состояние системы). Инвариантный множитель $\langle n' j' | \hat{T}_k | n j \rangle$ называется приведённым матричным элементом. При таком

определении приведённый матричный элемент единичного оператора \hat{I} –

$$\langle n' j' | \hat{I} | n j \rangle = \sqrt{2j+1} \delta_{nm} \delta_{j'j}. \quad (113)$$

Теорема Вигнера – Экарта приводит к следующим правилам сумм:

$$\sum_{mx} |\langle n' j' m' | \hat{T}_{kx} | n j m \rangle|^2 = \frac{|\langle n' j' | \hat{T}_k | n j \rangle|^2}{2j'+1}, \quad (114.1)$$

$$\sum_{m'x} \left| \langle n' j' m' | \hat{T}_{kx} | njm \rangle \right|^2 = \frac{\left| \langle n' j' | \hat{T}_k | nj \rangle \right|^2}{2j+1}, \quad (114.2)$$

$$\sum_{mm'} \left| \langle n' j' m' | \hat{T}_{kx} | njm \rangle \right|^2 = \frac{\left| \langle n' j' | \hat{T}_k | nj \rangle \right|^2}{2k+1}. \quad (114.3)$$

Из двух неприводимых тензорных операторов \hat{P}_{ay} и \hat{Q}_{bz} можно построить прямое произведение $\hat{P}_{ay} \cdot \hat{Q}_{bz}$ и неприводимое произведение $\{\hat{P}_a \otimes \hat{Q}_b\}_{cw}$ ранга c . Матричные элементы прямого тензорного произведения –

$$\begin{aligned} \langle n' j' m' | \hat{P}_{ay} \cdot \hat{Q}_{bz} | njm \rangle &= \frac{(-1)^{2a+2b}}{\sqrt{2j'+1}} \sum_{n_1 j_1 m_1} C(jm, bz | j_1 m_1) \times \\ &\times C(j_1 m_1, ay | j' m') \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}} \langle n' j' | \hat{P}_a | n_1 j_1 \rangle \langle n_1 j_1 | \hat{Q}_b | nj \rangle. \end{aligned} \quad (115)$$

Матричные элементы неприводимого тензорного произведения –

$$\begin{aligned} \langle n' j' m' | \{\hat{P}_a \otimes \hat{Q}_b\}_{cw} | njm \rangle &= (-1)^{j'+j-c} \sqrt{\frac{2c+1}{2j'+1}} \times \\ &\times C(jm, cw | j' m') \sum_{n_1 j_1} \left\{ \begin{matrix} abc \\ jj' j_1 \end{matrix} \right\} \langle n' j' | \hat{P}_a | n_1 j_1 \rangle \langle n_1 j_1 | \hat{Q}_b | nj \rangle. \end{aligned} \quad (116)$$

Последняя формула позволяет вычислять матричные элементы скалярного произведения двух тензоров ранга a , если положить $c = 0$:

$$\begin{aligned} \langle n' j' m' | (\hat{P}_a \cdot \hat{Q}_b) | njm \rangle &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \frac{1}{2j+1} \times \\ &\times \sum_{n_1 j_1} (-1)^{-j+j_1} \langle n' j' | \hat{P}_a | n_1 j_1 \rangle \langle n_1 j_1 | \hat{Q}_b | nj \rangle. \end{aligned} \quad (117)$$

Из трёх неприводимых тензорных операторов, \hat{P}_{ay} , \hat{Q}_{bz} и \hat{R}_{dw} , можно построить уже пять произведений. Вычисление матричных элементов для них сводится к последовательному применению формул (115) и (116).

В заключение приведём примеры вычисления матричных элементов основных операторов и их тензорных произведений.

Единичный оператор \hat{I} представляет собой неприводимый тензор нулевого ранга, не действующий на пространственные и спиновые переменные. В любом представлении отличны от нуля и равны единице только диагональные по всем квантовым числам матричные элементы

$$\langle \lambda' | \hat{I} | \lambda \rangle = \langle \lambda' | \lambda \rangle = \delta_{\lambda' \lambda}. \quad (118)$$

Приведённые матричные элементы единичного оператора:

$$\begin{aligned} \langle l | \hat{I} | l \rangle &= \sqrt{2l+1}, \\ \langle s | \hat{I} | s \rangle &= \sqrt{2s+1}, \\ \langle l' s' J | \hat{I} | l s J \rangle &= \sqrt{2J+1} \delta_{l'l} \delta_{s's}. \end{aligned} \quad (119)$$

Единичный векторный оператор $\hat{\mathbf{n}}_1(\vartheta, \varphi)$ действует только на угловые переменные. Матричные элементы его циклических компонент,

$$\langle l' m' | \hat{n}_{1\mu} | l m \rangle = \frac{\langle l' | \hat{n}_1 | l \rangle}{\sqrt{2l'+1}} C(lm, 1\mu | l' m'), \quad (120)$$

отличны от нуля только, если $l' = l \pm 1$, а приведённый матричный элемент

$$\langle l' | \hat{n}_1 | l \rangle = \sqrt{2l+1} C(l0, 10 | l' 0), \quad (120.1)$$

Матричные элементы прямого произведения циклических компонент двух операторов $\hat{\mathbf{n}}_1(\vartheta, \varphi)$

$$\begin{aligned} \langle l' m' | \hat{n}_{1\mu} \hat{n}_{1\nu} | l m \rangle &= \frac{(-1)^\mu}{3} \delta_{l'l} \delta_{mm'} \delta_{\mu-\nu} + \\ &+ \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{2l+1}{2l'+1} C(l0, 20 | l' 0) C(1\mu, 1\nu | 2\kappa) C(lm, 2\kappa | l' m'). \end{aligned} \quad (121)$$

отличны от нуля, только если $l' = l$, $l \pm 2$.

Матричные элементы циклических компонент оператора $\nabla \equiv \hat{\nabla}_1(r, \vartheta, \varphi)$

$$\langle n' l' m' | \hat{\nabla}_{1\mu} | n l m \rangle = \frac{\langle n' l' | \hat{\nabla}_1 | n l \rangle}{\sqrt{2l'+1}} C(lm, 1\mu | l' m'), \quad (122)$$

где

$$\langle n' l' | \hat{\nabla}_1 | n l \rangle = \sqrt{2l+1} A_{n'l', nl} \delta_{l'l+1} - \sqrt{l} B_{n'l', nl} \delta_{l'l-1}, \quad (123)$$

$$A_{n'l', nl} = \int_0^\infty \Psi_{n'l'}^*(r) \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right) \Psi_{nl}(r) r^2 dr, \quad (123.1)$$

$$B_{n'l',nl} = \int_0^{\infty} \Psi_{n'l'}^*(r) \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right) \Psi_{nl}(r) r^2 dr, \quad (123.2)$$

а $\Psi_{nl}(r)$ - радиальная часть волновой функции. Матричные элементы (122) отличны от нуля только, если $l' = l \pm 1$. В развёрнутом виде:

$$\langle n'l+1m' | \hat{V}_{1\pm 1} | nlm \rangle = \sqrt{\frac{(l \pm m + 1)(l \pm m + 2)}{2(2l+1)(2l+3)}} A_{n'l+1,nl} \delta_{m'm \pm 1}, \quad (124.1)$$

$$\langle n'l+1m' | \hat{V}_{10} | nlm \rangle = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} A_{n'l+1,nl} \delta_{m'm}, \quad (124.2)$$

$$\langle n'l-1m' | \hat{V}_{1\pm 1} | nlm \rangle = -\sqrt{\frac{(l \mp m - 1)(l \mp m)}{2(2l+1)(2l-1)}} B_{n'l-1,nl} \delta_{m'm \pm 1}, \quad (124.3)$$

$$\langle n'l-1m' | \hat{V}_{10} | nlm \rangle = \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)}} B_{n'l-1,nl} \delta_{m'm}. \quad (124.4)$$

Матричные элементы декартовых компонент оператора $\hat{V}_1(r, \vartheta, \varphi)$:

$$\begin{aligned} \langle n'l'm \pm 1 | \hat{V}_x | nlm \rangle &= \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(l \pm m + 1)(l \pm m + 2)}{(2l+1)(2l+3)}} A_{n'l+1,nl} \delta_{l'l \pm 1} \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(l \mp m - 1)(l \mp m)}{(2l+1)(2l-1)}} B_{n'l-1,nl} \delta_{l'l-1}, \end{aligned} \quad (125.1)$$

$$\begin{aligned} \langle n'l'm \pm 1 | \hat{V}_y | nlm \rangle &= \frac{i}{2} \sqrt{\frac{(l \pm m + 1)(l \pm m + 2)}{(2l+1)(2l+3)}} A_{n'l+1,nl} \delta_{l'l \pm 1} - \\ &- \frac{i}{2} \sqrt{\frac{(l \mp m - 1)(l \mp m)}{(2l+1)(2l-1)}} B_{n'l-1,nl} \delta_{l'l-1}, \end{aligned} \quad (125.2)$$

$$\begin{aligned} \langle n'l'm | \hat{V}_z | nlm \rangle &= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} A_{n'l+1,nl} \delta_{l'l+1} + \\ &+ \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)}} B_{n'l-1,nl} \delta_{l'l-1}, \end{aligned} \quad (125.3)$$

остальные равны нулю.

Матричные элементы угловой части оператора $\hat{V}_1(r, \vartheta, \varphi)$,

$$\hat{V}_\Omega = -i \mathbf{n} \times \hat{\mathbf{L}}, \quad (126)$$

которая не зависит от радиуса r , имеют более простой вид:

$$\langle l' m' | (\hat{\nabla}_\Omega)_{l\mu} | l m \rangle = \frac{\langle l' | \| (\hat{\nabla}_\Omega)_l \| | l \rangle}{\sqrt{2l'+1}} C(lm, 1\mu | l' m'), \quad (127)$$

где

$$\langle l' | \| (\hat{\nabla}_\Omega)_l \| | l \rangle = -\left\{ \sqrt{l+1} \delta_{l'l+1} + (l+1) \sqrt{l} \delta_{l'l-1} \right\}. \quad (128)$$

Последнюю формулу можно получить из (123), если сделать формальную замену: $A_{n'l',nl} \rightarrow -l$, $B_{n'l',nl} \rightarrow l+1$. Эта замена делает справедливыми формулы (124), (125) для оператора $(\nabla_\Omega)_l$.

Матричные элементы оператора полного углового момента $\hat{\mathbf{J}}_1 \equiv \hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ имеют вид

$$\langle l' s' J' M' | \hat{J}_{1\mu} | l s J M \rangle = \frac{\langle l' s' J' | \| \hat{\mathbf{J}}_1 \| | l s J \rangle}{\sqrt{2J'+1}} C(JM, 1\mu | J' M'), \quad (129)$$

где

$$\langle l' s' J' | \| \hat{\mathbf{J}}_1 \| | l s J \rangle = \delta_{ll'} \delta_{ss'} \delta_{JJ'} \sqrt{J(J+1)(2J+1)}. \quad (130)$$

В развёрнутой записи, опуская тривиальные индексы l и s ,

$$\langle JM \pm 1 | \hat{J}_{1\pm 1} | JM \rangle = \mp \sqrt{\frac{(J \pm M + 1)(J \mp M)}{2}}, \quad (131.1)$$

$$\langle JM | \hat{J}_{10} | JM \rangle = M, \quad (131.2)$$

остальные матричные элементы равны нулю. Ненулевые матричные элементы декартовых компонент оператора $\hat{\mathbf{J}}_1$:

$$\langle JM \pm 1 | \hat{J}_x | JM \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(J \pm M + 1)(J \mp M)}, \quad (132.1)$$

$$\langle JM \pm 1 | \hat{J}_y | JM \rangle = \mp \frac{i}{2} \sqrt{(J \pm M + 1)(J \mp M)}, \quad (132.2)$$

$$\langle JM | \hat{J}_z | JM \rangle = M. \quad (132.3)$$

Матричные элементы оператора квадрата полного углового момента –

$$\langle J' M' | \hat{J}^2 | J M \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} J(J+1). \quad (133)$$

Матричные элементы операторов орбитального момента $\hat{\mathbf{L}}_1 \equiv \hat{\mathbf{L}}$ или спина $\hat{\mathbf{S}}_1 \equiv \hat{\mathbf{S}}$ получаются из выражений (129-133) после замен

$J \rightarrow l, M \rightarrow m, \hat{J}_{1\mu} \rightarrow \hat{L}_{1\mu}$ или $J \rightarrow s, M \rightarrow m_s, \hat{J}_{1\mu} \rightarrow \hat{S}_{1\mu}$,

соответственно.

Матричные элементы оператора сферической функции $\hat{Y}_{\lambda\nu} \equiv Y_{\lambda\nu}(\vartheta, \varphi)$:

$$\langle l'm' | \hat{Y}_{\lambda\mu} | lm \rangle = \frac{\langle l' \| \hat{\mathbf{Y}}_{\lambda} \| l \rangle}{\sqrt{2l'+1}} C(lm, \lambda\nu | l'm'), \quad (134)$$

где

$$\langle l' \| \hat{\mathbf{Y}}_{\lambda} \| l \rangle = \sqrt{\frac{(2\lambda+1)(2l+1)}{4\pi}} C(l0, \lambda0 | l'0). \quad (135)$$

Матричные элементы произведений операторов $\hat{\mathbf{V}}_{\Omega}$ и $\hat{\mathbf{Y}}_{\lambda}$:

$$\begin{aligned} \langle l'm' | (\hat{\mathbf{V}}_{\Omega})_{1\mu} \hat{Y}_{\lambda\nu} | lm \rangle = & -\sqrt{\frac{(2\lambda+1)(2l+1)}{4\pi(2l'+1)}} \times \\ & \left[\begin{aligned} & (l'-1) \sqrt{\frac{l'}{2l'-1}} C(l0, \lambda0 | l'-10) C(lm, \lambda\nu | l'-1m+\nu) \times \\ & \times C(l'-1m+\nu, 1\mu | l'm') + (l'+2) \sqrt{\frac{l'+1}{2l'+3}} C(l0, \lambda0 | l'+10) \times \\ & \times C(lm, \lambda\nu | l'+1m+\nu) C(l'+1m+\nu, 1\mu | l'm') \end{aligned} \right] \quad (136) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle l'm' | \{ (\hat{\mathbf{V}}_{\Omega})_1 \otimes \hat{\mathbf{Y}}_{\lambda} \}_{\lambda'\nu'} | lm \rangle = & (-1)^{\lambda'+l'+l} \sqrt{\frac{(2\lambda+1)(2l+1)(2\lambda'+1)}{4\pi(2l'+1)}} \times \\ & \times \sum_k \langle l' \| (\hat{\mathbf{V}}_{\Omega})_1 \| k \rangle C(l0, \lambda0 | k0) \left\{ \begin{matrix} \lambda & 1 & \lambda' \\ l' & l & k \end{matrix} \right\} C(lm, \lambda'\nu' | l'm'). \quad (137) \end{aligned}$$

Матричные элементы более сложных операторов могут быть получены из общих выражений (115) и (116) с использованием рассмотренных примеров.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Произвольный поворот координатной системы относительно её начала $S(x, y, z) \rightarrow S'(x', y', z')$ определяется тремя параметрами, описывающими последовательные повороты вокруг координатных осей. Для этого чаще всего используют углы Эйлера α, β, γ , см. рис.3. При повороте системы координат длина векторов остаётся неизменной, но меняются углы ϑ, φ , определяющие их направление. Связь углов ϑ, φ и ϑ', φ' даётся формулами

$$\begin{aligned} \cos \vartheta' &= \cos \vartheta \cos \beta + \sin \vartheta \sin \beta \cos(\varphi - \alpha), \\ \operatorname{ctg}(\varphi' + \gamma) &= \operatorname{ctg}(\varphi - \alpha) \cos \beta - \frac{\operatorname{ctg} \vartheta \sin \beta}{\sin(\varphi - \alpha)}. \end{aligned} \quad (138.1)$$

Обратные соотношения:

$$\begin{aligned} \cos \vartheta &= \cos \vartheta' \cos \beta - \sin \vartheta' \sin \beta \cos(\varphi' + \gamma), \\ \operatorname{ctg}(\varphi - \alpha) &= \operatorname{ctg}(\varphi' + \gamma) \cos \beta + \frac{\operatorname{ctg} \vartheta' \sin \beta}{\sin(\varphi' + \gamma)}. \end{aligned} \quad (138.2)$$

Среди других наборов параметров поворота системы координат используют направление оси поворота $\mathbf{n}(\Theta, \Phi)$ (2 параметра) и угол поворота ω (1 параметр), рис. 7.

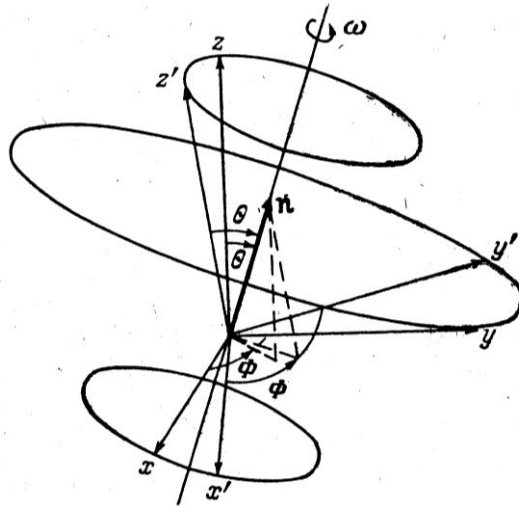


Рис. 7. Поворот системы координат на угол ω вокруг оси $\mathbf{n}(\Theta, \Phi)$

Направляющие косинусы орта $\mathbf{n}(\Theta, \Phi)$ одинаковы в исходной и повернутой системах координат:

$$\begin{aligned}\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_x &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}'_x = \sin \Theta \cos \Phi, \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_y &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}'_y = \sin \Theta \sin \Phi, \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}'_z = \cos \Theta.\end{aligned}\quad (139)$$

Для векторов, направление которых не совпадает с направлением \mathbf{n} , сферические углы меняются при повороте системы координат. Связь углов ϑ, φ и ϑ', φ' даётся более громоздкими формулами по сравнению с (138) и опущена здесь. Использование параметров $\mathbf{n}(\Theta, \Phi)$ и ω позволяет записать преобразование радиус-вектора \mathbf{r} в компактном виде:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}' &= \mathbf{r} \cos \omega + \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})(1 - \cos \omega) + [\mathbf{n} \times \mathbf{r}] \sin \omega, \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}' \cos \omega + \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}')(1 - \cos \omega) - [\mathbf{n} \times \mathbf{r}'] \sin \omega.\end{aligned}\quad (140)$$

Опущенные формулы преобразования от ϑ, φ к ϑ', φ' и наоборот получаются при проектировании (140) на координатные оси.

Углы ω, Θ, Φ выражаются через углы Эйлера, и наоборот:

$$\cos \frac{\omega}{2} = \cos \frac{\beta}{2} \cos \frac{\alpha + \gamma}{2}, \quad \operatorname{tg} \Theta = \frac{\operatorname{tg} \frac{\beta}{2}}{\sin \frac{\alpha + \gamma}{2}}, \quad \Phi = \frac{\pi}{2} + \frac{\alpha - \gamma}{2}, \quad (141)$$

$$\sin \frac{\beta}{2} = \sin \Theta \sin \frac{\omega}{2}, \quad \operatorname{tg} \frac{\alpha + \gamma}{2} = \cos \Theta \operatorname{tg} \frac{\omega}{2}, \quad \frac{\alpha - \gamma}{2} = \Phi - \frac{\pi}{2}.$$

Якобиан этого преобразования –

$$\left\| \frac{\partial(\alpha, \beta, \gamma)}{\partial(\omega, \Theta, \Phi)} \right\| = \left\| \frac{\partial(\omega, \Theta, \Phi)}{\partial(\alpha, \beta, \gamma)} \right\|^{-1} = \frac{4 \sin \Theta}{\sin \beta} \sin^2 \frac{\omega}{2}. \quad (142)$$

Преобразование квантово-механических величин при повороте системы координат определяется операторами поворота $\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma)$ или $\hat{U}(\omega, \Theta, \Phi)$.

Оператор $\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma)$ может быть записан в виде

$$\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\gamma \hat{J}_z) \exp(-i\beta \hat{J}_y) \exp(-i\alpha \hat{J}_z), \quad (143)$$

где \hat{J}_i – проекции оператора полного углового момента. Оператор

$$\hat{U}(\omega, \Theta, \Phi) = \exp(-i\omega \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}), \quad (144)$$

где $\hat{\mathbf{J}}$ – оператор полного углового момента. Эти операторы являются унитарными. Заметим, что $\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) \equiv \hat{U}(\omega, \Theta, \Phi)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Бор О., Моттelson Б.** Структура атомного ядра, т.1. М.: «Мир», 1971 – 456 с.
2. **Варшалович Д.А., Москалёв А.Н., Херсонский В.К.** Квантовая теория углового момента. Л.: «Наука», 1975 – 439 с.
3. **Давыдов А.С.** Квантовая механика. М.: «Наука», 1973 – 704 с.
4. **Князьков О.М.** Лекции по теории ядерных реакций. СПб.: Издательство ПИЯФ РАН, 2004 – 119 с.
5. **Мессиа А.** Квантовая механика, т.2. М.: Главная редакция физико-математической литературы, 1979 – 584 с.
6. **Таулес Д.** Квантовая механика систем многих частиц. М.: «Мир», 1975 – 380 с.
7. **Ring P., Schuck P.** The Nuclear Many-Body Problem. N.Y.: Springer-Verlag, 1980 – 716 p.
8. **Heyde K.L.G.** The Nuclear Shell Model. Berlin: Springer-Verlag, 1990 – 376 p.