

Математические основы
Квантовой Механики (осень 2020). = 1 =

Лекция № 9

Рассмотрим подробнее задачу о частице в центральном потенциале. Классическому гамильтониану этот модел

$$H(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$$

отвечает квантовый оператор (в координатном представлении), действующий в $L_2(\mathbb{R}^3)$:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + V(r).$$

Симметричное уравнение Шредингера, или уравнение на собственные функции гамильтониана $\hat{H}\psi = E\psi$ запишем в

виде
$$-\Delta\psi + (U(r) - E)\psi(\vec{x}) = 0,$$

где $U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r), \quad E = \frac{2m}{\hbar^2} E.$

В сферических координатах $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ оператор Лапласа $\Delta = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$ имеет

вид
$$-\Delta = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{r^2}.$$

Здесь $\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_3^2$ и $= 2 =$

$\hat{S}_k = \frac{1}{\hbar} \hat{J}_k = \frac{1}{\hbar} \epsilon_{krs} \hat{q}_r \hat{p}_s$ — "безразмерные" компоненты углового момента:

$$[\hat{S}_k, \hat{S}_r] = i \epsilon_{krj} \hat{S}_j.$$

Поскольку $[\hat{H}, \hat{S}^2] = 0$, то собственные функции \hat{H} будут искать среди собственных функций оператора \hat{S}^2 :

$$\hat{S}^2 Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = \ell(\ell+1) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{S}_3 Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = m Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, -\ell \leq m \leq \ell.$$

Поскольку \hat{S}^2 зависит только от угловых переменных, то $\psi(r, \vartheta, \varphi) = \Phi(r) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$ — собствен. функции \hat{S}^2 при $\Phi(r)$.

Подставляя такое произведение ΦY_ℓ^m в уравнение Шредингера, получим:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \Phi(r) + (\epsilon - u(r)) \Phi(r) = 0 \right]$$

Напомним, что решение ищем в классе функций $\Phi(r)$ таких, что:

$$\lim_{r \rightarrow 0} r \Phi(r) = 0 \quad \text{и} \quad \int_0^\infty r^2 |\Phi(r)|^2 dr < \infty.$$

Кроме того, будем рассматривать $l=3$ потенциалы $V(z)$, у которых сингулярность (взрывная) в $z=0$ слабее $\frac{1}{z^2}$:

$$\boxed{\lim_{z \rightarrow 0} z^2 V(z) = 0.}$$

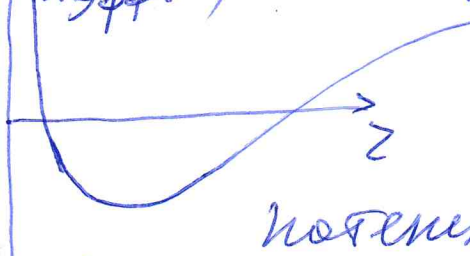
Такое ограничение позволит считать формально общие выводы о поведении собственных функций и, соответственно, все физические фазовые потенциалы удовлетворяют этому условию.

Введём новую функцию $y(z) = z\phi(z) \Rightarrow$
 $\Rightarrow y(0) = 0, \int_0^\infty |y(z)|^2 dz < \infty.$

Подставляя $\phi = \frac{y}{z}$ в радиальное уравнение Шредингера, получим для $y(z)$:

$$\boxed{\frac{d^2 y(z)}{dz^2} + \left(\epsilon - \left(U(z) + \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right) y(z) = 0, \quad \begin{matrix} (*) \\ (*) \end{matrix}}$$

$U \approx \phi\phi(z)$ $U \approx \phi\phi(z)$ — эффективный потенциал.

 Поведение $U \approx \phi\phi$ при $z \rightarrow \infty$ определяется исходным потенциалом $U(z)$, а поведение в $z=0$ ($U \approx \phi\phi \rightarrow +\infty$) — обеспечивается $l \neq 0$

как раз условием $\lim_{z \rightarrow 0} z^2 U(z) = 0.$

Радиальное уравнение $(*)$ с условием $\int_0^\infty |y(z)|^2 dz < \infty$

Совпадает с моделью частицы $= \hbar =$
в одном измерении, движущаяся в
эффективном потенциале $U_{\text{эф}}(z)$. Здесь
важно $U(z) \rightarrow \infty$ при $z \rightarrow 0$:

Все наши выводы об одномерном спектре
справедливы и здесь с некоторыми уточ-
нениями:

- Пусть $U(z) \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$. Тогда при
 $E > 0$ нормируемых собств. функций нет.
Есть ограниченные решения, осциллирую-
щие при $z \rightarrow \infty$ (обобщенные собств. ф-ции).
Отличие от одномерного случая: при $\forall E > 0$
решения ψ вырождены, т.к. \exists решение
с данной энергией и любым значением l .

- При $E < 0$: при фиксированном l
собственным значением E_{nl} невырождены.
Каждому E_{nl} отвечает одно нормиру-
емое решение $\psi_{nl}(z)$. Если потенциал
короткодействующий: $\lim_{z \rightarrow \infty} z^2 V(z) = 0$,
то количество дискретных уровней —
конечно. Если дальнодействующий, т.е.
убывает при $z \rightarrow \infty$ медленнее $1/z^2$,
то дискретных уровней ∞ число и они
существуют в районе $E = 0$.

Это же касается собственных функций $\Delta u = -\lambda u$ гамильтониана \hat{H} , отвечающих E_{nl} :

$$\psi_{nlm} = \frac{Y_{nl}(z)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi),$$

то $\forall E_{nl}$ ~~на~~ соответствует по меньшей мере $2l+1$ собств. функции (по числу значений $-l \leq m \leq l$). В некоторых случаях (кулоновский потенциал, изотропный гармонический осциллятор) степень вырождения выше, т.к. орбитальную энергию E могут отвечать несколько l : $E_{nl} = E_{n'l}$.

Внесем теперь поведение $y_l(z)$ при $z \rightarrow 0$. Умножим (*) на z^2 и оставим в области малых z главные слагаемые (мы напоминаем, что $z^2 u(z) \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$):

$$z^2 y_l''(z) - l(l+1)y_l(z) \approx 0.$$

Есть есть 2 решения: $y_l^+(z) = C_+ z^{l+1}$ и $y_l^-(z) = C_- z^{-l}$. Решение $y_l^-(z)$ следует отбросить при $\forall l \geq 0$. Действительно, при $l \neq 0$ $\int_0^\infty |y_l^-|^2 dz$ расходится в $z=0$, поэтому $\frac{y_l^-}{z} \notin L_2(\mathbb{R}^3)$. При $l=0$ нормируемость сохраняется, но

~~Асимптотика~~ асимптотика волнового уравнения = 6 =
 функции $\psi(r, \theta, \varphi) \sim \frac{C}{r}$ — это не
 решение уравнения Шредингера во
 всем пространстве, т.к.

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\vec{r}).$$

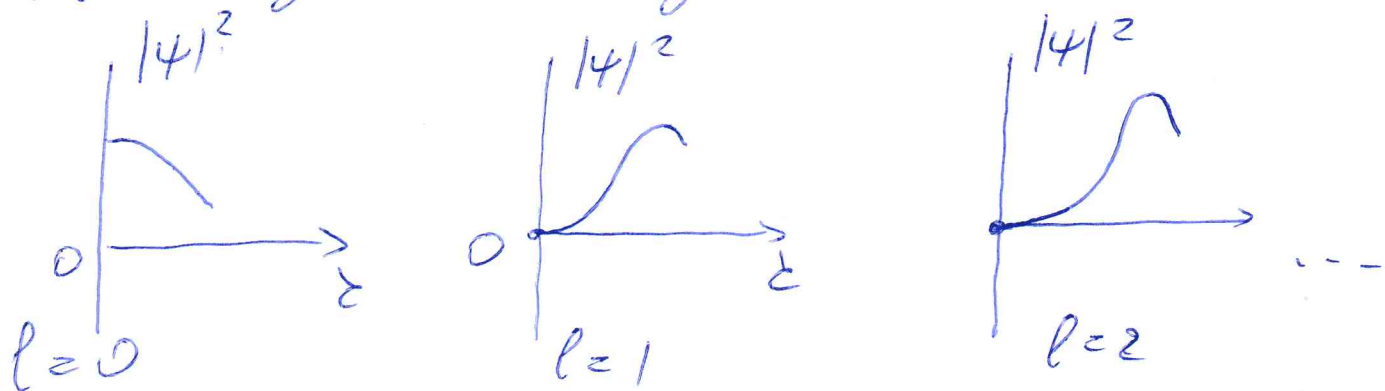
Зам. функции с асимптотикой $\sim \frac{1}{r}$ в
 $r \rightarrow 0$ не принадлежат множеству
 функций, на которых эрмитов опера-
 тор "радиального импульса" $\hat{p}_r = -i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$.
 Квадрат \hat{p}_r даёт радиальную часть
 оператора Лапласа: $-\hat{p}_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r})$.

Но так волновые ф-ции, являющиеся
 собственными векторами гамильтониана с
 центральными потенциалами вблизи
 начала координат ведут себе так:

$$\psi(r, \theta, \varphi) \sim r^l Y_l^m$$

То есть, плотность вероятности падает

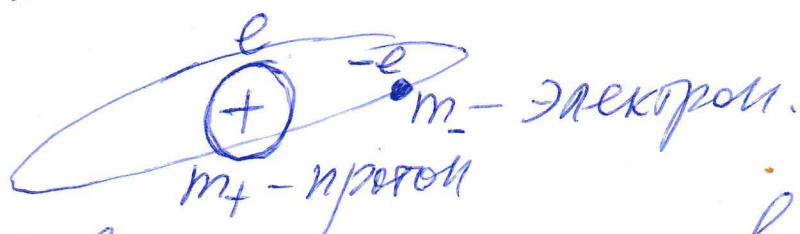
Частицы вблизи начала координат $= 7 =$
 $|\psi|^2 \sim r^{2l}$ — убывает тем быстрее, чем
 больше значение углового момента:



Атом водорода и водородоподобные
 атомы.

Найдём явный вид дискретного спектра
 и собственных функций в кулоновском
 потенциале.

Классическая модель атома водорода (Резерфорд)



Квантовая модель в координатном пред-
 ставлении реализуется операторами в

$$L_2(\mathbb{R}^6): \hat{H} = \frac{1}{2m_+} \sum_{k=1}^3 (\hat{p}_k^{(+)})^2 + \frac{1}{2m_-} \sum_{k=1}^3 (\hat{p}_k^{(-)})^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}^{(+)} - \vec{r}^{(-)}|}$$

Зам Водородоподобные атомы описываются

похожим Гамильтонианом, но \neq кулоновская взаимодействие имеет вид

$$V = -\frac{Ze^2}{|\vec{r}_+ - \vec{r}_-|}, \text{ где } Ze > 0 - \text{заряд ядра.}$$

Сделаем каноническое преобразование

от переменных $\hat{p}_k^{(+)}, \hat{q}_k^{(+)}, \hat{p}_k^{(-)}, \hat{q}_k^{(-)}$ к новым переменным по формулам:

$$\hat{P}_k = \hat{p}_k^{(+)} + \hat{p}_k^{(-)} \quad \hat{Q}_k = \frac{m_+ \hat{q}_k^{(+)} + m_- \hat{q}_k^{(-)}}{m_+ + m_-} \quad 1 \leq k \leq 3.$$

$$\hat{q}_k = \hat{q}_k^{(+)} - \hat{q}_k^{(-)} \quad \hat{p}_k = \frac{m_- \hat{p}_k^{(+)} - m_+ \hat{p}_k^{(-)}}{m_+ + m_-}$$

Перепишем соответствующие соотношения:

$$[\hat{Q}_k, \hat{P}_j] = i\hbar \delta_{kj} \mathbb{1} \quad [\hat{q}_k, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{kj} \mathbb{1}$$

$$[\hat{Q}_k, \hat{q}_j] = [\hat{Q}_k, \hat{p}_j] = [\hat{P}_k, \hat{q}_j] = [\hat{P}_k, \hat{p}_k] = 0.$$

Это квантовый аналог отделимости центра масс. В новых переменных:

$$\hat{H} = \frac{1}{2(m_+ + m_-)} \sum_{k=1}^3 \hat{P}_k^2 + \frac{1}{2\mu} \sum_{k=1}^3 \hat{p}_k^2 + V(|\hat{q}|)$$

Зам $\mu = \frac{m_+ m_-}{m_+ + m_-}$ — "приведенная масса" системы электрон-протон.

Поскольку $m_+ \approx 1840 m_-$, то $\mu \approx m_-$ с точностью порядка 0,05%.

Итак, гамильтониан модели $= G =$
 разбился в сумму двух операторов,
 зависящих от непересекающихся групп
 переменных: $R^6 = R_Q^3 \times R_q^3$:

$$\hat{H}_{\text{free}} = \frac{\hat{P}^2}{2(m_+ + m_-)} - \text{ответает свободному}$$

движению центра масс,

$$\hat{H}_{\text{кул}} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{r}|} - \text{гамильтониан относитель-$$

ного движения: частица
 с зарядом $-e$ и массой μ
 в кулоновском централь-

ном поле.

Полная собственная функция искор-
 ного гамильтониана представляется
 произведением $\psi_{\text{free}}(\vec{Q}) \psi(\vec{r})$, где:

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_+ + m_-)} \Delta_Q \psi_{\text{free}}(\vec{Q}) = E_Q \psi_{\text{free}}(\vec{Q}) - \text{свободный}$$

волновой пакет.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r \psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{|\vec{r}|} \psi(\vec{r}) = E_{\text{кул}} \psi(\vec{r}) - \text{уравнение}$$

на относительные волно-

вые функции.

$$E_{\text{полн}} = E_Q + E_{\text{кул}}.$$

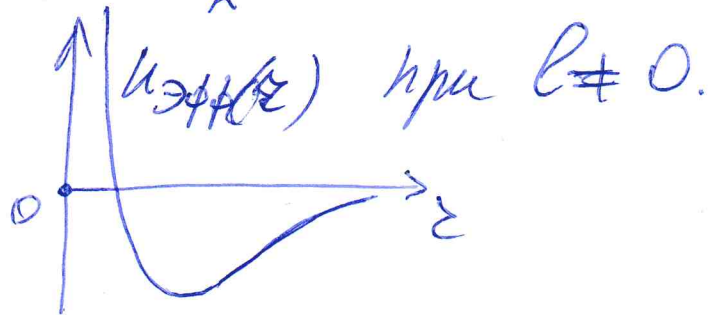
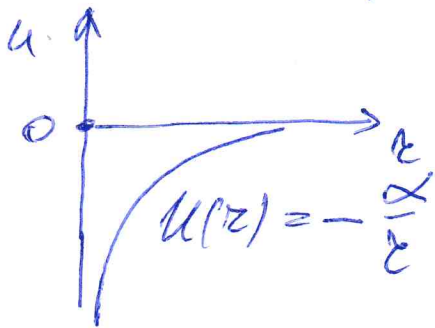
Мы рассмотрим "отталкивающее" $= 10 =$
 взаимодействие: $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{r} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$.

Мы уже знаем из прошлых лекций,
 что в сферических координатах $\psi(\vec{r})$
 можно записать в виде:

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{y_\ell(r)}{r} Y_\ell^m(\vartheta, \varphi),$$

$$\frac{d^2 y_\ell(r)}{dr^2} + \left(\epsilon + \frac{\alpha}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) y_\ell(r) = 0, \quad \ell \in \mathbb{Z}_{>0}$$

константа α равна: $\alpha = \frac{2\mu}{\hbar^2} e^2 > 0$.



Будем исследовать дискретный спектр:
 $E = \frac{2\mu}{\hbar^2} \epsilon < 0$ (связанные состояния).

Введём положительный параметр:

$$\kappa = \sqrt{|\epsilon|} > 0.$$

Асимптотика радиальной части $y_\ell(r)$
 связанного состояния:

$$y_\ell(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\kappa r}, \quad y_\ell(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{\ell+1}.$$

Сделаем подстановку:

$$y(z) = z^{l+1} e^{-\lambda z} w(z), \text{ где } w(z) = a_0 + a_1 z + \dots$$

= 11 =

Тогда для $w(z)$ получим уравнение:

$$w''(z) + \left(\frac{2(l+1)}{z} - 2\lambda\right) w'(z) + \frac{(2 - 2\lambda(l+1))}{z} w(z) = 0$$

$$a_0 \neq 0.$$

Решение этого уравнения существует при любом $\lambda > 0$.

Однако, в общем случае, $w(z) \sim e^{2\lambda z}$ при $z \rightarrow \infty$.

$$w'' - 2\lambda w'(z) \sim 0 \text{ при } z \rightarrow \infty.$$

Такая асимптотика не верна для $y(z)$, поскольку необходимо иметь $\int |y(z)|^2 dz < \infty$ — нормируемое решение.

При некоторых выбранных значениях λ $w(z)$ превращается в полином по z и \Rightarrow приводит к нормируемому y .

Подставим разложение $w(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ в уравнение $(*)$. Мы получим рекуррентное соотношение на коэффициенты a_k !

$$a_{k+1} = \frac{2x(k+l+1) - \alpha}{(k+1)(k+2(l+1))} a_k, \quad k \geq 0. \quad = 12 =$$

Видно, что все выражается через $a_0 \neq 0$.

При больших $k \gg l$: $a_{k+1} \approx \frac{2x}{k} a_k \Rightarrow$
 $\Rightarrow a_k \approx \text{const} \frac{(2x)^k}{k!} \Rightarrow$ действительность $W_e \sim e^{-2x^2}$.

Однако, если для некоторого k параметр x удовлетворяет равенству:

$$2x(k+l+1) - \alpha = 0,$$

то ∞ ряд для $W_e(r)$ обрывается и решение $W_e(r)$ оказывается полиномом.

Функция $Y_e(r)$ становится комбинацией ∞ дифференцируемых функций из пространства Шварца $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$.

Итак, $x_{l,k} = \frac{\alpha}{2(k+l+1)} = \sqrt{|\epsilon|} \Rightarrow$

$\Rightarrow E_{k,l} = -\frac{\alpha^2}{4(k+l+1)^2}$ - дискретные уровни энергии,

соответствующие нормированным собственным функциям $\hat{H}_{\text{кул}}$ (связанным состояниям).

Зам. Полиномы $W_{l,k}(z)$ - решение $= 13 =$
уравнения (A) где $x = x_{l,k}$, есть
(обобщенные) полиномы Лагерра.

Полиномы Лагерра $L_n^\beta(x)$ удовлетворяют
уравнению:

$$\boxed{\star} \quad \frac{d^2 L_n^\beta(x)}{dx^2} + \left(\frac{\beta+1}{x} - 1 \right) \frac{dL_n^\beta(x)}{dx} - \frac{n}{x} L_n^\beta(x) = 0,$$

$\beta > -1$ - вещественное число.

Формула Родрига для $L_n^\beta(x)$:

$$L_n^\beta(x) = \frac{1}{n!} x^{-\beta} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+\beta} e^{-x}).$$

Введем вид некоторых первых поли-
номов $L_n^\beta(x)$:

$$L_0^\beta(x) = 1, \quad L_1^\beta(x) = \beta + 1 - x,$$

$$L_2^\beta(x) = \frac{x^2}{2} - x(\beta+2) + \frac{(\beta+1)(\beta+2)}{2}, \dots$$

Сравнивая уравнение (A) где $W_{l,k}(z)$ и

(A) где $L_n^\beta(x)$, получаем:

$$W_{l,k}(z) = L_k^{2l+1}(x_{l,k} z).$$

Восстановим размытое констант- $=14=$
ты и введём "главное квантовое число"
 $n = k + l + 1 \in \mathbb{Z}_+$.

Тогда уровни энергии дискретного
спектра нумеруются числом n :

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu} E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad n=1, 2, \dots$$

Каждому уровню E_n соответствуют состояния
с моментом импульса $\hat{S}^2 = l(l+1)$ с

$l = 0, 1, \dots, n-1$. Для каждого l есть
 $2l+1$ различных собственных функций
с разными собств. значениями \hat{S}_z : $-l \leq m \leq l$.

Таким образом, полное значение вырожде-
дения уровня E_n есть:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n(n-1) + n = \underline{n^2}.$$

Единственное невырожденное состояние
отвечает $n=1$ — основное состояние
атома водорода (наименьшая энергия)

$$E_1 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}.$$

Водные функции дискретного спектра, соответствующие E_n :

$$\psi_{n,\ell,m}(\rho, \vartheta, \varphi) = N \rho^\ell e^{-\frac{\rho}{a n}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2\rho}{a n} \right) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi),$$

где $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ — "атомная" единица длины.

$a \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ см, если подставить \hbar, e и μ .

У Среднее расстояние до центра в состоянии $\psi_{n,\ell,m}$:

$$\langle r \rangle_{n\ell} = a \frac{3n^2 - \ell(\ell+1)}{2},$$

В основном состоянии: $n=1, \ell=0$:

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2} a.$$

Таким образом, средние размеры атома водорода $\approx \frac{3}{2} a \sim 10^{-8}$ см.

Зам Величина $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ называется

Боровским радиусом орбиты основного состояния (по имени Нильса Бора).

Итак, энергетические уровни дискретного спектра сходятся к $E=0 \approx \frac{1}{n^2}$.

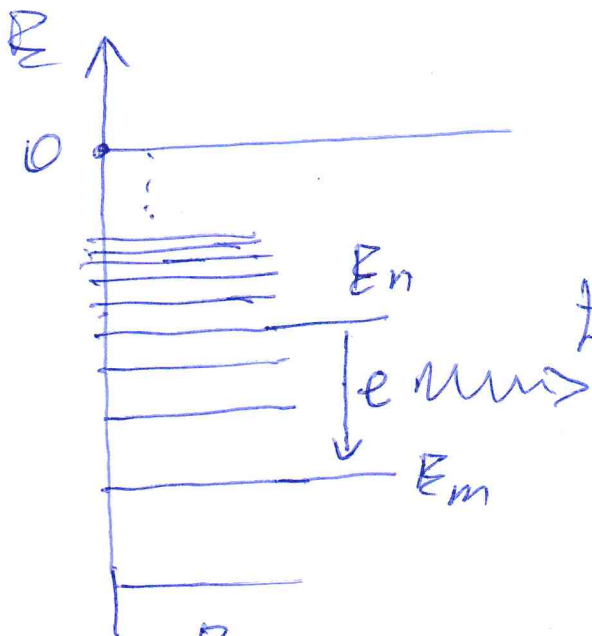
Формула где E_n прекрасно объясняет спектр излучения водорода: частоты излучательного спектра подчиняются формуле Балмера:

$$\omega_{mn} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

где любых целых m и n , $n > m$.

Имеется такой закон следует из квантовой физики: атом излучает при переходе электрона из состояния с $E_n > E_m$ в состояние E_m . Энергия фотона пропорциональна его частоте \Rightarrow по закону сохранения энергии:

$$E_{\text{photon}} = \hbar \omega_{mn} = E_n - E_m = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$



Кроме того, мы получили значение постоянной Ридберга R , входящей в формулу Балмера:

$$R = \frac{\mu e^4}{2\hbar^3}$$

Вычисление этой константы и объяснение формулы Балмера было одним из первых успехов квантовой физики.

из самых убедительных свидетельств = (7) =
в пользу квантовой теории Н. Бора.

Собственные угловые моменты (спин)
элементарных частиц. Правила сложения
моментов.

Рассмотрим ~~поведение~~ взаимодействие
атома с внешним магнитным полем.
Пусть однородное и постоянное магнит-
ное поле направлено вдоль оси z
атома. Потенциальному магнитному полю

\vec{H} отвечает векторный потенциал:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} [\vec{H} \times \vec{r}]$$

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}: H_i = \epsilon_{ijk} \frac{\partial A_k}{\partial x_j}$$

Как известно из классической электродинамики, взаимодействие с внешним магнитным полем учитывается в гамильтониане следующим образом изменившим
импульса: $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$, где c - скорость света.

$$\text{Тога } \frac{\vec{p}^2}{2m} \rightarrow \frac{1}{2m} \left(\vec{p}^2 - \frac{2e}{c} (\vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right)$$

$$\text{В нашем случае } -\frac{e}{mc} (\vec{A} \cdot \vec{p}) = \frac{-e}{2mc} \vec{H} \cdot [\vec{r} \times \vec{p}] =$$

$$= \frac{e}{2mc} \vec{H} \cdot \vec{L}$$

Древнегреческая ~~с~~ составляющая $\sim \frac{1}{c^2}$, поэтомуHamiltonian в виде:

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{H_0} + V(z) - \frac{e}{2mc} \vec{H} \cdot \vec{L}$$

После квантования: $\vec{L} \rightarrow \hat{L} = \hbar \hat{S}$:

$$\hat{H} = H_0 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{H} \cdot \hat{S}$$

Будем считать \vec{H} направленное вдоль третьей оси системы координат:

$$\vec{H} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ H \end{pmatrix}$$

Тогда слагаемое, описывающее взаимодействие с полем, примет вид:

$$- \frac{e\hbar}{2mc} H \hat{S}_z$$

Это взаимодействие интерпретируется как скалярное произведение вектора магнитного поля \vec{H} и магнитного момента $\hat{\mu} = \frac{e}{2mc} \hat{L} = \mu_0 \frac{\hat{L}}{\hbar} = \mu_0 \hat{S}$.

Важно $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$ называется магнетон Бора.

Поскольку $\hat{M}\hat{S}_z$ по-прежнему $= 19 =$
коммутирует с \hat{S}^2 и \hat{S}_z и в координат-
ном представлении зависит только от
угловых переменных, то гамильтониан
в магнитном поле

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mu_0 \hat{M}\hat{S}_z$$

будет иметь те же собственные функ-
ции, что и \hat{H}_0 , но уровни энергии
сдвинутые (частичное снятие вырождения)

$$E_n \mapsto E_n - \mu_0 m \mu_B$$

- произойдет "расщепление" уровней энергии
в зависимости от значений $l \leq m \leq l$.

При этом энергия основного состояния
 $n=1 \Rightarrow l=0$ не должна измениться.

Однако на опыте оказалось, что уровень
энергии основного состояния расще-
пелся на 2 уровне, что соответст-
венно значению $l = \frac{1}{2}$ и \Rightarrow 2 значения m :

$$m = -\frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}.$$

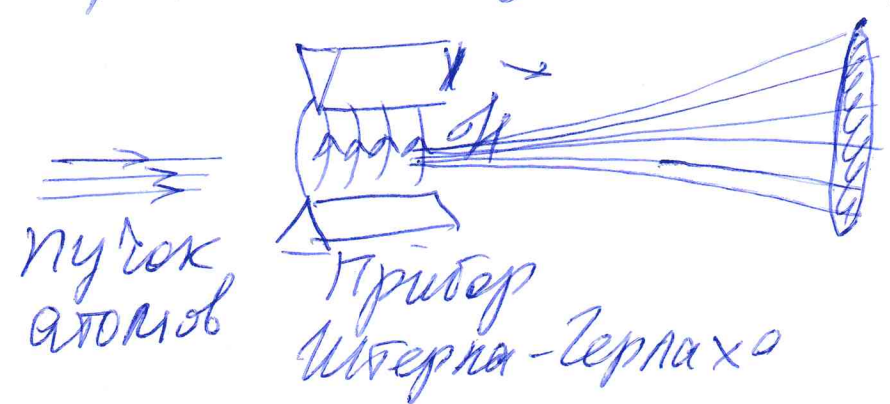
Аналогичные результаты, которые $\approx 20 =$ невозможно объяснить теорией орбитального углового момента, были получены в опытах Штерна и Герлаха. В этих опытах пучок атомов пропускался через область слабо неоднородного магнитного поля. В таком поле на частицы с магнитным моментом $\vec{\mu}$ действует отклоняющая сила:

$$\vec{F} \sim \nabla(\vec{\mu} \vec{H}).$$

Если поле \vec{H} было направлено вдоль третьей оси Ox , то сила тоже направлена вдоль этой оси:

$$F_x \sim \mu_z \frac{\partial H_x}{\partial x}.$$

Поскольку два магнитных момента атомов в пучке ориентированы хаотично, то на выходе из прибора ожидается выскучное пятно, образованное атомами с различным значением μ_z :



Ка опыте получалось не "размазанное" пятно, а дискретные группы пятен, что доказывало дискретный характер значений третьей компоненты магнитного момента

$\mu_z \sim \hat{S}_z$:

После подробнейшей теории углового момента это было уже не удивительно. Однако загадкой был тот факт, что нули спектров некоторых веществ расщеплялись на сетное число пятен. Это отвечает полуцелому значению l и, следовательно, не может быть объяснено вращательными орбитальными угловыми моментами с квантом l .

Выход из этого положения был предложен С. Гаудсмитом и Дж. Уленбеком в 1925 г. Они предположили, что электрон обладает собственным угловым моментом l , как следствие, магнитным моментом $\vec{\mu}_e$.

Только для $\vec{\mu}_e$ нужно было брать значение $\vec{\mu}_e = \frac{e\hbar}{mc} \hat{S} \approx 2\mu_B \hat{S}$.

Удвоение коэффициента протон-
=22=
нейтральности (или гиромагнитного
отношения) было впоследствии
объяснено в рамках квантовой теории
поля.

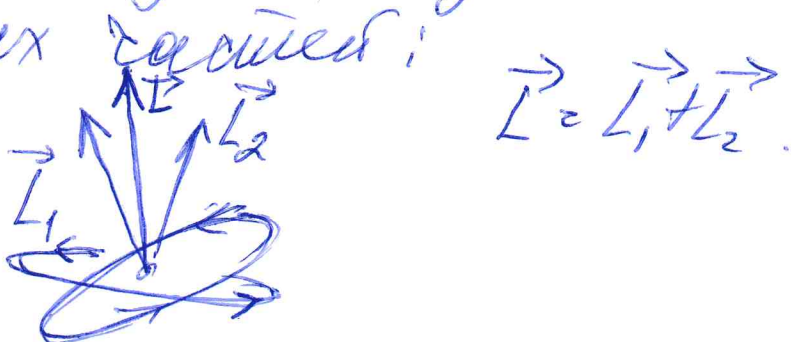
Собственный угловой момент полу-
чи название спина электрона (от
английского термина "spin" - вращение).
Этот угловой момент в соответствии с
опытом параметризуется спиновым
значением $S = \frac{1}{2}$: $\hat{S}^2 = S(S+1) = \frac{3}{4}$.

Спин электрона - неотъемлемая физи-
ческая характеристика этой частицы,
столь же фундаментальная, как масса
и заряд. Его нельзя объяснить вращением
электрона как физического тела (важные
модели "вращающихся шариков" оказались
несостоятельными). Спин всегда есть
и тот же - "вращение" электрона нельзя
"затормозить" или "ускорить" - и не
имеет классического аналога. Это
чисто квантовое явление. Оно

из его проявлений состоит в том, $\approx 23 =$
 что электрон нельзя описать одной
 волновой функцией из $L_2(\mathbb{R}^3)$. Простран-
 ство состояний электрона $- L_2(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{C}^2$,
 то есть, в (нерелятивистской) квантовой
 механике электрон описывается двух-
 компонентной волновой функцией

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \in L_2(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{C}^2.$$

Обратимся теперь к вопросу как
 складываются угловые моменты в кванто-
 вой механике. Это сложение должно
 соответствовать правилу сложения момен-
 тов классической механики, где полный
 угловой момент системы есть вектор-
 ная сумма угловых моментов разни-
 ных частей:



Пусть одна система описывается угловым
 моментом \vec{L}_1 , реализованным самоскру-

неинными операторами в \mathfrak{sl}_2
 пространстве V_1 , $\dim V_1 = 2l_1 + 1$,
 а вторая система — условным моментом
 $\hat{L}^{(2)}$ в пространстве V_2 , $\dim V_2 = 2l_2 + 1$.

Пространство состоит объединённой
 системы $V = V_1 \otimes V_2$, $\dim V = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$.

Оператор $\hat{L} = \hat{L}^{(1)} + \hat{L}^{(2)}$ должен быть
 самосопряжённым оператором в V и
 удовлетворять ~~к~~ коммутационным
 соотношениям $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k$.

Построение операторов \hat{L}_i есть, в дей-
 ствительности, задача теории представ-
 ления. В соответствии с этой теорией,
 операторы \hat{L}_i следует вводить в виде:

$$\hat{L}_i = \hat{L}_i^{(1)} \otimes \hat{1}_{V_2} + \hat{1}_{V_1} \otimes \hat{L}_i^{(2)}$$

Здесь элемент $\hat{A} \otimes \hat{B}$ действует на
 вектор $v_1 \otimes v_2 \in V_1 \otimes V_2$ согласно правилу

$$\hat{A} \otimes \hat{B} \triangleright v_1 \otimes v_2 := (\hat{A} \triangleright v_1) \otimes (\hat{B} \triangleright v_2)$$

$\hat{A} \in \text{End}(V_1) \quad \hat{B} \in \text{End}(V_2)$

Справедливость коммутационных соотношений где \hat{L}_i проверяется элементарно. Наша задача состоит теперь в выяснении, какие собственные значения будут у \hat{L}^2 в пространстве V и на какие инвариантные относительно \hat{L}_i подпространства распадется V .

Выберем в V_{l_1} и V_{l_2} базисы собственных векторов $|l_1, m_1\rangle$ и $|l_2, m_2\rangle$:

$$\hat{L}^2 |l_1, m_1\rangle = l_1(l_1+1) |l_1, m_1\rangle$$

$$\hat{L}_3^{(1)} |l_1, m_1\rangle = m_1 |l_1, m_1\rangle$$

$$\hat{L}_{\pm}^{(1)} |l_1, m_1\rangle = \sqrt{(l_1 \mp m_1)(l_1 \pm m_1 + 1)} |l_1, m_1 \pm 1\rangle$$

и то же самое где $L^{(2)}$.

Базис в V : $|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$.

$$\hat{L}_3 = \hat{L}_3^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \hat{1}^{(1)} \otimes \hat{L}_3^{(2)}$$

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_{\pm}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \hat{1}^{(1)} \otimes \hat{L}_{\pm}^{(2)}$$

Поэтому $\hat{L}_3 (|l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle) = (m_1 + m_2) |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle$

Нетрудно построить вектор $= 2b =$
старшего веса в V с самым большим
или собственным значением L_3 :

$$L_3 |l_1 l_1\rangle \otimes |l_2 l_2\rangle = (l_1 + l_2) |l_1 l_1\rangle \otimes |l_2 l_2\rangle.$$

Далее для упрощения записи будем
опускать знак тензорного произведения \otimes .

Этот вектор единственный в V .

Действуя на него оператором \hat{L}_- ,
получим базис инвариантного подгруппы
образов $V_{l_1+l_2}$, $\dim V_{l_1+l_2} = 2(l_1+l_2)+1$.

Далее, собственное значение L_3 на
 ± 1 меньше, чем l_1+l_2 имеют 2 линейно-
независимых вектора. Например,

$$|l_1 l_1\rangle |l_2, l_2 - 1\rangle \text{ и } |l_1 l_1 - 1\rangle |l_2 l_2\rangle. \text{ Их}$$

линейные комбинации образуют двумерное
подпространство в V , ~~все~~ все
его вектора — собственные для \hat{L}_3 с
собственными значениями l_1+l_2-1 .

Одна из таких линейных комбинаций
входит в $V_{l_1+l_2}$ и будет

пропорциональна $\hat{L}_- |l_1, l_2\rangle > |l_2, l_2\rangle > \epsilon. = 2\hbar =$
 Обратим базисные вектора пространства V , соответствующие \hat{L}_+^2 и \hat{L}_-^2 ,
 символом $|l, m\rangle$. Тогда

$$|l_1+l_2, l_1+l_2\rangle = |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle \text{ - старший вектор}$$

$$\hat{L}_- |l_1+l_2, l_1+l_2\rangle = \sqrt{2(l_1+l_2)} |l_1+l_2, l_1+l_2-1\rangle$$

$$\left(\hat{L}_-^{(1)} |l_1, l_1\rangle \right) |l_2, l_2\rangle + |l_1, l_1\rangle \left(\hat{L}_-^{(2)} |l_2, l_2\rangle \right) =$$

$$= \sqrt{2l_1} |l_1, l_1-1\rangle |l_2, l_2\rangle + \sqrt{2l_2} |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2-1\rangle$$

$$\rightarrow |l_2, l_2+l_1-1\rangle = \sqrt{\frac{l_1}{l_2+l_1}} |l_1, l_1-1\rangle |l_2, l_2\rangle +$$

$$+ \sqrt{\frac{l_2}{l_1+l_2}} |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2-1\rangle$$

Вторая линейная комбинация должна дать старший вектор $|l_1+l_2-1, l_1+l_2-1\rangle$
 и, следовательно, должна уничтожаться
 оператором \hat{L}_+ . Итак, выберем коэф-
 фициенты α и β так, чтобы:

$$\hat{L}_+ (\alpha |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2-1\rangle + \beta |l_1, l_1-1\rangle |l_2, l_2\rangle) = 0$$

Учитывая нормировку на $\mathbb{1}$, $= 2J_z$
 найдем вектор $|l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle$:

$$|l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{l_2}{l_1 + l_2}} |l_1, l_1 - 1\rangle |l_2, l_2\rangle - \sqrt{\frac{l_1}{l_1 + l_2}} |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2 - 1\rangle.$$

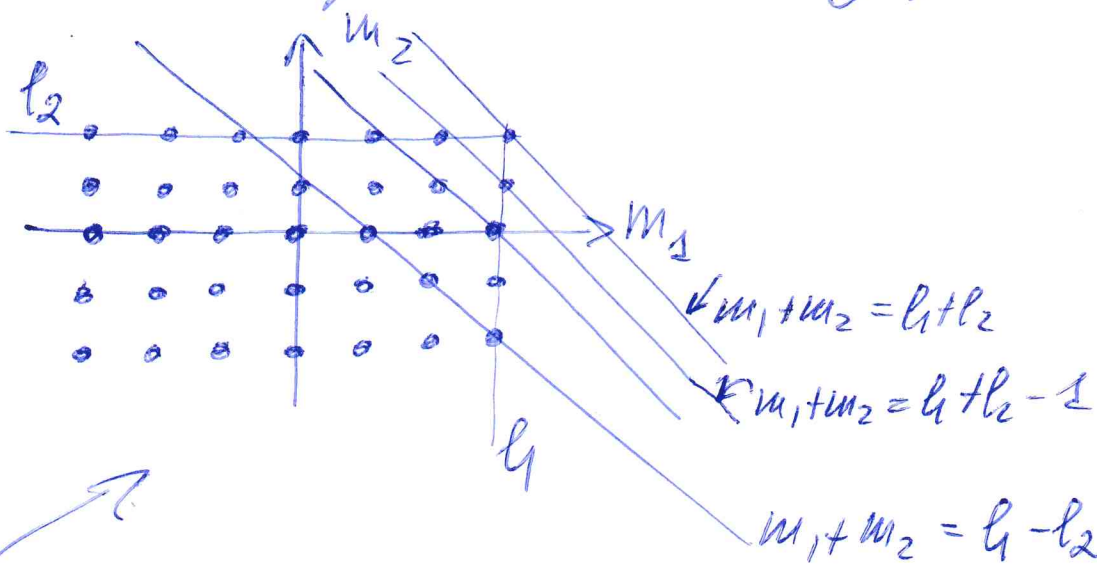
Этот старший вектор порождает $2(l_1 + l_2 - 1) + 1$ -мерное инвариантное подпространство.

Дальше процедура повторяется аналогично. Собственные значения L_z ($l_1 + l_2 - 2$)

дают вектора $|l_1, l_1 - 2\rangle |l_2, l_2\rangle$,
 $|l_1, l_1 - 1\rangle |l_2, l_2 - 1\rangle$ и
 $|l_1, l_1\rangle |l_2, l_2 - 2\rangle$.

Их линейная оболочка — трёхмерна, 2 независимых вектора из этой оболочки войдут один в $V_{l_1 + l_2}$, второй — в $V_{l_1 + l_2 - 1}$ а третий независимый вектор будет вектором старшего веса в очередном подпространстве $V_{l_1 + l_2 - 2}$ и будет уничтожаться оператором \tilde{L}_+ .

До каких пор будет расти раз-
мерность линейной оболочки собственных
векторов \hat{L}_3 и, \Rightarrow , будут появляться но-
вые вектора старшего веса в оскер-
ных инвариантных подпространствах?



Очевидно, рост размерности собственного
подпространства \hat{L}_3 с собственными знаме-
нами l_1+l_2-k будет прекратиться, пока
на оскерной прямой $m_1+m_2 = l_1+l_2-k$ бу-
дет увеличиваться число точек. Из

рисунка очевидно, что максимальная
размерности будет достигнута при
 $m_1+m_2 = l_1 - l_2$ ($l_1 > l_2$). Размерность
линейной оболочки с $m_1+m_2 = l_1 - l_2 - 1$
уже будет такой же, как и на преды-
дущем шаге, и ~~эта~~ эта оболочка бу-

действуют как собственные $z=30$ -
 векторами \hat{L}_3 из разных подпространств
 $V_{l_1+l_2-k}$. Итого:

$$V_{l_1} \otimes V_{l_2} = \bigoplus_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} V_l$$

Сумма с точкой \hat{L} .

Собственные векторы операторов \hat{L}_2 и \hat{L}_3
 в пространстве V : $|l, m\rangle$ выражаются
 линейными комбинациями векторов
 $|l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$. Соответствующие коэффи-
 циенты называются коэффициентами
Клебша - Гордона:

$$|l, m\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1+m_2=m}} C_{(l_1, m_1, l_2, m_2)}^{(l, m)} |l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$$

Пример: Сложение 2х спинов $1/2$.

В данном случае операторы $S_k^{(1)}$ и $S_k^{(2)}$
 реализованы в \mathbb{C}^2 одинаковыми матри-
 цами:

$$\hat{S}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

или $\hat{S}_x = \frac{1}{2} \sigma_x$. Матрицы σ_k называются
матрицами Паули.

$$\hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad = 31 =$$

Базисные вектора - собственные вектора

$$\hat{S}_3: |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_3 |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle$$

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_3 |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle$$

Операторы $\hat{S}_k = \hat{S}_k^{(1)} + \hat{S}_k^{(2)}$ действуют в 4 мерном пространстве $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$.

$$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 = V_{\frac{1}{2}} \otimes V_{\frac{1}{2}} = V_1 \oplus V_0$$

\uparrow \uparrow
 Трёхмерное одномерное.

$|1, 1\rangle = |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle$ - старший вектор V_1

$$S_- |1, 1\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle = |\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle$$

$$\sqrt{2} |1, -1\rangle = S_- |1, 0\rangle = S_- \frac{|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} =$$

$$= \sqrt{2} |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle.$$

Базисный вектор одномерного пространства V_0 : $|0, 0\rangle = \frac{|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$.