

СУММА МОМЕНТОВ  $\vec{l}$  и  $\vec{s} = \frac{1}{2}$ .

Пусть

$$\vec{J} = \vec{l} + \vec{s}.$$

Необходимо выразить собственные векторы операторов  $\vec{J}^2$  и  $J_3$  в терминах собственных векторов операторов  $\vec{l}^2, l_3$  и  $\vec{s}^2, s_3$ .

В этом частном, но важном случае полезно дать вывод соответствующих соотношений не связанный с общей теорией коэффициентов Клебша-Гордона, используя непосредственно формулу спектрального разложения оператора  $\vec{J}^2$ . Поскольку операторы  $\vec{l}$  и  $\vec{s}$  коммутируют, то

$$\vec{J}^2 = \vec{l}^2 + \vec{s}^2 + 2\vec{l}\vec{s}.$$

Если рассматривать действие этого оператора в подпространстве с определенным значением  $j$ , то  $\vec{J}^2$  эффективно сводится к

$$\vec{J}^2 = j(j+1) + \frac{3}{4} + \vec{l}\vec{s}.$$

Эта формула согласуется с общим утверждением, что любая функция спиновой переменной сводится к линейной. Найдем проекционные операторы

$$P = a + \vec{s}\vec{l}.$$

Заметим, что в силу некоммутативности составляющих  $\vec{l}$

$$(\vec{s}\vec{l})(\vec{s}\vec{l}) = \vec{l}^2 + i\vec{s}(\vec{l} \times \vec{l}) = l(l+1) - \vec{s}\vec{l},$$

поэтому условие  $P^2 = P$  приводит к уравнениям

$$a = a^2 + b^2 l(l+1), \quad b = 2ab - b^2.$$

В результате получаются два оператора

$$P_1 = \frac{l+1 + \vec{s}\vec{l}}{2l+1},$$

$$P_2 = \frac{l - \vec{s}\vec{l}}{2l+1},$$

удовлетворяющие соотношениям

$$P_i^2 = P_i, \quad P_1 P_2 = P_2 P_1 = 0, \quad P_1 + P_2 = E, \quad l P_1 - (l+1) P_2 = \vec{s}\vec{l}$$

Оператор  $\vec{J}^2$  можно представить как сумму

$$\vec{J}^2 = j_+(j_+ + 1)P_1 + j_-(j_- + 1)P_2, \quad j_{\pm} = l \pm \frac{1}{2}.$$

Нетрудно сообразить, что собственным вектором оператора  $\vec{J}^2$ , соответствующим числу  $j_+$  будет решение уравнения  $P_2\Psi = 0$ . Это уравнение проще всего решать, представив спиновые операторы в форме двухрядных матриц,

$$P_2 = \begin{pmatrix} l - l_3 & -l_- \\ -l_+ & l + l_3 \end{pmatrix},$$

а собственный вектор – двухрядного столбца:

$$\Psi_{j_+lM} = \begin{pmatrix} Y_{lm}(\hat{r})C_1 \\ Y_{lm'}(\hat{r})C_2 \end{pmatrix}.$$

Если  $m' = m + 1$ , то этот столбец – собственный вектор оператора  $J_3$ , который представляется в форме

$$J_3 = \begin{pmatrix} l_3 + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & l_3 - \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$J_3\Psi_{j_+lM} = \Psi_{j_+lM}M, \quad M = m + \frac{1}{2}.$$

Поскольку скалярное произведение столбцов с зависящими от аргумента  $\hat{r}$  элементами равно

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} a_1(\hat{r}) \\ b_1(\hat{r}) \end{pmatrix}, \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} a_2(\hat{r}) \\ b_2(\hat{r}) \end{pmatrix}, \quad \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int d\hat{r} (a_1^* a_2 + b_1^* b_2),$$

то нормированный на единицу вектор равен

$$\Psi_{j_+lM} = \begin{pmatrix} Y_{lm}(\hat{r})\sqrt{\frac{\lambda+M}{2\lambda}} \\ Y_{lm+1}(\hat{r})\sqrt{\frac{\lambda-M}{2\lambda}} \end{pmatrix}, \quad \lambda = l + \frac{1}{2}, \quad M = m + \frac{1}{2}.$$

Собственный вектор  $\vec{J}^2$  и  $J^3$ , соответствующий собственным значениям  $j_-$  и  $M = m + \frac{1}{2}$ , равен

$$\Psi_{j_-lM} = \begin{pmatrix} Y_{lm}(\hat{r})\sqrt{\frac{\lambda-M}{2\lambda}} \\ -Y_{lm+1}(\hat{r})\sqrt{\frac{\lambda+M}{2\lambda}} \end{pmatrix}, \quad \lambda = l + \frac{1}{2}, \quad M = m + \frac{1}{2}.$$

Если определить

$$\operatorname{tg} \frac{\alpha}{2} = \sqrt{\frac{\lambda - M}{\lambda + M}},$$

то в силу соотношений

$$\cos \frac{\alpha}{2} = \sqrt{\frac{\lambda + M}{2\lambda}}, \quad \sin \frac{\alpha}{2} = \sqrt{\frac{\lambda - M}{2\lambda}},$$

формулы для собственных векторов можно будет записать в форме

$$\begin{aligned} \Psi_{j+1M} &= \begin{pmatrix} Y_{lm}(\hat{r}) \cos \frac{\alpha}{2} \\ Y_{l,m+1}(\hat{r}) \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}, \\ \Psi_{j-1M} &= \begin{pmatrix} Y_{lm}(\hat{r}) \sin \frac{\alpha}{2} \\ -Y_{l,m+1}(\hat{r}) \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

## ТОНКАЯ СТРУКТУРА УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ

Гамильтониан атома водорода в приближении бесконечно тяжелого протона и нерелятивистского электрона равен

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(r), \quad V(r) = -\frac{e^2}{r}.$$

Релятивистские поправки к энергии электрона происходят из следующих эффектов.

**1. Поправка, связанная с изменением связи между импульсом и энергией.**

Частная теория относительности учит, что энергия частицы массы  $m$  с импульсом  $\vec{p}$  равна

$$E = mc^2 \sqrt{1 + \left(\frac{\vec{p}}{mc}\right)^2}.$$

Удерживая в разложении квадратного корня в ряд Тейлора только квазирелятивистскую поправку, получим такое выражение оператора кинетической энергии

$$T = mc^2 + \frac{1}{2m} \vec{p}^2 - \frac{1}{2mc^2} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m}\right)^2.$$

**2. Поправка, связанная с наличием у электрона собственного момента количества движения.**

Как уже говорилось на прошлой лекции, наличие у электрона магнитного момента

$$\vec{\mu} = \mu_0 \vec{s}$$

приводит к появлению у него электрического дипольного момента

$$\vec{d} = \frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{\mu}).$$

Энергия электрического момента в кулоновом поле ядра описывается оператором

$$\mathcal{H}_{os} = \frac{e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \vec{l} \vec{s}.$$

### 3. Поправка, связанная с наличием у электрона античастицы – позитрона.

Последовательная релятивистская теория электрона, утверждает, что электрон – это частица Дирака – а некоторое объединение частицы и античастицы – электрона и позитрона. Существенно, при попытке выделить из частицы Дирака состояние с определенным зарядом, например электрон, получают не локализованное состояние, в котором координаты частицы можно измерить лишь с точностью

$$\Delta x \sim \lambda_c = \frac{\hbar}{mc}.$$

Постоянную размерности длины  $\lambda_c$ , где  $m$  – масса электрона, называют **КОМПТОНОВОЙ ДЛИНОЙ ВОЛНЫ** электрона. Происхождение эффективной не локальности легко понять из следующих соображений: при попытке локализовать электрон с точностью до комптоновой длины волны возникает неопределенность импульса

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{\lambda_c} = mc,$$

Этому импульсу соответствует энергия, превышающая массу покоя частицы, в этом случае при описании поведения электрона приходится учитывать возможное рождение пары ”электрон+позитрон”. Неопределенность в положении электрона приводит к неопределенности его потенциальной энергии. Эффективный потенциал будет выглядеть примерно так:

$$V(\vec{r}) = \int \rho(\vec{r}') V(\vec{r} + \vec{r}') d\vec{r}'.$$

Разлагая потенциал в ряд Тейлора и удерживая слагаемые вплоть до второго порядка по комптоновой длине волны электрона получим сумму кулонова потенциала и оператор

$$\mathcal{H}_D = \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 V(r).$$

Эта величина была впервые получена Дарвиным – внуком создателя дарвинизма – и носит название поправки Дарвина.

Приведем полное выражение гамильтониана электрона в кулоновом поле в квазирелятивистском приближении:

$$\mathcal{H} = mc^2 + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1,$$

где

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r),$$

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{\Delta m} + \mathcal{H}_{so} + \mathcal{H}_D.$$

Все слагаемые, объединенные в  $\mathcal{H}_0$  и  $\mathcal{H}_1$  – величины одного порядка:

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \sim \left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle \sim \frac{me^4}{\hbar^2} = \alpha^2 mc^2,$$

где

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}.$$

Аналогично оцениваются слагаемые, входящие в  $\mathcal{H}_1$ :

$$\langle \mathcal{H}_{\Delta m} \rangle \sim \frac{1}{mc^2} \left( \frac{e^2}{r_0} \right)^2 = \alpha^2 \frac{me^4}{\hbar^2},$$

$$\langle \mathcal{H}_{so} \rangle \sim \langle \mathcal{H}_D \rangle \sim \frac{e^8 m}{c^2 \hbar^4} = \alpha^2 \frac{me^4}{\hbar^2}.$$

Безразмерная постоянная  $\alpha$  равна

$$\alpha = \frac{1}{137.035989},$$

она представляет собой среднее значение скорости электрона в атоме водорода, выраженной в единицах скорости света:

$$\left\langle \frac{v}{c} \right\rangle = \left\langle \frac{p}{mc} \right\rangle \sim \frac{\hbar}{mcr_0} = \frac{e^2}{\hbar c}.$$

Величину  $\alpha$  обычно называют **постоянной тонкой структуры**.

## ТЕОРЕМА ФЕЙНМАНА-ГЕЛЬМАНА В СЛУЧАЕ КРАТНЫХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Явное вычисление тонкой структуры уровней можно выполнить обратившись к теореме Фейнмана-Гельмана, уточненной на случай вырождения собственных значений.

Пусть для каждого  $n$  выполняются равенства

$$\mathcal{H}\Psi_{ns} = \Psi_{ns}E_n, \quad s = 1, \dots, r_n,$$

причем векторы  $\Psi_{ns}$  образуют ортонормированный базис в пространстве состояний.

Уравнения для векторов  $\Psi_{ns}$  можно превратить в равенства

$$\langle \Psi_{ns} | \mathcal{H} | \Psi_{ns'} \rangle = \delta_{ss'} E_{ns}, \quad E_{ns} = E_{ns'}. \quad \langle \Psi_{ns} | \Psi_{ns'} \rangle = \delta_{ss'}.$$

Вариации матричных элементов гамильтониана приводят к уравнениям

$$\langle \delta \Psi_{ns} | \mathcal{H} | \Psi_{ns} \rangle + \langle \Psi_{ns} | \delta \mathcal{H} | \Psi_{ns} \rangle + \langle \Psi_{ns} | \mathcal{H} | \delta \Psi_{ns} \rangle = \delta_{ss'} \delta E_{ns}.$$

Поскольку  $\Psi_{ns}$  – ортонормированные собственные векторы оператора  $\mathcal{H}$ , то

$$\langle \delta \Psi_{ns} | \mathcal{H} | \Psi_{ns'} \rangle + \langle \Psi_{ns} | \mathcal{H} | \delta \Psi_{ns'} \rangle = \langle \delta \Psi_{ns} | \Psi_{ns'} \rangle E_n + E_n \langle \Psi_{ns} | \delta \Psi_{ns'} \rangle = 0.$$

Таким образом должны выполняться соотношения

$$\langle \Psi_{ns} | \delta \mathcal{H} | \Psi_{ns'} \rangle = \delta_{ss'} \delta E_{ns}.$$

Эта формула может оказаться внутренне противоречивой, поскольку правая часть равенства диагональна по индексам  $s$  и  $s'$ , а левая вовсе не обязана быть диагональной.

Однако, нетрудно показать, что векторы  $\Psi_{ns}$  всегда можно выбрать так, чтобы выполнялись равенства

$$\langle \Psi_{ns} | \delta \mathcal{H} | \Psi_{ns'} \rangle = \delta_{ss'} \langle \Psi_{ns} | \delta \mathcal{H} | \Psi_{ns} \rangle.$$

Действительно, поскольку собственные значения оператора  $\mathcal{H}$  вырождены, то векторы  $\Psi_{ns}$  определены с точностью до унитарного преобразования

$$\Psi_{ns} \Rightarrow \sum_{s'} \Psi_{ns'} F_{s's}, \quad = \hat{F}^+ = \hat{F}^{-1}.$$

Матричные элементы оператора  $\delta \mathcal{H}$  изменяются при таком преобразовании следующим образом:

$$\delta \hat{H} \Rightarrow \hat{F}^+ \delta \hat{H} \hat{F}.$$

Поскольку матрица  $\delta \hat{H}$  – конечномерная эрмитова матрица, то всегда найдется унитарная матрица, для которой матрица  $\hat{F}^+ \delta \hat{H} \hat{F}$  будет диагональной по индексам  $s$  и  $s'$ .

В итоге получается формула, определяющая вариации уровней энергии при вариациях гамильтониана:

$$\delta E_{ns} = \langle \Psi_{ns} | \delta \mathcal{H} | \Psi_{ns} \rangle.$$

При этом векторы  $\Psi_{ns}$  должны удовлетворять условиям

$$\langle \Psi_{ns} | \mathcal{H} | \Psi_{ns'} \rangle = \delta_{ss'} E_n, \quad \langle \Psi_{ns} | \delta \mathcal{H} | \Psi_{ns'} \rangle = \delta_{ss'} \delta E_{ns}.$$

## ЯВНОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ

Поправки к уровням энергии, обусловленные гамильтонианом тонкой структуры, определяются после вычисления среднего значения гамильтониана в состояниях, определяемых векторами  $|n, l, j, m\rangle$ .

При усреднении оператора  $\mathcal{H}_{\Delta m}$  удобно представить его в форме

$$\langle \mathcal{H}_{\Delta m} \rangle \sim \frac{1}{mc^2} \left( \frac{e^2}{r_0} \right)^2 = \alpha^2 \frac{me^4}{\hbar^2}, = -\frac{1}{2mc^2} \left( \mathcal{H}_0 - V(r) \right)^2$$

и заменить оператор  $\mathcal{H}_0$  на число  $E_n$  – собственное значение этого оператора. В результате задача сведется к вычислению среднего значения величины

$$-\frac{1}{2mc^2} \left( E_n^2 + 2e^2 E_n \frac{1}{r} + \frac{e^4}{r^2} \right).$$

После средних значений радиуса в соответствующих степенях получается число

$$E_{\Delta m} = \frac{e^2}{2r_0 n^2} \frac{\alpha^2}{n^3} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) = -E_n \frac{\alpha^2}{n^3} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right).$$

Среднее значение оператора

$$\mathcal{H}_{os} = \frac{e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \vec{l} \vec{s}.$$

пропорционально

$$\langle n l j m | \vec{l} \vec{s} | m j l n \rangle = \begin{cases} j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}, & l \neq 0 \\ 0, & l = 0 \end{cases}$$

Таким образом оператор  $\mathcal{H}_{os}$  изменяет значения лишь уровней с  $l \neq 0$ . Если это условие выполнено, то

$$E_{so} = \frac{e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle (j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}).$$

Подставляя в формулу среднее значение  $\frac{1}{r^3}$ , получим

$$E_{so} = -\frac{e^2}{2r_0} \frac{\alpha^2}{n^3} \begin{cases} \frac{1}{(l+\frac{1}{2})(l+1)}, & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{l(l+\frac{1}{2})}, & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad l \neq 0.$$

Подставляя в формулу для поправки Дарвина

$$\mathcal{H}_D = \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 V(r).$$

потенциал  $V(r) = -\frac{e^2}{r}$  и учитывая формулу

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\vec{r}),$$

найдем, что

$$E_D = -\frac{\pi\hbar^2 e^2}{2m^2 c^2} |\Psi(0)|^2.$$

Значение функции  $\Psi(0)$  отлично от нуля лишь при  $l = 0$ . Предполагая, что  $l \neq 0$  и складывая числа  $E_{\Delta m}$ ,  $E_{so}$ , найдем поправку к уровням энергии (пока только при  $l \neq 0$ ):

$$E_f = \alpha^2 \frac{e^2}{2r_0 n^2} \frac{1}{n} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right).$$

При нулевом значении момента импульса спин-орбитальную поправку заменяет поправка Дарвина. Учитывая, что при  $l = 0$  полный момент количества движения равен  $\frac{1}{2}$ , найдем, что только что полученная формула справедлива при любых значениях  $l$ .

## СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ

Мы только что нашли значения уровней энергии с точностью до  $\alpha^4$ . Уточнение этих результатов требует знакомства с общей теорией возмущений, что будет сделано позднее. Здесь мы выясним, как влияет на структуру уровней энергии конечность массы протона. Поскольку массы электрона и протона равны

$$m_e = 0.51 \frac{Mev}{c^2}, \quad m_p = 938.27 \frac{Mev}{c^2},$$

то отношение

$$\frac{m_e}{m_p} = 0.55 \times 10^{-3}$$

примерно на порядок больше значения

$$\alpha^2 = 0.53 \times 10^{-4},$$

поэтому влияние конечности массы протона в первом порядке по отношению масс существенно эффект следующего порядка по  $\alpha^2$ .

Чтобы получить явные формулы, учитывающие этот эффект, обратимся к гамильтониану, описывающему поведение электрона во внешнем магнитном поле:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - \frac{e^2}{r} - 2\mu_B \vec{s} \vec{H}$$

Поскольку протон обладает собственным магнитным моментом  $\vec{M}$ , то он создает магнитное поле

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\vec{M} \times \vec{r}}{r^3}$$



удерживая в гамильтониане лишь линейные по векторному потенциалу слагаемые, получим оператор

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{hf},$$

где

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m_e} \vec{p}^2 - \frac{e^2}{r},$$

$$\mathcal{H}_{hf} = -\frac{e}{2m_e c} \left( \vec{p} \vec{A}(\vec{r}) + \vec{A}(\vec{r}) \vec{p} \right) - 2\mu_B \vec{s} \vec{H}.$$

Заметим, что

$$\vec{p} \vec{A} + \vec{A} \vec{p} = \left( \vec{p} (\vec{M} \times \vec{r}) \frac{1}{r^3} + \frac{1}{r^3} (\vec{M} \times \vec{r}) \vec{p} \right).$$

Поскольку

$$\vec{p} (\vec{M} \times \vec{r}) = (\vec{M} \times \vec{r}) \vec{p} = \vec{M} (\vec{r} \times \vec{p}) = \hbar \vec{M} \vec{l},$$

то первое слагаемое в  $\mathcal{H}_{hf}$  равно

$$-2\mu_B \frac{\vec{M} \vec{l}}{r^3}$$

При вычислении второго слагаемого следует учесть в нем сингулярность в начале координат. При дифференцировании это приводит к появлению  $\delta$ -функции. В результате гамильтониан сверхтонкого взаимодействия принимает вид:

$$\mathcal{H}_{hf} = -g\mu_B \mu_n \left\{ \frac{\vec{I} \vec{l}}{r^3} + \frac{3(\vec{I} \vec{r})(\vec{s} \vec{r})}{r^5} - \frac{\vec{I} \vec{s}}{r^3} + \frac{8\pi}{3} (\vec{I} \vec{s}) \delta(\vec{r}) \right\}.$$

В этом выражении  $\mu_n$  – ядерный магнетон,  $g$  – гиромагнитное отношение протона.

Уровни тонкой структуры при учете энергии  $\mathcal{H}_{hf}$  расщепляются, поскольку в этом случае значения энергии нумеруются числами  $n, l, j, f$ , где числа  $f$  нумеруют собственные значения квадрата полного спина атома,

$$\vec{F} = \vec{s} + \vec{I}.$$