МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

И.В. Копытин, А.С. Корнев

ВВЕДЕНИЕ В АЛГЕБРУ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ

Часть 2

Учебное пособие для вузов

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2015

ŋqdpȁyeɎ bɆ dədɆbɎɜə d ɕɔɑbɔɏ Ɉqddɏqɏè

Оглавление

бами параметризации матриц конечных вращений (здесь же приведены полезные в приложениях формулы интегрирования произведений сферических функций). *Вторая* глава посвящена общим принципам вычисления приведенных матричных элементов на основе соотношений, полученных в первой части настоящего пособия. В *третьей* главе излагаются методы парциальных разложений волновых функций, не являющихся собственными функциями оператора углового момента, и операторов, не имеющих структуры сферического тензора. В *четвертой* главе дается квантовое описание вращательного движения молекул и ядер. *Пятая* глава знакомит читателя с методами описания систем тождественных частиц, находящихся в центральном поле.

Поясним некоторые наиболее часто встречающиеся в данном пособии обозначения.

Оператор набла $\boldsymbol{\nabla}$ определяется следующим образом:

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{n}\,\frac{\partial}{\partial n},$$

где $\boldsymbol{n}$ — единичный вектор в заданном направлении; в этом же направлении вычисляется и производная. В декартовых координатах

$$\boldsymbol{\nabla} = \boldsymbol{e}_x\,\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{e}_y\,\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{e}_z\,\frac{\partial}{\partial z}.$$

С помощью оператора $\boldsymbol{\nabla}$ и операций векторной алгебры можно выразить основные операции векторного анализа:

– градиент: $\mathrm{grad}\,f(\boldsymbol{r}) \equiv \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{r})$;

– дивергенция: $\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \equiv (\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))$;

– ротор: $\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \equiv [\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})]$;

– лапласиан: $\nabla^2 f(\boldsymbol{r}) \equiv \mathrm{div}\,\mathrm{grad}\,f(\boldsymbol{r})$;

$\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{e}_x\nabla^2 A_x(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{e}_y\nabla^2 A_y(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{e}_z\nabla^2 A_z(\boldsymbol{r})$.

Используются стандартные обозначения, введенные в ч. 1 для $3j$-, $6j$-, $9j$- и $3jm$-символов, коэффициентов Клебша – Гордана $C^{JM}_{j_1m_1\,j_2m_2}$ и Рака́ $W(abcd;ef)$, а также

$$\Pi_{ab\ldots} = \sqrt{(2a+1)(2b+1)\ldots}\ .$$

В пособии всюду используется атомная система единиц:
$\hbar = m_e = e = 1$.
(В единицах СИ
$\hbar = 1.055\cdot 10^{-34}$ Дж · с; $m_e = 9.11\cdot 10^{-31}$ кг; $e = 1.602\cdot 10^{-19}$ Кл).

Глава 1.

Параметризация матриц конечных вращений

Явный вид матриц конечных вращений (МКВ), введенных в разделе 1.3 ч. 1, полностью определяется способом параметризации поворота системы координат. В данной главе рассмотрены наиболее распространенные способы такой параметризации.

1.1. D-функция Вигнера

1.1.1. Определение D-функции

Наиболее распространенным способом параметризации вращения системы координат является использование *углов Эйлера* (φ, θ, χ), которое приводит к наиболее компактным аналитическим выражениям для МКВ. Рассмотрим данный способ подробно. Обозначим декартовы оси «исходной» системы координат как (x, y, z), а «повернутой» — как (x', y', z'). Их общий центр — O. Переход от системы $Oxyz$ к $Ox'y'z'$ осуществляется в результате трех последовательных действий (рис. 1.1).

1. Вращение системы координат против часовой стрелки вокруг оси Oz на угол $0 \leqslant \varphi < 2\pi$. При этом ось Ox переходит в Ox'', а Oy — в так называемую *узловую линию* ON.

2. Вращение против часовой стрелки вокруг узловой линии на угол $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$. Ось Ox'' при этом переходит в Ox''', а Oz — в Oz'.

3. Вращение против часовой стрелки вокруг оси Oz' на угол $0 \leqslant \chi < 2\pi$. В результате ось Ox''' и узловая линия ON занимают соответственно положения Ox' и Oy'.

В указанных интервалах своего изменения углы Эйлера однозначно характеризуют любое вращение.

D-функция Вигнера определяется как матрица конечных вращений в углах Эйлера. На основании формулы (1.85) ч. 1 запишем это определение более строго:

$$\boxed{D^{(j)}_{m'm}(\varphi, \theta, \chi) = R^{(j)}_{m'm}(\varphi, \theta, \chi) = \langle jm' |\, \hat{R}(\varphi, \theta, \chi)\, | jm \rangle\,,} \tag{1.1}$$

где

$$\hat{R}(\varphi, \theta, \chi) = \exp(-\mathrm{i}\,\chi \hat{J}_{z'})\, \exp(-\mathrm{i}\,\theta \hat{J}_N)\, \exp(-\mathrm{i}\,\varphi \hat{J}_z). \tag{1.2}$$

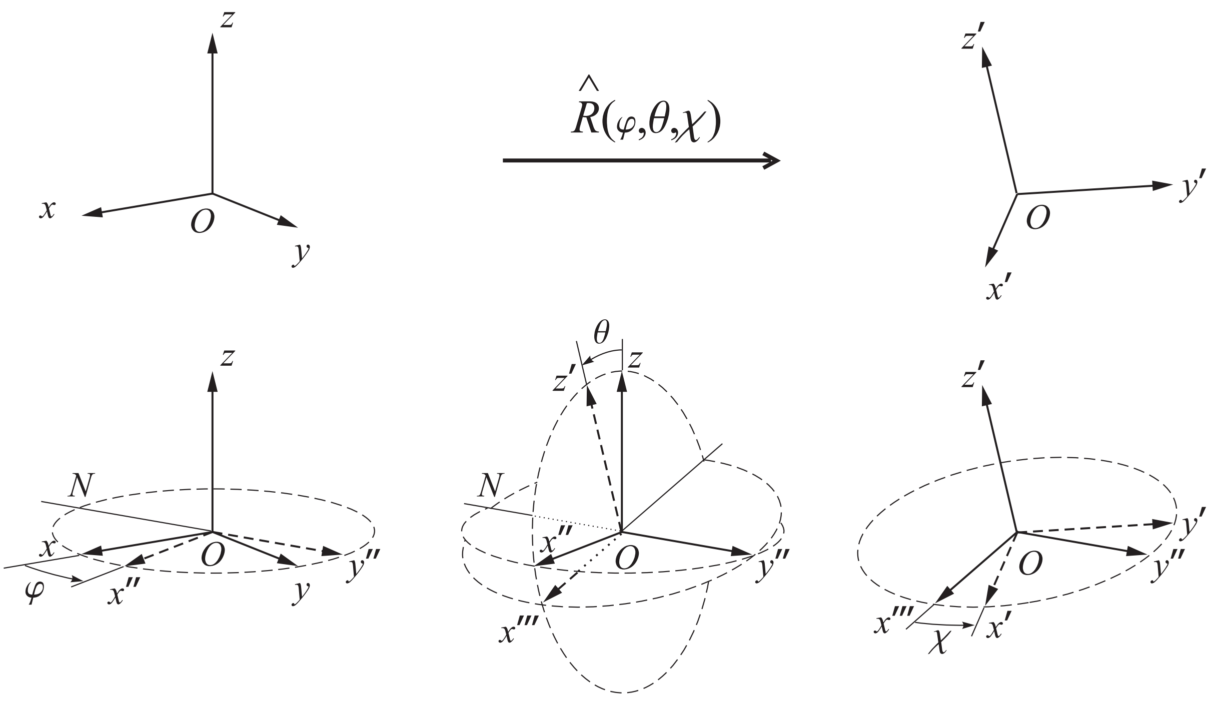

Рис. 1.1

1.1.2. Свойства D-функции

Как частный случай матрицы конечных вращений D-функция обладает всеми общими ее свойствами (см. (1.86), (1.87), (1.89), (1.91), (1.92), (1.95), (1.96) и (2.31)–(2.40) ч. 1). Здесь мы рассмотрим *специфические свойства D-функции.*

Факторизация

Прежде всего преобразуем выражение (1.2), поскольку оно содержит проекции момента в обеих системах координат и поэтому неудобно для практического использования.

Теорема. *Вращение $\hat{R}(\varphi,\theta,\chi)$ эквивалентно последовательным вращениям на угол χ вокруг Oz, затем на θ вокруг Oy и, наконец, на φ опять же вокруг оси Oz в **«исходной»** системе координат.*

Доказательство. Этот неожиданный результат есть следствие унитарности вращения. Оператор любой физической величины при поворотах системы координат преобразуется по правилу (1.76) ч. 1. Таким образом, $\exp(-\mathrm{i}\,\theta\hat{J}_N)$ есть результат унитарного преобразования $\exp(-\mathrm{i}\,\theta\hat{J}_y)$ при повороте $\exp(-\mathrm{i}\,\varphi\hat{J}_z)$, переводящем ось Oy в узловую линию ON. Отсюда

$$\exp(-\mathrm{i}\,\theta\hat{J}_N) = \exp(-\mathrm{i}\,\varphi\hat{J}_z)\,\exp(-\mathrm{i}\,\theta\hat{J}_y)\,\exp(\mathrm{i}\,\varphi\hat{J}_z). \qquad (1.3)$$