

3.14. Сложение моментов в квантовой механике.

3.14.1. Сложение двух моментов импульса.

Как складываются моменты импульса в квантовой механике? В классической физике моменты складываются как вектора, и суммарный вектор момента импульса может принимать любое значение. В квантовой физике они складываются тоже как вектора, но при этом их сумма не может принимать непрерывные, произвольные значения.

В этом параграфе будем рассматривать квантовые числа l и m , т.е. удобнее рассматривать моменты импульса в единицах \hbar и подразумевать, что эти числа связаны с моментами импульса соотношениями

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \text{ и } L_z = m\hbar.$$

Пусть имеется две частицы с орбитальными квантовыми числами l_1 и l_2 – орбитальными моментами. Операторы углового момента суммы (полного момента) и проекции запишутся:

$$\begin{aligned} \hat{l} &= \hat{l}_1 + \hat{l}_2 \\ \hat{l}_z &= \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z} \end{aligned} \quad (3.14.1)$$

Сосчитаем число возможных после сложения моментов состояний: для каждой отдельной частицы имеем число состояний с различными проекциями соответственно

$$(2l_1+1) \text{ и } (2l_2+1).$$

Если имеем невзаимодействующие частицы, для которых рассмотрение проще, то эти частицы рассматриваются независимо. Тогда полное число возможных состояний обеих частиц в системе равно произведению чисел состояний каждой из частиц:

$$(2l_1+1)(2l_2+1).$$

Аналогично тому, как мы делали и ранее, введем оператор квадрата суммы моментов:

$$\hat{l}^2 = \left(\hat{l}_1 + \hat{l}_2 \right)^2 \quad (3.14.2)$$

Можно показать, что он также коммутирует с любой проекцией, в частности с суммарной проекцией на выделенную ось z : $\hat{l}_z = \hat{l}_{1z} + \hat{l}_{2z}$:

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_z] = 0 \quad (3.14.3)$$

Если для каждой частицы в отдельности проекции имеют определенные значения m_1 и m_2 , то и проекция полного момента системы из двух частиц (т.е. собственное число \hat{l}_z) равна сумме: $m = m_1 + m_2$.

Проекция полного момента меняются также на единицу от максимального значения до минимального (“минус” максимальное значение). Следовательно, мы можем построить все возможные значения полного момента через проекции момента отдельных частиц, складывая их всеми возможными способами.

Рассмотрим пример, когда складываются 2 момента импульса $l_1 = 2$ и $l_2 = 1$. Запишем все возможные проекции суммарного момента импульса:

$$\begin{array}{ccccc} 2 + 1 = 3 & 1 + 1 = 2 & 0 + 1 = 1 & -1 + 1 = 0 & -2 + 1 = -1 \\ 2 + 0 = 2 & 1 + 0 = 1 & 0 + 0 = 0 & -1 + 0 = -1 & -2 + 0 = -2 \\ 2 - 1 = 1 & 1 - 1 = 0 & 0 - 1 = -1 & -1 - 1 = -2 & -2 - 1 = -3 \end{array} \quad (3.14.4)$$

Выпишем все 15 проекций суммарного момента, скомбинировав их в 3 группы:

- 1). (3, 2, 1, 0, -1, -2, -3),
- 2). (2, 1, 0, -1, -2),
- 3). (1, 0, -1).

Видно, что первая (синяя) группа представляет собой 7 проекций суммарного момента импульса $l_1 = 3$, вторая (красная) группа – 5 проекций момента импульса $l_2 = 2$, третья (сиреневая) группа – 3 проекции $l_3 = 1$. Итак, в разобранный пример получаем 3 возможных значения полного момента импульса при сложении двух моментов импульса $l_1 = 2$ и $l_2 = 1$. На этом примере можно заметить правило получения полного момента импульса при сложении двух моментов: меняем квантовые числа через единицу от их суммы $l_1 = l_1 + l_2$ до их разности $l_3 = l_1 - l_2$.

Рисунок 14.1 иллюстрирует различные полные моменты импульса системы двух частиц и в то же время одинаковые значения проекции момента импульса для различных полных моментов l . Цвета векторов на рис. 14.1 соответствуют цвету выделенных групп в (3.14.4). Напомним, что вектор полного момента импульса не имеет определенного направления в пространстве (поэтому на рис. 14.1. их направления условны), а сохраняется только его величина и проекция на выделенную ось z .

Построив таблицу аналогичную (3.14.4) и выбирая соответствующим образом группы проекций МИ, можно убедиться, что момент импульса l , являющийся суммой двух произвольных моментов импульса l_1 и l_2 , может принимать значения следующие значения:

$$l = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2, \dots, |l_1 - l_2| \quad (3.14.5)$$

При этом для каждого значения l имеем $(2l + 1)$ проекций момента на ось z : $m_l = l, l - 1, \dots, -l + 1, -l$.

В самом деле, построим таблицу (Таблица 14.1) всех возможных значений проекции полного момента импульса. Пусть для определенности $l_1 > l_2$, тогда число столбцов $2l_2 + 1$ дает общее число возможных значений суммарного момента импульса l . Строим таблицу таким образом, что проекция момента импульса в верхней строке левого столбца соответствует максимальному значению проекции $m_{max} = (l_1 + l_2)$, в то время в нижней строке правого столбца – минимальному значению $m_{min} = -(l_1 + l_2)$.

Все остальные проекции последовательно уменьшаются на единицу. Все проекции суммарного момента импульса выбираются, например, по правилу: для максимального момента импульса – берутся все значения в левом столбце и нижней строке (эти значения отмечены синим цветом). Для значения полного момента импульса на единицу меньше – значения во втором столбце и второй снизу строки (красный цвет), и так далее – для последующих значений МИ – столбец и строка меньших размеров. Таким образом, получаем все возможные значения момента импульса, определяемые выражением (3.14.5).

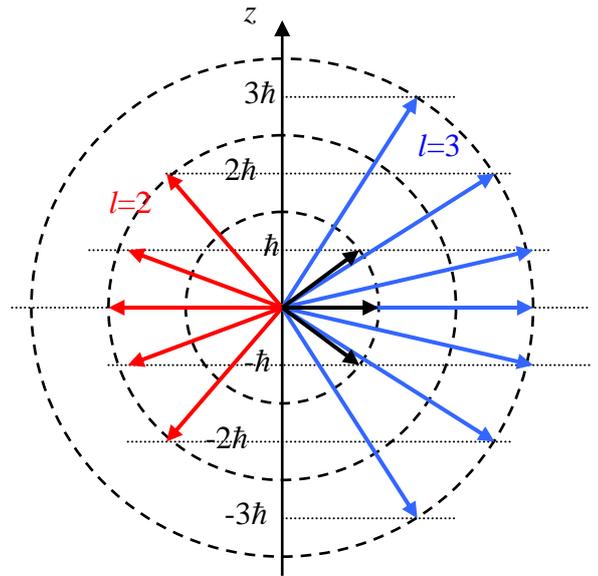


Рис. 14.1.

Таблица 14.1.

	число столбцов $2l_2 + 1$				
число строк $2l_1 + 1$	$l_1 + l_2$	$l_1 + l_2 - 1$	$l_1 + l_2 - 2$	$l_1 - l_2$
	$l_1 - 1 + l_2$	$l_1 - 1 + l_2 - 1$	$l_1 - 1 + l_2 - 2$	$l_1 - 1 - l_2$
	$l_1 - 2 + l_2$	$l_1 - 2 + l_2 - 1$	$l_1 - 2 + l_2 - 2$	$l_1 - 2 - l_2$

	$-l_1 + 2 + l_2$	$-l_1 + 2 + l_2 - 1$	$-l_1 + 2 + l_2 - 2$	$-l_1 + 2 - l_2$
	$-l_1 + 1 + l_2$	$-l_1 + 1 + l_2 - 1$	$-l_1 + 1 + l_2 - 2$	$-l_1 + 1 - l_2$
	$-l_1 + l_2$	$-l_1 + l_2 - 1$	$-l_1 + l_2 - 2$	$-l_1 - l_2$

Из таблицы 14.1 также легко видеть, что число состояний не изменилось – оно равно произведению числа строк на число столбцов: $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$:

$$[2(l_1 + l_2) + 1] + [2(l_1 + l_2 - 1) + 1] + \dots + [2(l_1 - l_2) + 1] = \frac{2(l_1 + l_2) + 1 + 2(l_1 - l_2) + 1}{2} (2l_2 + 1) = (3.14.6)$$

$$= (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$$

Следуя этим правилам, можно получить полный момент импульса атома с незаполненными оболочками. Группы электронов в заполненной оболочке, а, следовательно, атомы с замкнутыми оболочками, имеют суммарный момент импульса равный нулю.

Примечание 1. При сложении моментов импульса 3-х и более частиц правила становятся более сложными из-за того, какие пары частиц складывать в первую очередь. Для взаимодействующих электронов атомы с

различными полными моментами импульса имеют различные энергии, что приводит к усложнению его энергетической структуры.

3.14.2. Полный момент импульса одного электрона.

Рассмотрим теперь один электрон, обладающего орбитальным l и спиновым $s = 1/2$ моментами импульса. Моменты складываются по общему правилу сложения моментов (3.14.5). Поэтому полный момент импульса одного электрона принимает 2 значения:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad (3.14.6)$$

$$j = l \pm s = l \pm \frac{1}{2} \quad (3.14.7)$$

Проекция полного момента импульса также могут принимать значения через единицу:

$$m_j = j, \quad j-1, \quad j-2, \dots, \quad -j+1, \quad -j \quad (3.14.8)$$

Примеры:

	орбитальный момент	полный момент
1)	$l = 0,$	$j = 1/2;$
2)	$l = 1,$	$j = 1/2, 3/2;$
3)	$l = 2,$	$j = 3/2, 5/2$
	и т.д.	

Обычная запись состояния электрона в центрально симметричном поле с помощью следующей четверки квантовых чисел: n, l, j, m_j . Итак, получаем следующие состояния с учетом спина и полного момента:

$n = 1, l = 0, j = 1/2,$	–	$1s_{1/2}$
$n = 2, l = 0, j = 1/2,$	–	$2s_{1/2}$
$n = 2, l = 1, j = 1/2,$	–	$2p_{1/2}$
$j = 3/2,$	–	$2p_{3/2}$
$n = 3, l = 0, j = 1/2,$	–	$3s_{1/2}$
$l = 1, j = 1/2,$	–	$3p_{1/2}$
$j = 3/2,$	–	$3p_{3/2}$
$l = 2, j = 3/2,$	–	$3d_{3/2}$
$j = 5/2,$	–	$3d_{5/2}$

Энергия состояния электрона в атомах зависит от полного момента импульса. Это обстоятельство и объясняет в спектрах атомов щелочных металлов дублетную структуру уровней, о которой говорилось в §3.12. Наружный электрон в этих атомах в первом приближении находится в центрально симметричном поле (поле, созданном ядром и электронами заполненных внутренних оболочек). Однако это поле отличается от чисто кулоновского поля, поэтому уровни энергии с разными l и j расщепляются. Поэтому при оптическом переходе из np состояния в ns получаем дублетную структуру линий в спектре, так как np расщепляется на 2 подуровня $np_{1/2}$ и $np_{3/2}$. На рис. 14.2 схематически показано это расщепление для атома лития, приводящее к дублетной структуре в спектре испускания.

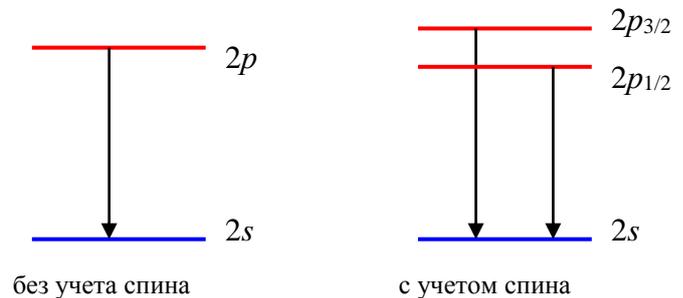


Рис. 14.2.

Взаимодействие электронов, зависящее от величины и взаимной ориентации их орбитального и спинового моментов импульса и приводящее к так называемой тонкой структуре уровней энергии системы, носит название *спин-орбитального взаимодействия*.