Chapter 1

角动量理论



Figure 1.1: 一撮灰厌恶模电

1.1 角动量的一般理论

1.1.1 转动算符与角动量算符

假设我们对系统进行一个旋转操作，系统的状态将由 $|\alpha\rangle$ 变为 $\mathcal{D}|\alpha\rangle$. 我们先考虑绕 x 轴的无穷小转动，它必然满足以下要求：

1. $\mathcal{D}_x^\dagger(\mathrm{d}\theta)\mathcal{D}_x(\mathrm{d}\theta)=\mathbf{1}$;
2. $\mathcal{D}_x(\mathrm{d}\theta'')\mathcal{D}_x(\mathrm{d}\theta')=\mathcal{D}_x(\mathrm{d}\theta''+\mathrm{d}\theta')$;
3. $\mathcal{D}_x^{-1}(\mathrm{d}\theta)=\mathcal{D}_x(-\mathrm{d}\theta)$;
4. $\lim\limits_{\mathrm{d}\theta\to 0}\mathcal{D}_x(\mathrm{d}\theta)=\mathbf{1}$.

存在一个幺正算符 J_x，使得

$$\mathcal{D}_x(\mathrm{d}\theta)=\mathbf{1}-\frac{\mathrm{i}\mathrm{d}\theta}{\hbar}J_x \tag{1.1}$$

这个 J_x 就是 x 方向上的角动量算符，$\mathbf{J}=J_x\mathbf{e}_x+J_y\mathbf{e}_y+J_z\mathbf{e}_z$. 注意，我们这里没有对 $\mathbf{J}$ 具体是什么做任何说明！请不要认为 $\mathbf{J}=\mathbf{x}\times\mathbf{p}$，只有对轨道角动量才是如此，而自旋角动量与 x 和 p 没有任何关系.

对三维空间中的转动是有

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon)-R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon)=R_z(\varepsilon^2) \tag{1.2}$$

我们把这个当成一切转动所共有的性质，即

$$\mathcal{D}_x(\varepsilon)\mathcal{D}_y(\varepsilon)-\mathcal{D}_y(\varepsilon)\mathcal{D}_x(\varepsilon)=\mathcal{D}_z(\varepsilon^2) \tag{1.3}$$

把式(1.1)代入，可以求出

$$[J_x,J_y]=\mathrm{i}\hbar J_z$$

对其它的转轴也是如此，于是我们得出量子力学中角动量的对易关系

$$[J_i,J_y]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \tag{1.4}$$

1.1.2 角动量算符的本征值，矩阵表示

引入角动量平方算符 $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$，则

$$[\mathbf{J}^2, J_i] = 0 \tag{1.5}$$

于是 $\mathbf{J}^2$ 和 J_i 有共同的完备本征矢量组. 我们引入升降算符

$$J_\pm = J_x \pm \mathrm{i}J_y \tag{1.6}$$

可以证明

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \tag{1.7}$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \tag{1.8}$$

我们可以证明

$$J_z J_\pm |a, b\rangle = (b \pm \hbar) J_\pm |a, b\rangle \tag{1.9}$$

$$J^2 J_\pm |a, b\rangle = a J_\pm |a, b\rangle \tag{1.10}$$

可见，$J_\pm$ 作用于本征矢 $|a, b\rangle$ 上时，不改变角动量的平方，只使得角动量的 z 分量上升或下降 $\hbar.J_\pm |a, b\rangle$ 是 J_z 的本征值为 $b \pm \hbar$ 的本征矢量，而 J_z 非简并，故 $J_\pm |a, b\rangle = c_\pm |a, b \pm \hbar\rangle$，用内积可以求出归一化系数 $c_\pm = \sqrt{a - b^2 \mp b\hbar}$，故

$$J_\pm |a, b\rangle = \sqrt{a - b^2 \mp b\hbar}\, |a, b \pm \hbar\rangle \tag{1.11}$$

首先，显然 J^2 的本征值都是正数，故 $a > 0$. 其次

$$\begin{aligned} a - b^2 &= \langle a, b|(J^2 - J_z^2)|a, b\rangle \\ &= \frac{1}{2}\langle a, b|(J_+ J_- + J_- J_+)|a, b\rangle \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

可得 $a \geq b^2$. 这意味着对某个 a，b 存在上限 $b_{\max}$ 和下限 $b_{\min}$，应当有 $J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$ 以及 $J_- |a, b_{\min}\rangle = 0$. 由(1.12)得 $a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar) =$

$b_{\min}(b_{\min}-\hbar)$，从而 $b_{\min}=-b_{\max}$. 通过上升算符逐次移动必然能够从 $b_{\min}$ 上升到 $b_{\max}$. 设 $b_{\max}=b_{\min}+n\hbar$，则应有 $b_{\max}=\dfrac{n\hbar}{2}$. 规定 $j=\dfrac{n}{2}$，$b=m\hbar$，则对给定的 j，m 会有 $-j,-j+1,\cdots,j-1,j$ 共 $2j+1$ 种取值. 综上，角动量算符的本征方程为

$$J^2\left|j,m\right\rangle=j(j+1)\hbar^2\left|j,m\right\rangle \tag{1.12}$$

$$J_z\left|j,m\right\rangle=m\hbar\left|j,m\right\rangle \tag{1.13}$$

下面我们考虑角动量算符的矩阵元. 首先，显然有

$$\left\langle j',m'\right|J^2\left|j,m\right\rangle=j(j+1)\hbar^2\delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{1.14}$$

$$\left\langle j',m'\right|J_z\left|j,m\right\rangle=m\hbar\delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{1.15}$$

其次，(1.12)可以写为 $J_\pm\left|j,m\right\rangle=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\hbar\left|j,m\pm1\right\rangle$，从而

$$\langle j',m'|J_\pm|j,m\rangle=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\hbar\delta_{j'j}\delta_{m',m\pm1} \tag{1.16}$$

从而可以导出 J_x 和 J_y 的矩阵元

$$\left\langle j',m'\right|J_x\left|j,m\right\rangle=\frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{m',m+1}+\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m',m-1}\right] \tag{1.17}$$

$$\left\langle j',m'\right|J_y\left|j,m\right\rangle=\frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{m',m+1}-\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m',m-1}\right] \tag{1.18}$$

1.1.3 有限转动算符，矩阵表示

有限转动可以通过相继绕一个轴的连续转动得到，例如，对于绕 z 轴转 θ 的转动，其转动算符

$$\mathcal{D}_z(\theta)=\lim_{n\to\infty}\left[\mathbf{1}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\theta}{n}J_z\right]^n=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\theta J_z}{\hbar}\right) \tag{1.19}$$

一般地，绕 $\mathbf{n}$ 转动 ϕ 的有限转动算符如下，其中 R 是该转动对应的正交矩阵

$$\mathcal{D}(R)=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar}\right) \tag{1.20}$$

$\mathbf{J}^2$ 与 J_k 可对易，故 $\mathbf{J}^2\mathcal{D}(R)\left|j,m\right\rangle=\mathcal{D}(R)\mathbf{J^2}\left|j,m\right\rangle=j(j+1)\hbar^2\mathcal{D}(R)\left|j,m\right\rangle$，这说明 $\mathcal{D}(R)\left|j,m\right\rangle$ 是 $\mathbf{J}^2$ 的本征值为 $j(j+1)\hbar$ 的本征态. 则对于不同的 j'，必有 $\left\langle j',m'\right|\mathcal{D}(R)\left|j,m\right\rangle=0$. 故我们只需要考虑

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m',m}(R)\equiv\langle j,m'|\mathcal{D}(R)|j,m\rangle=\left\langle j,m'\left|\exp\left(\frac{-\mathrm{i}\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\phi}{\hbar}\right)\right|j,m\right\rangle \tag{1.21}$$

这些矩阵元称作 Winger 函数. 它的物理意义很明显，设系统初态为 $|j,m\rangle$，做旋转 $\mathcal{D}(R)$，对旋转后的系统进行观测，则 $\mathcal{D}^{(j)}_{m',m}(R)$ 就是系统坍缩到 $|j,m'\rangle$ 态的概幅.

由 $\mathcal{D}^{(j)}_{m',m}(R)$ 形成的 $2j+1$ 阶矩阵称为 $\mathcal{D}(R)$ 的 $2j+1$ 阶不可约矩阵表示.$\mathcal{D}(R)$ 的作用并不能由单个 j 完全表征，通过选取合适的基底，可以将 $\mathcal{D}(R)$ 写成分块矩阵的形式，不同 j 对应的 $\mathcal{D}^{(j)}_{m',m}$ 形成不同的 $2j+1$ 阶矩阵块.

1.2 轨道角动量

轨道角动量的定义为

$$\mathbf{L}=\mathbf{x}\times\mathbf{p} \tag{1.22}$$

容易验证它满足

$$[L_i,L_j]=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hbar L_k \tag{1.23}$$

现在我们把 $1-\dfrac{\mathrm{i}\delta\phi}{\hbar}L_z$ 作用在 $|\mathbf{x}'\rangle$ 上，看它是否相当于一个无穷小转动变换.

$$\begin{aligned}\left(1-\frac{\mathrm{i}\delta\phi}{\hbar}L_z\right)|x',y',z'\rangle &= \left[1-\mathrm{i}\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(xp_y-yp_x)\right]|x',y',z'\rangle\\ &= \left[1-\mathrm{i}\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(p_yx-p_xy)\right]|x',y',z'\rangle\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \left[1 - \mathrm{i}\left(\frac{x'\delta\phi}{\hbar}\right)p_y + \mathrm{i}\left(\frac{y'\delta\phi}{\hbar}\right)p_x\right]|x', y', z'\rangle \\
&= \left[1 + \mathcal{J}_y(x'\delta\phi) - \mathcal{J}_x(y'\delta\phi)\right]|x', y', z'\rangle \\
&= |x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle
\end{aligned}
$$

如果我们引入球坐标，则 $|x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle$ 可以写成 $|r, \theta, \phi - \delta\phi\rangle$. 可见，$L_z$ 正是绕 z 轴的无穷小旋转变换的生成元.

下面我们考虑无穷小转动变换如何影响系统的波函数，计算可得

$$
\langle \mathbf{x}'|L_z|\alpha\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \tag{1.24}
$$

同理

$$
\langle \mathbf{x}'|L_x|\alpha\rangle = \mathrm{i}\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \tag{1.25}
$$

$$
\langle \mathbf{x}'|L_y|\alpha\rangle = -\mathrm{i}\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \tag{1.26}
$$

由此可导出

$$
\langle \mathbf{x}'|\,\mathbf{L}^2\,|\alpha\rangle = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \tag{1.27}
$$

在(1.12)和(1.13)左侧乘 $\langle \mathbf{x}'|$ 得

$$
-\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\langle\theta', \phi'|l, m\rangle = l(l+1)\langle\theta', \phi'|l, m\rangle \tag{1.28}
$$

$$
-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\langle\theta', \phi'|l, m\rangle = m\langle\theta', \phi'|l, m\rangle \tag{1.29}
$$

由数理方程的内容，这个方程的解正是球谐函数

$$
\langle\theta', \phi'|l, m\rangle = Y_l^m(\theta, \phi) \tag{1.30}
$$

1.3 中心势场，氢原子

我们可以直截了当地证明

$$
\mathbf{L}^2 = \mathbf{x}^2\mathbf{p}^2 - (\mathbf{x}\cdot\mathbf{p})^2 + \mathrm{i}\hbar\mathbf{x}\cdot\mathbf{p} \tag{1.31}
$$

从而可得

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = r^2 \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle + \hbar^2 \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + 2r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right) \tag{1.32}$$

即动能

$$\left\langle \mathbf{x}' \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right| \alpha \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + \frac{1}{2mr^2} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle \tag{1.33}$$

中心力场的势 $V(r)$ 是球对称的，系统的 Hamilton 量为

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \tag{1.34}$$

由(1.31)可知 $[\mathbf{L}, \mathbf{p}^2] = [\mathbf{L}, \mathbf{x}^2] = 0$，从而 $[\mathbf{L}, H] = 0$，故 $H, \mathbf{L}^2, L_z$ 有完备的共同本征矢，记作 $|E, l, m\rangle$，则

$$H |E, l, m\rangle = E |E, l, m\rangle \tag{1.35}$$

$$\mathbf{L}^2 |E, l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |E, l, m\rangle \tag{1.36}$$

$$L_z |E, l, m\rangle = m\hbar |E, l, m\rangle \tag{1.37}$$

左乘 $\langle \mathbf{x}' |$，并由(1.32)可得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(r^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] \langle \mathbf{x}' | E, l, m \rangle = E \langle \mathbf{x}' | E, l, m \rangle \tag{1.38}$$

对氢原子 $V(r) = -\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$，问题的解为

$$\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = \sqrt{\left(\frac{2}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right) Y_{l,m}(\theta, \phi) \tag{1.39}$$

其中 $L_{q-p}^p(x) \equiv e^x \dfrac{\mathrm{d}^q}{\mathrm{d}x^q}(e^{-x} x^q)$ 为关联 Laguerre 多项式，$a = \dfrac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0.529\text{fm}$ 为 Bohr 半径.n 为主量子数，氢原子的能级

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} \tag{1.40}$$

1.4 自旋角动量

1.4.1 自旋

Stern-Gerlach 实验的大致过程如(1.2)所示. 一束银原子从高温炉中射出，经过一区域，区域内部加有 z 方向上不均匀的磁场. 之后银原子将裂为两束，一束偏上，一束偏下.

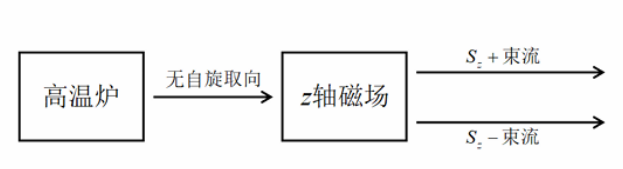


Figure 1.2: Stern-Gerlach 实验

银原子可以视为电子，不均匀磁场的作用即相当于对电子 z 方向上的自旋 S_z 进行了测量，上下两束流分别对应 $\pm\frac{\hbar}{2}$，它们都是 S_z 的本征值，记对应本征矢为 $|S_z;\pm\rangle$，简写为 $|\pm\rangle$，则

$$S_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle \tag{1.41}$$

且

$$S_z = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \tag{1.42}$$

如图(1.3)，进行序列 Stern-Gerlach 实验，将 S_z+ 束流引入另一 x 方向上有不均匀磁场的区域，发现银原子分为均等的两束.

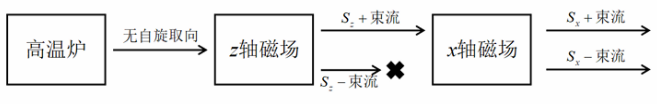


Figure 1.3: 序列 Stern-Gerlach 实验

这说明，处于 $|S_z;+\rangle$ 的系统，对其 x 方向上的自旋 S_x 进行测量，则各以 50% 的概率测量到 $|S_x;+\rangle$ 和 $|S_x;-\rangle$. 即

$$|\langle S_x;+|+\rangle| = |\langle S_x;-|-\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{1.43}$$

对 $|-\rangle$ 亦是如此. 结合 $|S_x;\pm\rangle$ 的正交性，我们可以构造

$$|S_x;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle \pm e^{\mathrm{i}\delta_1}|-\rangle\right) \tag{1.44}$$

其中 δ_1 是相因子. 同理会有

$$|S_y;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle \pm e^{\mathrm{i}\delta_2}|-\rangle\right) \tag{1.45}$$

再由 $|\langle S_y;\pm|S_x;+\rangle| = |\langle S_y;\pm|S_x;-\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 得 $\frac{1}{2}\left[1 \pm e^{\mathrm{i}(\delta_1-\delta_2)}\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}$，即 $\delta_2 - \delta_1 = \pm\frac{\pi}{2}$. 取定 $\delta_1 = 0$ 以及 $\delta_2 = \frac{\pi}{2}$ 得

$$|S_x;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle) \tag{1.46}$$

$$|S_y;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm \mathrm{i}|-\rangle) \tag{1.47}$$

从而

$$S_x = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \tag{1.48}$$

$$S_y = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \tag{1.49}$$

容易验证

$$[S_i, S_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hbar S_k \tag{1.50}$$

此外，很容易发现 $[S^2, S_i] = 0$，因为

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \tag{1.51}$$

1.4.2 自旋 1/2 系统的转动算符，自旋进动

考虑把一个自旋 1/2 系统绕 z 轴旋转一个角度 ϕ，系统的状态由 $|\alpha\rangle$ 变为 $|\alpha\rangle_R = \exp\left(\frac{-\mathrm{i}\phi S_z}{\hbar}\right)|\alpha\rangle$. 现在对 x 方向自旋进行一个测量，期望值

$$\begin{aligned}
\langle S_x\rangle &= {}_R\langle\alpha| S_x |\alpha\rangle_R \\
&= \langle\alpha| \exp\left(\frac{\mathrm{i}\phi S_z}{\hbar}\right) S_x \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\phi S_z}{\hbar}\right)|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha| \left[\frac{\hbar}{2}\exp\left(\frac{\mathrm{i}\phi S_z}{\hbar}\right)(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\phi S_z}{\hbar}\right)\right]|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha| \left[\frac{\hbar}{2}\left(e^{\frac{\mathrm{i}\phi}{2}}|+\rangle\langle -| e^{\frac{\mathrm{i}\phi}{2}} + e^{-\frac{\mathrm{i}\phi}{2}}|-\rangle\langle +| e^{-\frac{\mathrm{i}\phi}{2}}\right)\right]|\alpha\rangle \\
&= \langle S_x\rangle\cos\phi - \langle S_y\rangle\sin\phi
\end{aligned}$$

即转动对系统 x 方向上自旋期望值的影响为

$$\langle S_x\rangle \to \langle S_x\rangle\cos\phi - \langle S_y\rangle\sin\phi \tag{1.52}$$

同样计算可知转动对系统 y 方向及 z 方向上自旋期望值的影响为

$$\langle S_y\rangle \to \langle S_y\rangle\cos\phi + \langle S_x\rangle\sin\phi \tag{1.53}$$

$$\langle S_z\rangle \to \langle S_z\rangle \tag{1.54}$$

另一方面，把 $|\alpha\rangle$ 傅里叶展开为 $|+\rangle\langle +|\alpha\rangle + |-\rangle\langle -|\alpha\rangle$，则对系统的转动还会带来相因子

$$\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\phi S_z}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = e^{-\frac{\mathrm{i}\phi}{2}}|+\rangle\langle +|\alpha\rangle + e^{\frac{\mathrm{i}\phi}{2}}|-\rangle\langle -|\alpha\rangle \tag{1.55}$$

1.4.3 Pauli 形式

对自旋 1/2 系统可引入 Pauli 形式

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \equiv \chi_+ \tag{1.56}$$

$$|-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_- \tag{1.57}$$

则 $\langle +| \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \chi_+^\dagger$，$\langle -| \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \chi_-^\dagger$. 对任意的右矢 $|\alpha\rangle$ 有

$$|\alpha\rangle = |+\rangle \langle +|\alpha\rangle + |-\rangle \langle -|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix} \equiv \chi \tag{1.58}$$

对左矢则有 $\langle \alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle \alpha|+\rangle & \langle \alpha|-\rangle \end{pmatrix} = \chi^\dagger$.

则我们可以用 Pauli 矩阵表示自旋角动量算符

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\sigma \tag{1.59}$$

其中

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.60}$$

显然，σ_z 的本征值为 ± 1，对应的本征矢量就是 χ_+ 和 χ_-. 且 Pauli 矩阵的对易关系为

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k \tag{1.61}$$

设绕 $\mathbf{n}$ 将系统转动 ϕ，则有限转动算符可以表示为

$$\mathcal{D}_{\mathbf{n}}(\phi) = e^{-\mathrm{i}\phi\sigma\cdot\mathbf{n}} = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\phi}{2} - \mathrm{i}n_z \sin\dfrac{\phi}{2} & (-\mathrm{i}n_x - n_y)\sin\dfrac{\phi}{2} \\ (-\mathrm{i}n_x + n_y)\sin\dfrac{\phi}{2} & \cos\dfrac{\phi}{2} + \mathrm{i}n_z \sin\dfrac{\phi}{2} \end{pmatrix} \tag{1.62}$$

1.5 角动量的叠加

1.5.1 耦合表象与非耦合表象

考虑定义在两个互相独立且正交的空间上的角动量算符的叠加. 这里稍作解释：态矢量空间是一个无限维的空间，但我们往往只需要考虑它的有限维子空间，比如研究 z 方向的自旋时，只需要考虑二维希尔伯特空间即可. 互相独

立且正交的空间是态矢量空间的不同子空间，相互独立是指两个子空间上的算符被各自限制，不能作用于另一个空间上，正交则是指两个空间中的态矢量相互正交. 将两个角动量算符分别记作 $\mathbf{J}_1$ 和 $\mathbf{J}_2$，则总角动量算符

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \equiv \mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{J}_2 \tag{1.63}$$

$\mathbf{J}_1$ 和 $\mathbf{J}_2$ 在各自空间满足对易关系

$$[J_{1i}, J_{1j}] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk} J_{1k} \tag{1.64}$$

$$[J_{2i}, J_{2j}] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk} J_{2k} \tag{1.65}$$

而两个空间的角动量算符之间（这里 $\mathbf{J_1}$ 已经是 $\mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{1}$，$\mathbf{J}_2$ 同理，以后不再说明）总是可对易的

$$[J_{1i}, J_{2j}] = 0 \tag{1.66}$$

可以验证，总角动量算符 $\mathbf{J}$ 也是角动量算符，因此，角动量的一般理论对其也适用. 对于态矢空间（这里是两个空间的直积）的基底的选择，有两种方案.

一方面，容易发现 $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$ 彼此对易，于是可以选择它们的共同本征矢 $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ 作为态空间的基底，称为无耦合表象. 另一方面，可以证明 $\mathbf{J}^2$ 与 $\mathbf{J}_1^2$ 和 $\mathbf{J}_2^2$ 对易，于是可选择 $\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_z$ 的共同本征矢 $|j_1, j_2; j, m\rangle$ 作为态空间的基底，称为耦合表象. 因为 $\mathbf{J}^2$ 和 J_{1z}, J_{2z} 都不可对易，所以这两种选择都是 CSCO.

1.5.2 CG 系数

考虑两组基底之间的变换关系.

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle \tag{1.67}$$

其中 $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle$ 称为 Clebsch-Gordan 系数，简称 CG 系数. 下面我们研究它的性质.

首先，$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \left(J_z - J_{1z} - J_{2z}\right) | j_1, j_2; j, m\rangle = (m - m_1 - m_2)\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle = 0$，故除了 $m = m_1 + m_2$ 以外的所有 CG 系数都为 0.

其次，给定 j_1, j_2，则 $m_{1\max} = j_1, m_{2\max} = j_2$，可能最大的 $m_{\max} = j_1 + j_2$，因而可能最大的 $j_{max} = j_1 + j_2$. 要使无耦合表象维数

$$D = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \tag{1.68}$$

与耦合表象维数

$$D = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} 2j + 1 = j_{\max}^2 - j_{\min}^2 + 2j_{\max} + 1 \tag{1.69}$$

相等，必须有 $j_{\min} = |j_1 - j_2|$. 于是 j_1, j_2 确定时，$j = |j_1 - j_2|, \cdots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$.

我们要求 CG 系数都是实数，故

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle = \langle j_1, j_2; j, m | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \tag{1.70}$$

实的幺正矩阵都是正交矩阵，故 CG 系数要满足正交归一关系，即

$$\sum_j \sum_m \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle \langle j_1, j_2; m_1', m_2' | j_1, j_2; j, m\rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \tag{1.71}$$

或

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j', m'\rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \tag{1.72}$$

1.5.3 CG 系数的递推关系

在 j_1, j_2 和 j 固定的情况下，具有不同 m_1 和 m_2 的 CG 系数彼此通过递推关系联系. 首先

$$J_\pm | j_1, j_2; j, m\rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1} \sum_{m_2} | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle \tag{1.73}$$

由(1.16)可得

$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j_1,j_2;j,m\pm1\rangle\\
&=\sum_{m_1}\sum_{m_2}\Big[\sqrt{(j_1\mp m_1)(j_1\pm m_1+1)}\,|j_1,j_2;m_1\pm1,m_2\rangle\\
&+\sqrt{(j_1\mp m_1)(j_1\pm m_1+1)}\,|j_1,j_2;m_1\pm1,m_2\rangle\Big]\\
&\times\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle
\end{aligned}\tag{1.74}$$

左乘 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|$ 即可得到

$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j_1,j_2;j,m\pm1\rangle\\
&=\sqrt{(j_1\mp m_1+1)(j_1\pm m_1)}\langle j_1,j_2;m_1\mp1,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle\\
&+\sqrt{(j_2\mp m_2+1)(j_2\pm m_2)}\langle j_1,j_2;m_1,m_2\mp1|j_1,j_2;j,m\rangle
\end{aligned}\tag{1.75}$$

CG 系数的非零条件此时变为

$$m_1+m_2=m\pm1\tag{1.76}$$

1.6 张量算符

1.6.1 矢量算符

矢量算符的分量 V_i 在转动后的期望值

$$\langle\alpha|\mathcal{D}^\dagger(R)V_i\mathcal{D}(R)|\alpha\rangle=\sum_j R_{ij}\langle\alpha|V_j|\alpha\rangle\tag{1.77}$$

应当等于转动后矢量算符的分量的期望. 故转动变换下矢量算符的分量按

$$\mathcal{D}^\dagger(R)V_i\mathcal{D}(R)=\sum_j R_{ij}V_j\tag{1.78}$$

变换. 考虑无穷小转动 $\mathcal{D}=1-\dfrac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\varepsilon$，则矢量可以等价地定义为

$$[V_i,V_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}V_k\tag{1.79}$$

1.6.2 Descartes 张量和不可约球张量

推广(1.79)可得 Descartes 张量的分量在转动下的变换

$$\mathcal{D}^{\dagger}(R)T_{ij}\mathcal{D}(R)=\sum_{i',j'}R_{ii'}R_{jj'}T_{i'j'} \tag{1.80}$$

由

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{n}'|l,m\rangle &= \langle\mathbf{n}|\mathcal{D}(R^{-1})|l,m\rangle\\ &= \sum_{m'}\langle\mathbf{n}|l,m'\rangle\langle l,m'|\mathcal{D}(R^{-1})|l,m\rangle\end{aligned}$$

可知

$$Y_m^l(\mathbf{n}')=\sum_{m'}Y_{m'}^l(\mathbf{n})\mathcal{D}^{(l)}_{m',m}(R^{-1}) \tag{1.81}$$

故转动下球谐函数的变换法则为

$$\mathcal{D}^{\dagger}(R)Y_m^l\mathcal{D}(R)=\sum_{m'}Y_{m'}^l\mathcal{D}^{(l)*}_{m',m}(R) \tag{1.82}$$

$T_q^{(k)}=Y_{l=k}^{m=q}$ 在转动下的变换法则为

$$\mathcal{D}^{\dagger}(R)T_q^{(k)}\mathcal{D}(R)=\sum_{q'=-k}^{k}\mathcal{D}^{(k)*}_{q,q'}T_{q'}^{(k)} \tag{1.83}$$

这给出了 k 阶球张量的定义. 考虑无穷小转动，可以导出球张量的等价定义

$$[J_z,T_q^{(k)}]=\hbar qT_q^{(k)} \tag{1.84}$$

$$[J_{\pm},T_q^{(k)}]=\hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}T_{q\pm1}^{(k)} \tag{1.85}$$

1.6.3 张量积

我们按

$$T_q^{(k)}=\sum_{q_1}\sum_{q_2}\langle k_1,k_2;q_1,q_2|k_1,k_2;k,q\rangle X_{q_1}^{(k_1)}Z_{q_2}^{(k_2)} \tag{1.86}$$

定义两个张量的积. 还需要证明在转动下，$T_q^{(k)}$ 的变换和(1.83)一致，从略.

1.6.4 张量的矩阵元以及 Wigner-Eckart 定理

首先，我们证明 m 选择定则

$$\langle \alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle = 0 \text{ unless } m' = q + m \tag{1.87}$$

证明很简单，由(1.84)可知 $\langle \alpha'; j', m' | \left([J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)} \right) | \alpha; j, m \rangle = [(m' - m)\hbar - \hbar q] \langle \alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle = 0$，故 $\alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle =$ 除非 $m' = q + m$.

下面我们来看量子力学中重要的 Wigner-Eckart 定理

$$\langle \alpha'; j' m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle = \frac{\langle \alpha'; j' || T^{(k)} || \alpha; j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \langle j, k; m, q | j, k; j' m' \rangle \tag{1.88}$$

其中双竖线表示矩阵元完全不依赖于 m, m' 和 q.