

角动量理论

鸣哩天才琪露諾

华中科技大学物理学院

日期：2025年3月13日

1 角动量的一般理论

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

存在一个幺正算符 J_x ，使得

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

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

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = R_z(\varepsilon^2) \quad (2)$$

我们把这个当成一切转动所共有的性质，即

$$\mathcal{D}_x(\varepsilon)\mathcal{D}_y(\varepsilon) - \mathcal{D}_y(\varepsilon)\mathcal{D}_x(\varepsilon) = \mathcal{D}_z(\varepsilon^2) \quad (3)$$

把式(1)代入，可以求出

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z$$

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

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \quad (4)$$

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

$$[\mathbf{J}^2, J_i] = 0 \quad (5)$$

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

$$J_\pm = J_x \pm i J_y \quad (6)$$

可以证明

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (7)$$

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm} \quad (8)$$

我们可以证明

$$J_z J_{\pm} |a, b\rangle = (b \pm \hbar) J_{\pm} |a, b\rangle \quad (9)$$

$$J^2 J_{\pm} |a, b\rangle = a J_{\pm} |a, b\rangle \quad (10)$$

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

$$J_{\pm} |a, b\rangle = \sqrt{a - b^2 \mp b\hbar} |a, b \pm \hbar\rangle \quad (11)$$

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(11)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 $b_{\max} = \frac{n\hbar}{2}$. 规定 $j = \frac{n}{2}$, $b = m\hbar$, 则对给定的 j, m 会有 $-j, -j+1, \dots, j-1, j$ 共 $2j+1$ 种取值. 综上, 角动量算符的本征方程为

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad (12)$$

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad (13)$$

下面我们考虑角动量算符的矩阵元. 首先, 显然有

$$\langle j', m' | J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (14)$$

$$\langle j', m' | J_z |j, m\rangle = m\hbar \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (15)$$

其次, (11)可以写为 $J_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m+1)} \hbar |j, m \pm 1\rangle$, 从而

$$\langle j', m' | J_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m+1)} \hbar \delta_{j'j} \delta_{m'm \pm 1} \quad (16)$$

从而可以导出 J_x 和 J_y 的矩阵元

$$\langle j', m' | J_x |j, m\rangle = \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m', m+1} + \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m', m-1} \right] \quad (17)$$

$$\langle j', m' | J_y |j, m\rangle = \frac{\hbar}{2i} \left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m', m+1} - \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m', m-1} \right] \quad (18)$$

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

$$\mathcal{D}_z(\theta) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{n} J_z \right]^n = \exp \left(-\frac{i\theta J_z}{\hbar} \right) \quad (19)$$

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

$$\mathcal{D}(R) = \exp \left(-\frac{i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar} \right) \quad (20)$$

\mathbf{J}^2 与 J_k 可对易, 故 $\mathbf{J}^2 \mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \mathcal{D}(R) \mathbf{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 \mathcal{D}(R) |j, m\rangle$, 这说明 $\mathcal{D}(R) |j, m\rangle$ 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 $\langle j', m' | \mathcal{D}(R) |j, m\rangle = 0$. 故我们只需要考虑

$$\mathcal{D}_{m', m}^{(j)}(R) \equiv \langle j, m' | \mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \left\langle j, m' \left| \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}\phi}{\hbar}\right) \right| j, m \right\rangle \quad (21)$$

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 $\mathcal{D}_{m', m}^{(j)}(R)$ 就是系统坍缩到 $|j, m'\rangle$ 态的概率.

由 $\mathcal{D}_{m', m}^{(j)}(R)$ 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 $\mathcal{D}_{m', m}^{(j)}$ 形成不同的 $2j+1$ 阶矩阵块.

2 轨道角动量

轨道角动量的定义为

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \quad (22)$$

容易验证它满足

$$[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar L_k \quad (23)$$

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

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

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

$$\langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (24)$$

同理

$$\langle \mathbf{x}' | L_x | \alpha \rangle = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (25)$$

$$\langle \mathbf{x}' | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (26)$$

由此可导出

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (27)$$

在(11)和(13)左侧乘 $\langle \mathbf{x}' |$ 得

$$-\left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \langle \theta', \phi' | l, m \rangle = l(l+1) \langle \theta', \phi' | l, m \rangle \quad (28)$$

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \theta', \phi' | l, m \rangle = m \langle \theta', \phi' | l, m \rangle \quad (29)$$

由数理方程的内容，这个方程的解正是球谐函数

$$\langle \theta', \phi' | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi) \quad (30)$$

3 中心势场，氢原子

我们可以直截了当地证明

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \quad (31)$$

从而可得

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = r^2 \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle + \hbar^2 \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + 2r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right) \quad (32)$$

即动能

$$\left\langle \mathbf{x}' \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right| \alpha \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + \frac{1}{2mr^2} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle \quad (33)$$

中心力场的势 $V(r)$ 是球对称的，系统的 Hamilton 量为

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \quad (34)$$

由(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

$$H |E, l, m\rangle = E |E, l, m\rangle \quad (35)$$

$$\mathbf{L}^2 |E, l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |E, l, m\rangle \quad (36)$$

$$L_z |E, l, m\rangle = m\hbar |E, l, m\rangle \quad (37)$$

左乘 $\langle \mathbf{x}' |$ ，并由(32)可得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] \langle \mathbf{x}' | E, l, m \rangle = E \langle \mathbf{x}' | E, l, m \rangle \quad (38)$$

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

$$\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = \sqrt{\left(\frac{2}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (39)$$

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

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} \quad (40)$$

4 自旋角动量

4.1 自旋

Stern-Gerlach 实验的大致过程如(1)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。

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

$$S_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \quad (41)$$



图 1: Stern-Gerlach 实验

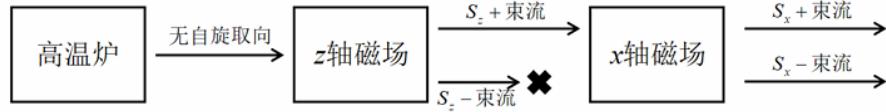


图 2: 序列 Stern-Gerlach 实验

且

$$S_z = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \quad (42)$$

如图(2), 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.

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

$$|\langle S_x; +|+\rangle| = |\langle S_x; -|-\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (43)$$

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

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm e^{i\delta_1} |-\rangle) \quad (44)$$

其中 δ_1 是相因子. 同理会有

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm e^{i\delta_2} |-\rangle) \quad (45)$$

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

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle) \quad (46)$$

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm i|-\rangle) \quad (47)$$

从而

$$S_x = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \quad (48)$$

$$S_y = \frac{i\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|) \quad (49)$$

容易验证

$$[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar S_k \quad (50)$$

此外, 很容易发现 $[S^2, S_i] = 0$, 因为

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \quad (51)$$

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 $|\alpha\rangle_R = \exp\left(\frac{-i\phi S_z}{\hbar}\right) |\alpha\rangle$. 现在对 x 方向自旋进行一个测量, 期望值

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

即转动对系统 x 方向上自旋期望值的影响为

$$\langle S_x \rangle \rightarrow \langle S_x \rangle \cos \phi - \langle S_y \rangle \sin \phi \quad (52)$$

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

$$\langle S_y \rangle \rightarrow \langle S_y \rangle \cos \phi + \langle S_x \rangle \sin \phi \quad (53)$$

$$\langle S_z \rangle \rightarrow \langle S_z \rangle \quad (54)$$

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

$$\exp\left(-\frac{i\phi S_z}{\hbar}\right) |\alpha\rangle = e^{-\frac{i\phi}{2}} |+\rangle \langle +|\alpha\rangle + e^{\frac{i\phi}{2}} |-\rangle \langle -|\alpha\rangle \quad (55)$$

4.3 Pauli 形式

对自旋 1/2 系统可引入 Pauli 形式

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+ \quad (56)$$

$$|-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_- \quad (57)$$

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

$$|\alpha\rangle = |+\rangle \langle +|\alpha\rangle + |-\rangle \langle -|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix} \equiv \chi \quad (58)$$

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

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (59)$$

其中

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (60)$$

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

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \quad (61)$$

设绕 \mathbf{n} 将系统转动 ϕ , 则有限转动算符可以表示为

$$\mathcal{D}_{\mathbf{n}}(\phi) = e^{-i\phi\sigma \cdot \mathbf{n}} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} - in_z \sin \frac{\phi}{2} & (-in_x - n_y) \sin \frac{\phi}{2} \\ (-in_x + n_y) \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} + in_z \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \quad (62)$$

5 角动量的叠加

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

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \equiv \mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{J}_2 \quad (63)$$

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

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_{1k} \quad (64)$$

$$[J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_{2k} \quad (65)$$

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

$$[J_{1i}, J_{2j}] = 0 \quad (66)$$

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.

5.2 CG 系数

考虑两组基底之间的变换关系.

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2|j_1, j_2; j, m\rangle \quad (67)$$

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, $\langle j_1, j_2; m_1, m_2| (J_z - J_{1z} - J_{2z}) |j_1, j_2; j, m\rangle = (m - m_1 - m_2)\langle j_1, j_2; m_1, m_2|j_1, j_2; j, m\rangle = 0$, 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

$$D = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (68)$$

与耦合表象维数

$$D = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} 2j + 1 = j_{\max}^2 - j_{\min}^2 + 2j_{\max} + 1 \quad (69)$$

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

我们要求 CG 系数都是实数, 故

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle = \langle j_1, j_2; j, m | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \quad (70)$$

实的么正矩阵都是正交矩阵, 故 CG 系数要满足正交归一关系, 即

$$\sum_j \sum_m \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j_1, j_2; j, m \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (71)$$

或

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j', m' \rangle = \delta_{j, j'} \delta_{m, m'} \quad (72)$$

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

$$J_{\pm} |j_1, j_2; j, m \rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle \quad (73)$$

由(16)可得

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j_1, j_2; j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sum_{m_1} \sum_{m_2} \left[\sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} |j_1, j_2; m_1 \pm 1, m_2 \rangle \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} |j_1, j_2; m_1 \pm 1, m_2 \rangle \right] \\ & \quad \times \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle \end{aligned} \quad (74)$$

左乘 $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 |$ 即可得到

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle j_1, j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle \\ & \quad + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1, j_2; j, m \rangle \end{aligned} \quad (75)$$

CG 系数的非零条件此时变为

$$m_1 + m_2 = m \pm 1 \quad (76)$$

6 张量算符

6.1 矢量算符

矢量算符的分量 V_i 在转动后的期望值

$$\langle \alpha | \mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) | \alpha \rangle = \sum_j R_{ij} \langle \alpha | V_j | \alpha \rangle \quad (77)$$

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

$$\mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) = \sum_j R_{ij} V_j \quad (78)$$

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

$$[V_i, V_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} V_k \quad (79)$$

6.2 Descartes 张量和不可约球张量

推广(79)可得 Descartes 张量的分量在转动下的变换

$$\mathcal{D}^\dagger(R)T_{ij}\mathcal{D}(R) = \sum_{i',j'} R_{ii'}R_{jj'}T_{i'j'} \quad (80)$$

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

$$Y_m^l(\mathbf{n}') = \sum_{m'} Y_{m'}^l(\mathbf{n}) \mathcal{D}_{m',m}^{(l)}(R^{-1}) \quad (81)$$

故转动下球谐函数的变换法则为

$$\mathcal{D}^\dagger(R)Y_m^l\mathcal{D}(R) = \sum_{m'} Y_{m'}^l \mathcal{D}_{m',m}^{(l)*}(R) \quad (82)$$

$T_q^{(k)} = Y_{l=k}^{m=q}$ 在转动下的变换法则为

$$\mathcal{D}^\dagger(R)T_q^{(k)}\mathcal{D}(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q,q'}^{(k)*} T_{q'}^{(k)} \quad (83)$$

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

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)} \quad (84)$$

$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)} \quad (85)$$

6.3 张量积

我们按

$$T_q^{(k)} = \sum_{q_1} \sum_{q_2} \langle k_1, k_2; q_1, q_2 | k_1, k_2; k, q \rangle X_{q_1}^{(k_1)} Z_{q_2}^{(k_2)} \quad (86)$$

定义两个张量的积. 还需要证明在转动下, $T_q^{(k)}$ 的变换和(83)一致, 从略.

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

$$\langle \alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle = 0 \text{ unless } m' = q + m \quad (87)$$

证明很简单, 由(84)可知 $\langle \alpha'; j', m' | ([J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)}) | \alpha; j, m \rangle = [(m' - m)\hbar - \hbar q] \langle \alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle = 0$, 故 $\langle \alpha'; j', m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle = 0$ 除非 $m' = q + m$.

下面我们来看量子力学中重要的 Wigner-Eckart 定理

$$\langle \alpha'; j' m' | T_q^{(k)} | \alpha; j, m \rangle = \frac{\langle \alpha'; j' || T^{(k)} || \alpha; j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \langle j, k; m, q | j, k; j' m' \rangle \quad (88)$$

其中双竖线表示矩阵元完全不依赖于 m, m' 和 q .