**0.基本函数**

[V,D]=Eig(A)

求矩阵A的本征矢和本征值.

D是含有本征值的对角矩阵, D(ii)按照本征值从大到小的顺序排列.

V的第i列是本征值D(i,i)对应的本征矢(已经归一化)

A\*V就相当于把V的每一列乘以对应的本征值, 即

A\*V=V\*D

V'AV=V'VA=D. 所以V可以把A对角化为D. (D for Diagonal).

该函数由Matlab自带函数eig改编而来, 因为eig得出的D(i,i)是从小到排序, 不符合量子力学的常规.

**1.单个角动量**

Lx=QMLx(l)

Ly=QMLy(l)

Lz=QMLz(l)

以所有的|l,m>为基底(m从大到小排列), 以h1(约化普朗克常量)为单位

求出角动量x,y,z分量的厄米矩阵Lx,Ly,Lz.

特殊地, 当l=1/2时, 三个矩阵为泡利矩阵的除以二(因为泡力矩阵乘以1/2才是角动量分量矩阵(以h1为单位)).

Lplus=QMLplus(l)

Lminus=QMLminus(l)

求出升降算符, 类比Lx,Ly,Lz

**2.合成角动量**

[CGMatrix, S2]=QMCG(l1,l2,M)

求出CG系数矩阵CGMatrix和对应的合成角动量模长方本征值S2(以对角矩阵的形式给出)

输入列矢量的基底按照顺序是|S2\_1,M>,|S2\_2,M>... (S1,S2...从大到小排列)

输出列矢量的基底按照顺序是|l1,m1\_1>|l2,m2\_1>, |l1,m1\_2>|l2,m2\_2> (m1+m2=m, m1从大到小排列)

由于本征值没有简并, CG矩阵是一个幺正矩阵(已经进行了归一化). 所以其逆矩阵就是其厄米共轭就好啦.

(物理索引里面应该给幺正矩阵加入这条性质, 就是厄米共轭等于逆矩阵).

算法:

这里用的是简并情况下的算符对易有共同本征值理论(见物理索引).

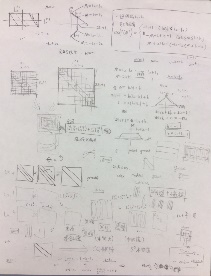
合成的Sz是一个简并量, 每个量子数M=m1+m2代表一个N维子空间, 由于Sz和S2对易, S2在每个子空间中都闭合, 都可以表示成N阶方阵(拜托不要再说N维方阵了), 这就是W矩阵. 求出W矩阵的本征矢和本征值, 就是S2的本征矢和本征值了(amazing).

具体算法中, 先把S2展开成L1^2+L2^2+2L1xL2x+2L1yL2y+2L1zL2z, 前两项直接是子空间基底的本征算符, 所以是对角矩阵. 后三项都不是本征算符, 就变得比较恶心了. 结果发现, L1xL2x|1>|2>算符等于L1x|1>乘以L2x|2> (并失), 但是乘了以后只有满足m1+m2=M的|1>|2>并失我们才用得上(而且也只有这些并失, 即子空间基底, 前面的系数为零, 因为S2是封闭算符).

算法中一个最重要的trick就是发现了, L1xL2x算符在子空间基底展开的矩阵其实就是L1x矩阵截取一个N阶方阵, 与L2x矩阵截取的一个N阶方阵旋转180°, 的逐个元素相乘. 不过麻烦的地方是要知道在两个矩阵的什么位置截取.

这个算法不足的地方就是, Lx,Ly,Lz其实都只有两条副对角线上面的矩阵元为非零(系数矩阵), W矩阵也是如此, 所以在计算W矩阵的过程中白白计算了很多0\*0... 感觉有点不爽.

草稿纸如下



(这个程序可能花了我5个小时, 但是感觉能验证一下物理索引中的理论还是挺不错的).