

# 高等量子力学作业

Clark

1. (a) Euler 旋转是空间中三维旋转  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = Q\mathbf{r}$  的经典参数化方法。给定 Euler 角  $\alpha, \beta, \gamma$ , 三维笛卡尔坐标的变换为

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{O_{12}(\gamma)} \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix}}_{O_{31}(\beta)} \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{O_{12}(\alpha)} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (1)$$

在这个空间变换的影响下, 一个二维旋量  $\mathbf{v} = (\xi, \eta)^T$  变换为  $\mathbf{v} \rightarrow u(Q)\mathbf{v}$ , 其中  $u(Q)$  是一个  $2 \times 2$  的幺正矩阵, 它用 Euler 角表示。证明  $u(Q)$  由下式给出:

$$u(Q) = \begin{pmatrix} a & -b \\ b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中  $a = \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}$  且  $b = \sin \frac{\beta}{2} e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}$ 。

- (b)  $2j$  个旋量  $\mathbf{v}$  的直积 (等价于  $\mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{v}_{2j}$  且  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2 = \cdots = \mathbf{v}_{2j} = \mathbf{v}$ ) 可以在  $(2j+1)$ -维不可约空间中生成一个向量  $\mathbf{f}^j(\mathbf{v}) = (f_j^j(\mathbf{v}), f_{j-1}^j(\mathbf{v}), \dots, f_{-j}^j(\mathbf{v}))^T$ , 其中  $2j$  是整数, 且每个分量  $f_m^j(\mathbf{v})$  (对于  $m = j, j-1, \dots, -j$ ) 由下式给出:

$$f_m^j(\mathbf{v}) = -\frac{\xi^{j-m}\eta^{j+m}}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!}}. \quad (3)$$

在上述 Euler 旋转的作用下,  $\mathbf{f}^j$  变换为  $\mathbf{f}'^j(\mathbf{v}) \rightarrow \mathbf{f}^j(\mathbf{v}) = \mathbf{f}^j(u^{-1}(Q)\mathbf{v})$ 。 $\mathbf{f}'^j$  的每个分量可以写为:

$$f'_m^j(\mathbf{v}) = f_m^j(u^{-1}\mathbf{v}) = \sum_{m'} D_{m'm}^j(Q) f_m^j(\mathbf{v}), \quad (4)$$

其中  $D_{m'm}^j(Q)$  是上述 Euler 旋转在  $(2j+1)$ -维空间中的  $(2j+1) \times (2j+1)$  表示矩阵。证明

$$D_{m'm}^j(Q) = \sum_n (-1)^n \frac{\sqrt{(j-m)!(j+m)!(j-m')!(j+m')!}}{(j+m-n)!(j-m-n)!n!(n+m-m')!} a^{j+m'-n} (a^*)^{j-m-n} b^n (b^*)^{n+m-m'}. \quad (5)$$

- (c) 写出  $D_{m'm}^1(Q)$  的  $3 \times 3$  的具体矩阵表达式, 证明它与  $Q$  是相似的。也就是说, 它们通过一个相似变换相互关联:

$$D^1(Q) = UQU^{-1}, \quad (6)$$

其中  $U$  是一个幺正矩阵。

解:

(a) Euler 旋转由三个连续旋转组成:

- 绕原  $z$  轴旋转角  $\alpha$ :  $O_{12}(\alpha)$ ;
- 绕新  $y$  轴旋转角  $\beta$ :  $O_{31}(\beta)$ ;
- 绕新  $z$  轴旋转角  $\gamma$ :  $O_{12}(\gamma)$ 。

对于二维旋量  $\mathbf{v} = (\xi, \eta)^T$ , 变换由  $SU(2)$  矩阵表示。每个旋转对应的  $SU(2)$  矩阵为:

- 绕  $z$  轴旋转角  $\phi$ :  $R_z(\phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi/2} \end{pmatrix}$ ;
- 绕  $y$  轴旋转角  $\theta$ :  $R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$ 。

总变换矩阵为:

$$u(Q) = R_z(\gamma)R_y(\beta)R_z(\alpha). \quad (7)$$

计算乘积:

$$\begin{aligned} R_y(\beta)R_z(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} & \cos \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8)$$

然后计算:

$$\begin{aligned} u(Q) &= R_z(\gamma)(R_y(\beta)R_z(\alpha)) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} & \cos \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} & -e^{-i\gamma/2} \sin \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \\ e^{i\gamma/2} \sin \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} & e^{i\gamma/2} \cos \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \\ &\equiv \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9)$$

令

$$a = \cos \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}, \quad b = \sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2}, \quad (10)$$

则

$$a^* = \cos \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)/2}, \quad b^* = \sin \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha-\gamma)/2}. \quad (11)$$

因此,

$$u(Q) = \begin{pmatrix} a & -b \\ b^* & a^* \end{pmatrix}. \quad (12)$$

(b) 考虑  $2j$  个旋量的直积  $\mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{v}_{2j}$ , 其中所有  $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}$ , 生成  $(2j+1)$ -维不可约表示中的向量  $\mathbf{f}^j(\mathbf{v}) = (f_j^j(\mathbf{v}), f_{j-1}^j(\mathbf{v}), \dots, f_{-j}^j(\mathbf{v}))^T$ , 其中:

$$f_m^j(\mathbf{v}) = \frac{\xi^{j-m} \eta^{j+m}}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!}}. \quad (13)$$

在 Euler 旋转下,  $\mathbf{v} \rightarrow u(Q)\mathbf{v}$ , 但  $\mathbf{f}^j$  变换为  $\mathbf{f}^j(u^{-1}(Q)\mathbf{v})$ , 即:

$$f_m^{j'}(\mathbf{v}) = f_m^j(u^{-1}\mathbf{v}) = \sum_{m'} D_{m'm}^j(Q) f_{m'}^j(\mathbf{v}), \quad (14)$$

其中  $D_{m'm}^j(Q)$  是旋转在  $(2j+1)$ -维空间中的表示矩阵。通过计算  $f_m^j(u^{-1}\mathbf{v})$  的展开, 可得:

$$f_m^j(u^{-1}\mathbf{v}) = \frac{(a^*\xi + b\eta)^{j-m}(-b^*\xi + a\eta)^{j+m}}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!}}. \quad (15)$$

将  $(a^*\xi + b\eta)^{j-m}$  和  $(-b^*\xi + a\eta)^{j+m}$  展开为  $\xi$  和  $\eta$  的幂级数:

$$\begin{aligned} (a^*\xi + b\eta)^{j-m} &= \sum_{p=0}^{j-m} \binom{j-m}{p} (a^*\xi)^p (b\eta)^{j-m-p} \\ &= \sum_{p=0}^{j-m} \binom{j-m}{p} (a^*)^p b^{j-m-p} \xi^p \eta^{j-m-p}, \end{aligned} \quad (16)$$

和

$$\begin{aligned} (-b^*\xi + a\eta)^{j+m} &= \sum_{q=0}^{j+m} \binom{j+m}{q} (-b^*\xi)^q (a\eta)^{j+m-q} \\ &= \sum_{q=0}^{j+m} \binom{j+m}{q} (-1)^q (b^*)^q a^{j+m-q} \xi^q \eta^{j+m-q}. \end{aligned} \quad (17)$$

因此,

$$\begin{aligned} &(a^*\xi + b\eta)^{j-m} (-b^*\xi + a\eta)^{j+m} \\ &= \sum_{p=0}^{j-m} \sum_{q=0}^{j+m} \binom{j-m}{p} \binom{j+m}{q} (-1)^q (a^*)^p b^{j-m-p} (b^*)^q a^{j+m-q} \xi^{p+q} \eta^{2j-(p+q)}. \end{aligned} \quad (18)$$

令  $k = p + q$ , 则  $\xi$  的指数为  $k$ ,  $\eta$  的指数为  $2j - k$ 。但  $f_{m'}^j(\mathbf{v})$  中  $\xi$  的指数为  $j - m'$ ,  $\eta$  的指数为  $j + m'$ , 所以有:

$$j - m' = k, \quad j + m' = 2j - k \quad \Rightarrow \quad m' = j - k, \quad (19)$$

即  $k = j - m'$ 。令  $p = n$ , 则  $q = j - m' - n$ 。代入得:

$$\begin{aligned} &(a^*\xi + b\eta)^{j-m} (-b^*\xi + a\eta)^{j+m} \\ &= \sum_n \binom{j-m}{n} \binom{j+m}{j-m'-n} (-1)^{j-m'-n} (a^*)^n b^{j-m-n} (b^*)^{j-m'-n} a^{j+m-(j-m'-n)} \xi^{j-m'} \eta^{j+m'} \\ &= \sum_n \binom{j-m}{n} \binom{j+m}{j-m'-n} (-1)^{j-m'-n} a^{m+m'+n} (a^*)^n b^{j-m-n} (b^*)^{j-m'-n} \xi^{j-m'} \eta^{j+m'}. \end{aligned} \quad (20)$$

因此,

$$\begin{aligned} f_m^j(u^{-1}\mathbf{v}) &= \frac{1}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!}} \\ &\times \sum_n \binom{j-m}{n} \binom{j+m}{j-m'-n} (-1)^{j-m'-n} a^{m+m'+n} (a^*)^n b^{j-m-n} (b^*)^{j-m'-n} \xi^{j-m'} \eta^{j+m'}, \end{aligned} \quad (21)$$

与  $f_{m'}^j(\mathbf{v}) = \frac{\xi^{j-m'} \eta^{j+m'}}{\sqrt{(j-m')!(j+m')!}}$  比较系数, 得:

$$\begin{aligned} D_{m'm}^j(Q) &= \frac{1}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!(j-m')!(j+m')!}} \\ &\times \sum_n \binom{j-m}{n} \binom{j+m}{j-m'-n} (-1)^{j-m'-n} a^{m+m'+n} (a^*)^n b^{j-m-n} (b^*)^{j-m'-n}. \end{aligned} \quad (22)$$

令  $n' = j - m - n$ , 则  $n = j - m - n'$ 。代入并化简, 再将  $n'$  替换为  $n$ , 可得:

$$D_{m'm}^j(Q) = \sum_n (-1)^n \frac{\sqrt{(j-m)!(j+m)!(j-m')!(j+m')!}}{(j+m'-n)!(j-m-n)!n!(n+m-m')!} a^{j+m'-n} (a^*)^{j-m-n} b^n (b^*)^{n+m-m'}, \quad (23)$$

其中求和指标  $n$  取所有使分母阶乘非负整数的值。

- (c) 对于  $j = 1$ ,  $m, m' = 1, 0, -1$ 。使用 (b) 中的公式计算  $D_{m'm}^1(Q)$ 。注意  $a = \cos \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}$ ,  $b = \sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2}$ 。计算每个矩阵元:

- $D_{1,1}^1(Q)$ : 只有  $n = 0$  有贡献,

$$D_{1,1}^1(Q) = a^2 = \cos^2 \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)}. \quad (24)$$

- $D_{1,0}^1(Q)$ : 只有  $n = 0$  有贡献,

$$D_{1,0}^1(Q) = \sqrt{2}ab^* = \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \beta e^{-i\alpha}. \quad (25)$$

- $D_{1,-1}^1(Q)$ : 只有  $n = 0$  有贡献,

$$D_{1,-1}^1(Q) = (b^*)^2 = \sin^2 \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha-\gamma)}. \quad (26)$$

- $D_{0,1}^1(Q)$ : 只有  $n = 1$  有贡献,

$$D_{0,1}^1(Q) = -\sqrt{2}ab = -\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \beta e^{-i\gamma}. \quad (27)$$

- $D_{0,0}^1(Q)$ :  $n = 0$  和  $n = 1$  有贡献,

$$D_{0,0}^1(Q) = aa^* - bb^* = \cos^2 \frac{\beta}{2} - \sin^2 \frac{\beta}{2} = \cos \beta. \quad (28)$$

- $D_{0,-1}^1(Q)$ : 只有  $n = 0$  有贡献,

$$D_{0,-1}^1(Q) = \sqrt{2}a^*b^* = \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \beta e^{i\gamma}. \quad (29)$$

- $D_{-1,1}^1(Q)$ : 只有  $n = 2$  有贡献,

$$D_{-1,1}^1(Q) = b^2 = \sin^2 \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)}. \quad (30)$$

- $D_{-1,0}^1(Q)$ : 只有  $n = 1$  有贡献,

$$D_{-1,0}^1(Q) = -\sqrt{2}a^*b = -\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \beta e^{i\alpha}. \quad (31)$$

- $D_{-1,-1}^1(Q)$ : 只有  $n = 0$  有贡献,

$$D_{-1,-1}^1(Q) = (a^*)^2 = \cos^2 \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)}. \quad (32)$$

因此,  $D^1(Q)$  矩阵为:

$$D^1(Q) = \begin{pmatrix} a^2 & \sqrt{2}ab^* & (b^*)^2 \\ -\sqrt{2}ab & \cos \beta & \sqrt{2}a^*b^* \\ b^2 & -\sqrt{2}a^*b & (a^*)^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)} & \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \beta e^{-i\alpha} & \sin^2 \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha-\gamma)} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \beta e^{-i\gamma} & \cos \beta & \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \beta e^{i\gamma} \\ \sin^2 \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \beta e^{i\alpha} & \cos^2 \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)} \end{pmatrix}. \quad (33)$$

现在证明  $D^1(Q) = UQU^{-1}$ , 其中  $U$  是么正矩阵。球基与笛卡尔基之间的变换矩阵为:

$$U = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (34)$$

容易验证  $U$  是么正矩阵, 即  $U^{-1} = U^\dagger$ 。由于  $D^1(Q)$  和  $Q$  都是  $SO(3)$  的表示, 且是同构的, 它们通过相似变换关联:

$$D^1(Q) = UQU^{-1}. \quad (35)$$

**补充** Condon-Shortley 相位约定下,  $D_{m'm}^j(Q)$  写为

$$D^1(\alpha, \beta, \gamma)_{\text{CS}} = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)} \cos^2 \frac{\beta}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} e^{-i\alpha} \sin \beta & e^{-i(\alpha-\gamma)} \sin^2 \frac{\beta}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} e^{-i\gamma} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{\sqrt{2}}{2} e^{i\gamma} \sin \beta \\ e^{i(\alpha-\gamma)} \sin^2 \frac{\beta}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} e^{i\alpha} \sin \beta & e^{i(\alpha+\gamma)} \cos^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (36)$$

二者可以通过以下对角矩阵相似变换关联:

$$S = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

有  $D_{m'm}^j(Q)_{\text{CS}} = SD_{m'm}^j(Q)S^{-1}$ 。或者取如下变换矩阵:

$$U_{\text{CS}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (38)$$

则  $D_{m'm}^j(Q)_{\text{CS}} = U_{\text{CS}} D_{m'm}^j(Q) U_{\text{CS}}^{-1}$ 。

2. 喀兴林教材中的问题 22.9。绕着  $x$ ,  $y$  和  $z$  轴方向的转动  $\varphi$  角度可以通过 Euler 角的方式来实现

- 绕  $x$  轴转动  $\varphi$  角 (记为  $\varphi\mathbf{i}$ ):  $\alpha = -\pi/2$ ,  $\beta = \varphi$ ,  $\gamma = \pi/2$ ,
- 绕  $y$  转动  $\varphi$  角 (记为  $\varphi\mathbf{j}$ ):  $\alpha = \gamma = 0$ ,  $\beta = \varphi$ ,
- 绕  $z$  轴转动  $\varphi$  角 (记为  $\varphi\mathbf{k}$ ):  $\alpha = \varphi$ ,  $\gamma = \beta = 0$ 。

(a) 拿出你的右手, 把手掌摊平, 四指的方向为  $x$  轴, 掌心对着的方向为  $y$  轴, 拇指的方向为  $z$  轴, 用手掌检验一下上面三个转动用 Euler 角表示得是否合理。

(b) 给出  $D_{m'm}^j(\varphi\mathbf{i})$ ,  $D_{m'm}^j(\varphi\mathbf{j})$  和  $D_{m'm}^j(\varphi\mathbf{k})$  的一般表达式。

(c) 根据  $D(\varphi\mathbf{i}) = e^{-i\varphi J_x}$ ,  $D(\varphi\mathbf{j}) = e^{-i\varphi J_y}$  和  $D(\varphi\mathbf{k}) = e^{-i\varphi J_z}$

$$\begin{aligned} J_x |m\rangle^j &= \frac{-i}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{i}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j, \\ J_y |m\rangle^j &= \frac{1}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{1}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j, \\ J_z |m\rangle^j &= m |m\rangle^j, \end{aligned} \quad (39)$$

其中,  $a_{m\pm} = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}$ 。进一步地, 定义  $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ , 可以得到  $J_\pm |m\rangle^j = a_{m\pm} |m\pm\rangle^j$ , 也就是说  $J_\pm$  是角动量第三分量的升降算符。

解：

(a) 按照右手坐标系定义：四指方向为  $x$  轴，掌心方向为  $y$  轴，拇指方向为  $z$  轴。

- 绕  $x$  轴转动  $\varphi$ :  $\alpha = -\frac{\pi}{2}, \beta = \varphi, \gamma = \frac{\pi}{2}$ :
  - 先绕  $z$  轴转  $-\frac{\pi}{2}$ :  $x$  轴转到原来  $y$  轴负方向;
  - 再绕新  $y$  轴转  $\varphi$ : 相当于绕原  $x$  轴转  $\varphi$ ;
  - 最后绕新  $z$  轴转  $\frac{\pi}{2}$ : 恢复坐标系方向。

检验合理。

- 绕  $y$  轴转动  $\varphi$ :  $\alpha = \gamma = 0, \beta = \varphi$ :
  - 直接绕  $y$  轴转  $\varphi$ 。

检验合理。

- 绕  $z$  轴转动  $\varphi$ :  $\alpha = \varphi, \gamma = \beta = 0$ :
  - 直接绕  $z$  轴转  $\varphi$ 。

检验合理。

(b) 一般旋转矩阵元为：

$$D_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i(m'\alpha + m\gamma)} d_{m'm}^j(\beta), \quad (40)$$

其中  $d_{m'm}^j(\beta)$  是 Wigner  $d$ -函数。

- 绕  $x$  轴转动  $\varphi$ :  $\alpha = -\frac{\pi}{2}, \beta = \varphi, \gamma = \frac{\pi}{2}$ :

$$D_{m'm}^j(\varphi \mathbf{i}) = e^{-i(m'(-\frac{\pi}{2}) + m\frac{\pi}{2})} d_{m'm}^j(\varphi) = e^{i\frac{\pi}{2}(m' - m)} d_{m'm}^j(\varphi). \quad (41)$$

- 绕  $y$  轴转动  $\varphi$ :  $\alpha = \gamma = 0, \beta = \varphi$ :

$$D_{m'm}^j(\varphi \mathbf{j}) = d_{m'm}^j(\varphi). \quad (42)$$

- 绕  $z$  轴转动  $\varphi$ :  $\alpha = \varphi, \gamma = \beta = 0$ :

$$D_{m'm}^j(\varphi \mathbf{k}) = e^{-im'\varphi} \delta_{m'm}. \quad (43)$$

(c) 角动量算符在  $|m\rangle^j$  基下的矩阵元为：

$$\begin{aligned} J_x |m\rangle^j &= -\frac{i}{2}a_{m+}|m+1\rangle^j + \frac{i}{2}a_{m-}|m-1\rangle^j, \\ J_y |m\rangle^j &= \frac{1}{2}a_{m+}|m+1\rangle^j + \frac{1}{2}a_{m-}|m-1\rangle^j, \\ J_z |m\rangle^j &= m|m\rangle^j, \end{aligned} \quad (44)$$

其中  $a_{m\pm} = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}$ 。定义升降算符  $J_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x \pm iJ_y)$

(于是可以反解出  $J_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(J_+ + J_-)$  和  $J_y = \frac{1}{i\sqrt{2}}(J_+ - J_-)$ )，则：

$$J_{\pm} |m\rangle^j = a_{m\pm} |m \pm 1\rangle^j. \quad (45)$$

旋转算符的指数形式为：

$$\begin{aligned} D(\varphi \mathbf{i}) &= e^{-i\varphi J_x}, \\ D(\varphi \mathbf{j}) &= e^{-i\varphi J_y}, \\ D(\varphi \mathbf{k}) &= e^{-i\varphi J_z}. \end{aligned} \quad (46)$$

- 绕  $z$  轴旋转  $\varphi \mathbf{k}$ :

– 由于  $J_z$  是对角矩阵,  $J_z |m\rangle^j = m |m\rangle^j$ , 直接可得:

$$D(\varphi \mathbf{k}) = e^{-i\varphi J_z} = \sum_m e^{-i\varphi m} |m\rangle^j \langle m|^j. \quad (47)$$

因此矩阵元为:

$$D_{m'm}^j(\varphi \mathbf{k}) = \langle m' |^j e^{-i\varphi J_z} |m\rangle^j = e^{-i\varphi m} \delta_{m'm}. \quad (48)$$

- 绕  $y$  轴旋转  $\varphi \mathbf{j}$ :

– 由 Euler 角表示  $\alpha = \gamma = 0, \beta = \varphi$ , 可得:

$$D_{m'm}^j(\varphi \mathbf{j}) = d_{m'm}^j(\varphi), \quad (49)$$

其中  $d_{m'm}^j(\varphi)$  是 Wigner  $d$ -函数。

- 绕  $x$  轴旋转  $\varphi \mathbf{i}$ :

– 由 Euler 角表示  $\alpha = -\frac{\pi}{2}, \beta = \varphi, \gamma = \frac{\pi}{2}$ , 可得:

$$D(\varphi \mathbf{i}) = D\left(-\frac{\pi}{2}, \varphi, \frac{\pi}{2}\right) = e^{-i(-\frac{\pi}{2})J_z} e^{-i\varphi J_y} e^{+i\frac{\pi}{2}J_z} = e^{i\frac{\pi}{2}J_z} e^{-i\varphi J_y} e^{-i\frac{\pi}{2}J_z}, \quad (50)$$

因此矩阵元为:

$$\begin{aligned} \langle m' | D(\varphi \mathbf{i}) | m \rangle &= \langle m' | e^{i\frac{\pi}{2}J_z} e^{-i\varphi J_y} e^{-i\frac{\pi}{2}J_z} | m \rangle \\ &= e^{i\frac{\pi}{2}m'} \langle m' | e^{-i\varphi J_y} | m \rangle e^{-i\frac{\pi}{2}m} \\ &= e^{i\frac{\pi}{2}(m'-m)} d_{m'm}^j(\varphi). \end{aligned} \quad (51)$$

结合上述定义, 可以看到  $J_x$  和  $J_y$  可以通过  $J_+$  和  $J_-$  改写, 即

$$\begin{aligned} J_x |m\rangle^j &= \frac{1}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{1}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j, \\ J_y |m\rangle^j &= -\frac{i}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{i}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j. \end{aligned} \quad (52)$$

计算升降算符的作用:

$$\begin{aligned} J_+ |m\rangle^j &= (J_x + iJ_y) |m\rangle^j \\ &= \left( \frac{1}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{1}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j \right) + i \left( -\frac{i}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{i}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j \right) \\ &= \frac{1}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{1}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j + \frac{1}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j - \frac{1}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j \\ &= a_{m+} |m+1\rangle^j, \end{aligned} \quad (53)$$

以及

$$\begin{aligned} J_- |m\rangle^j &= (J_x - iJ_y) |m\rangle^j \\ &= \left( \frac{1}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{1}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j \right) - i \left( -\frac{i}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{i}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j \right) \\ &= \frac{1}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{1}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j - \frac{1}{2} a_{m+} |m+1\rangle^j + \frac{1}{2} a_{m-} |m-1\rangle^j \\ &= a_{m-} |m-1\rangle^j. \end{aligned} \quad (54)$$

因此:

$$J_{\pm} |m\rangle^j = a_{m\pm} |m\pm 1\rangle^j. \quad (55)$$

这表明  $J_{\pm}$  确实是角动量第三分量的升降算符。

3. 喀兴林教材中的问题 23.7。设定  $j_1 = j_2 = 1$ , 并将 Euler 旋转的三个角固定为  $\beta = \pi$  和  $\alpha = \gamma = 0$ 。

- (a) 列出直积  $D^1 \otimes D^1$  的不可约表示。
- (b) 计算 CG 系数矩阵  $S$  及其逆矩阵。

解:

- (a) 两个角动量  $j_1 = 1$  和  $j_2 = 1$  的直积表示可以分解为不可约表示的直和:

$$D^1 \otimes D^1 = D^2 \oplus D^1 \oplus D^0, \quad (56)$$

即总角动量  $j$  可以取 2, 1, 0, 对应的维数分别为 5, 3, 1。具体写为

$$D^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D^0 = \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}. \quad (57)$$

- (b) CG 系数矩阵  $S$  是将直积基  $|1, m_1; 1, m_2\rangle$  变换到总角动量基  $|jm\rangle$  的幺正矩阵。直积基按  $m_1, m_2$  顺序排列为:

$$\begin{aligned} & |1, 1; 1, 1\rangle, |1, 1; 1, 0\rangle, |1, 1; 1, -1\rangle, \\ & |1, 0; 1, 1\rangle, |1, 0; 1, 0\rangle, |1, 0; 1, -1\rangle, \\ & |1, -1; 1, 1\rangle, |1, -1; 1, 0\rangle, |1, -1; 1, -1\rangle. \end{aligned} \quad (58)$$

总角动量基按  $j$  从大到小、 $m$  从大到小排列为:

$$\begin{aligned} & |2, 2\rangle, |2, 1\rangle, |2, 0\rangle, |2, -1\rangle, |2, -2\rangle, \\ & |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, \\ & |0, 0\rangle. \end{aligned} \quad (59)$$

CG 系数由 Condon-Shortley 相位约定给出:

- $j = 2$  表示:

$$\begin{aligned} |2, 2\rangle &= |1, 1; 1, 1\rangle, \\ |2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 1, 0\rangle + |1, 0; 1, 1\rangle), \\ |2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|1, 1; 1, -1\rangle + |1, -1; 1, 1\rangle) + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |1, 0; 1, 0\rangle, \\ |2, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0; 1, -1\rangle + |1, -1; 1, 0\rangle), \\ |2, -2\rangle &= |1, -1; 1, -1\rangle. \end{aligned} \quad (60)$$

- $j = 1$  表示:

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 1, 0\rangle - |1, 0; 1, 1\rangle), \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 1, -1\rangle - |1, -1; 1, 1\rangle), \\ |1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0; 1, -1\rangle - |1, -1; 1, 0\rangle). \end{aligned} \quad (61)$$

- $j = 0$  表示:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1, 1; 1, -1\rangle + |1, -1; 1, 1\rangle) - \frac{1}{\sqrt{3}}|1, 0; 1, 0\rangle. \quad (62)$$

由此得到 CG 系数矩阵  $S$  ( $9 \times 9$  矩阵):

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (63)$$

由于  $S$  是实正交矩阵(么正矩阵), 其逆矩阵为转置矩阵:

$$S^{-1} = S^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (64)$$

4. 编写一个计算机程序(可以使用 mathematica 或 python)来实现 Clebsch-Gordan (CG) 系数和相应的  $3j$  符号的 Edmonds 形式, 它们的定义分别由下式给出:

$$S_{m_1 m_2 j m}^{j_1 j_2} = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle, \quad (65)$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m}}{\sqrt{2j+1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle, \quad (66)$$

该代码应能够计算给定任何整数或半整数集合  $(j_1, j_2, m_1, m_2, j, m)$  的任意 CG 系数和  $3j$  符号。

(附: 推荐同学们通过小组讨论和协作的方式完成此题, 也可以借助 AI 来完成。)

解:

```

1 import math
2
3
4 def factorial(x):
5     """
6         计算阶乘函数, 可以处理整数和半整数

```

```
7     """
8     if x < 0:
9         return 0
10    # 使用Gamma函数计算阶乘, 适用于整数和半整数      return math.gamma(x + 1)
11
12
13 def is_half_integer(x):
14     """检查是否为整数或半整数"""
15     return abs(2 * x - round(2 * x)) < 1e-10
16
17
18 def triangle_inequality(j1, j2, j):
19     """检查三角不等式 |j1-j2| <= j <= j1+j2"""
20     return abs(j1 - j2) - 1e-10 <= j <= j1 + j2 + 1e-10
21
22
23 def clebsch_gordan(j1, j2, j, m1, m2, m):
24     """
25     计算Clebsch-Gordan系数 j1 j2 m1 m2|j1 j2 j m
26     """
27
28     # 检查基本选择定则
29     if not (is_half_integer(j1) and is_half_integer(j2) and is_half_integer(j) and
30             is_half_integer(m1) and is_half_integer(m2) and is_half_integer(m)):
31         return 0.0
32
33     if abs(m1 + m2 - m) > 1e-10:
34         return 0.0
35
36     if abs(m1) > j1 + 1e-10 or abs(m2) > j2 + 1e-10 or abs(m) > j + 1e-10:
37         return 0.0
38
39     if not triangle_inequality(j1, j2, j):
40         return 0.0
41
42     # 使用Racah公式计算CG系数
43     try:
44         term1 = (2 * j + 1) * factorial(j1 + j2 - j) * factorial(j1 - j2 + j) *
45                 factorial(-j1 + j2 + j)
46         term1 /= factorial(j1 + j2 + j + 1)
47         term1 = math.sqrt(term1)
48
49         term2 = factorial(j1 + m1) * factorial(j1 - m1) * factorial(j2 + m2) *
50                 factorial(j2 - m2)
51         term2 *= factorial(j + m) * factorial(j - m)
52         term2 = math.sqrt(term2)
```

```
50
51 # 求和范围          k_min = max(0.0, j2 - j - m1, j1 - j + m2)
52     k_max = min(j1 + j2 - j, j1 - m1, j2 + m2)
53
54     total = 0.0
55
56     for k in range(int(k_min), int(k_max) + 1):
57         denom = (factorial(k) * factorial(j1 + j2 - j - k) *
58                    factorial(j1 - m1 - k) * factorial(j2 + m2 - k) *
59                    factorial(j - j2 + m1 + k) * factorial(j - j1 - m2 + k))
60
61         if denom == 0:
62             continue
63
64         term = (-1.0) ** k / denom
65
66         total += term
67
68
69
70 def three_j_symbol(j1, j2, j, m1, m2, m):
71 """
72     计算 3j 符号
73 """
74
75     # 3j 符号要求 m1 + m2 + m = 0
76     if abs(m1 + m2 + m) > 1e-10:
77         return 0.0
78
79     cg = clebsch_gordan(j1, j2, j, m1, m2, -m)
80
81     if abs(cg) < 1e-10:
82         return 0.0
83
84
85
86 def run_test_cases():
87     """运行测试样例"""
88     print("Clebsch-Gordan 系数和 3j 符号计算器")
89     print("=" * 50)
90
91     # 测试样例
92     test_cases = [
93         # (j1, j2, j, m1, m2, m, 描述)
94         (1, 1, 2, 1, 1, 2, "最大投影角动量"),
```

```
95     (1, 1, 2, 1, 0, 1, "中间投影角动量"),
96 (1, 1, 0, 1, -1, 0, "角动量为0的情况"),           (0.5, 0.5, 1, 0.5, 0.5, 1, "自旋1/2系
97     统"),
98     (1, 0.5, 1.5, 1, 0.5, 1.5, "混合整数半整数"),
99     (1, 1, 1, 1, 0, 1, "不满足选择定则的例子"),
100    # 新增测试案例, 满足3j符号条件 m1+m2+m=0
101    (1, 1, 2, 1, 1, -2, "3j符号测试1"),
102    (1, 1, 1, 1, -1, 0, "3j符号测试2"),
103    (0.5, 0.5, 1, 0.5, -0.5, 0, "3j符号测试3")
104 ]
105
106 print("测试样例及结果:")
107 print("-" * 50)
108
109 for j1, j2, j, m1, m2, m, desc in test_cases:
110     cg = clebsch_gordan(j1, j2, j, m1, m2, m)
111     three_j = three_j_symbol(j1, j2, j, m1, m2, m)
112
113     print(f"案例: {desc}")
114     print(f"输入: j1={j1}, j2={j2}, j={j}, m1={m1}, m2={m2}, m={m}")
115     print(f"CG系数: {cg:.10f}")
116     print(f"3j符号: {three_j:.10f}")
117     print("-" * 40)
118
119 def interactive_input():
120     """交互式输入函数"""
121     print("\n" + "=" * 60)
122     print("现在进入交互式输入模式")
123     print("请输入量子数(可以是整数或半整数, 如 1, 0.5, 1.5 等)")
124     print("按 Ctrl+C 退出程序")
125     print("=" * 60)
126
127     while True:
128         try:
129             print("\n请输入量子数:")
130             j1 = float(input("j1 = "))
131             j2 = float(input("j2 = "))
132             j = float(input("j = "))
133             m1 = float(input("m1 = "))
134             m2 = float(input("m2 = "))
135             m = float(input("m = "))
136
137             # 计算CG系数和3j符号
138             cg = clebsch_gordan(j1, j2, j, m1, m2, m)
```

```
139         three_j = three_j_symbol(j1, j2, j, m1, m2, m)
140     print("\n计算结果：")           print(f"Clebsch-Gordan 系数: {cg:.10f}")
141     print(f"3j 符号: {three_j:.10f}")
142
143     except KeyboardInterrupt:
144         print("\n\n程序已退出。")
145         break
146
147     except ValueError:
148         print("错误：请输入有效的数字！")
149
150     except Exception as e:
151         print(f"计算错误: {e}")
152
153 def main():
154     """主函数"""
155     # 首先运行测试样例
156     run_test_cases()
157
158     # 然后进入交互式输入模式
159     interactive_input()
160
161 if __name__ == "__main__":
162     main()
```

最后我们展示使用上述代码对测试集测试的测试结果，以及用户自己的输入结果。

```
(torch_gpu) D:\学科\数学物理\研究生课\高等量子力学-李俊\作业\作业5-周也铃\AQM_code>python AQM4.py
Clebsch-Gordan系数和3j符号计算器
=====
测试样例及结果：
-----
案例：最大投影角动量
输入： j1=1, j2=1, j=2, m1=1, m2=1, m=2
CG系数： 1.0000000000
3j符号： 0.0000000000

案例：中间投影角动量
输入： j1=1, j2=1, j=2, m1=1, m2=0, m=1
CG系数： 0.7071067812
3j符号： 0.0000000000

案例：角动量为0的情况
输入： j1=1, j2=1, j=0, m1=1, m2=-1, m=0
CG系数： 0.5773502692
3j符号： 0.5773502692

案例：自旋1/2系统
输入： j1=0.5, j2=0.5, j=1, m1=0.5, m2=0.5, m=1
CG系数： 1.0000000000
3j符号： 0.0000000000

案例：混合整数半整数
输入： j1=1, j2=0.5, j=1.5, m1=1, m2=0.5, m=1.5
CG系数： 1.0000000000
3j符号： 0.0000000000

案例：不满足选择定则的例子
输入： j1=1, j2=1, j=1, m1=1, m2=0, m=1
CG系数： 0.7071067812
3j符号： 0.0000000000

案例：3j符号测试1
输入： j1=1, j2=1, j=2, m1=1, m2=1, m=-2
CG系数： 0.0000000000
3j符号： 0.4472135955

案例：3j符号测试2
输入： j1=1, j2=1, j=1, m1=1, m2=-1, m=0
CG系数： 0.7071067812
3j符号： 0.4082482905

案例：3j符号测试3
输入： j1=0.5, j2=0.5, j=1, m1=0.5, m2=-0.5, m=0
CG系数： 0.7071067812
3j符号： 0.4082482905

=====
现在进入交互式输入模式
请输入量子数（可以是整数或半整数，如 1, 0.5, 1.5 等）
按 Ctrl+C 退出程序
=====

请输入量子数：
j1 = 2
j2 = 2
j = 4
m1 = 1
m2 = 0
m = 1

计算结果：
Clebsch-Gordan系数： 0.6546536707
3j符号： 0.0000000000

请输入量子数：
j1 =
程序已退出。
(torch_gpu) D:\学科\数学物理\研究生课\高等量子力学-李俊\作业\作业5-周也铃\AQM_code>
```