

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 α, β, γ , 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 2×2 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 $\mathbf{f}^j(\mathbf{v}) = (f_j^j(\mathbf{v}), f_{j-1}^j(\mathbf{v}), \cdots, f_{-j}^j(\mathbf{v}))^T$, 其中 $2j$ 是整数, 且每个分量 $f_m^j(\mathbf{v})$ (对于 $m = j, j-1, \cdots, -j$) 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 3×3 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 α : $O_{12}(\alpha)$;
- 绕新 y 轴旋转角 β : $O_{31}(\beta)$;
- 绕新 z 轴旋转角 γ : $O_{12}(\gamma)$ 。

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

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:

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

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 ξ 和 η 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 ξ 的指数为 k , η 的指数为 $2j - k$ 。但 $f_{m'}^j(\mathbf{v})$ 中 ξ 的指数为 $j - m'$, η 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 φ 角度可以通过 Euler 角的方式来实现

- 绕 x 轴转动 φ 角（记为 $\varphi \mathbf{i}$ ）： $\alpha = -\pi/2$ ， $\beta = \varphi$ ， $\gamma = \pi/2$ ，
- 绕 y 转动 φ 角（记为 $\varphi \mathbf{j}$ ）： $\alpha = \gamma = 0$ ， $\beta = \varphi$ ，
- 绕 z 轴转动 φ 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 $J_{\pm} |m\rangle^j = a_{m\pm} |m\pm 1\rangle^j$ ，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 φ : $\alpha = -\frac{\pi}{2}, \beta = \varphi, \gamma = \frac{\pi}{2}$:
 - 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 φ : 相当于绕原 x 轴转 φ ;
 - 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 φ : $\alpha = \gamma = 0, \beta = \varphi$:
 - 直接绕 y 轴转 φ 。

检验合理。

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

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 φ : $\alpha = -\frac{\pi}{2}, \beta = \varphi, \gamma = \frac{\pi}{2}$:

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

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

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

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

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

(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:

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

- 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 $|jm\rangle$ 的么正矩阵。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 (9×9 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 (幺正矩阵), 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        # 检查基本选择定则
28        if not (is_half_integer(j1) and is_half_integer(j2) and is_half_integer(j) and
29                is_half_integer(m1) and is_half_integer(m2) and is_half_integer(m)):
30            return 0.0
31
32        if abs(m1 + m2 - m) > 1e-10:
33            return 0.0
34
35        if abs(m1) > j1 + 1e-10 or abs(m2) > j2 + 1e-10 or abs(m) > j + 1e-10:
36            return 0.0
37
38        if not triangle_inequality(j1, j2, j):
39            return 0.0
40
41        # 使用Racah公式计算CG系数
42        try:
43            term1 = (2 * j + 1) * factorial(j1 + j2 - j) * factorial(j1 - j2 + j) *
44                    factorial(-j1 + j2 + j)
45            term1 /= factorial(j1 + j2 + j + 1)
46            term1 = math.sqrt(term1)
47
48            term2 = factorial(j1 + m1) * factorial(j1 - m1) * factorial(j2 + m2) *
49                    factorial(j2 - m2)
50            term2 *= factorial(j + m) * factorial(j - m)
51            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      for k in range(int(k_min), int(k_max) + 1):
56          denom = (factorial(k) * factorial(j1 + j2 - j - k) *
57                  factorial(j1 - m1 - k) * factorial(j2 + m2 - k) *
58                  factorial(j - j2 + m1 + k) * factorial(j - j1 - m2 + k))
59          if denom == 0:
60              continue
61          term = (-1.0) ** k / denom
62          total += term
63
64      result = term1 * term2 * total
65      return result
66 except:
67     return 0.0
68
69
70 def three_j_symbol(j1, j2, j, m1, m2, m):
71     """
72     计算3j符号
73     """
74     # 3j符号要求 m1 + m2 + m = 0
75     if abs(m1 + m2 + m) > 1e-10:
76         return 0.0
77
78     cg = clebsch_gordan(j1, j2, j, m1, m2, -m)
79     if abs(cg) < 1e-10:
80         return 0.0
81
82     phase = (-1.0) ** (j1 - j2 - m)
83     return phase * cg / math.sqrt(2 * j + 1)
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
        统"),
97         (1, 0.5, 1.5, 1, 0.5, 1.5, "混合整数半整数"),
98         (1, 1, 1, 1, 0, 1, "不满足选择定则的例子"),
99         # 新增测试案例, 满足3j符号条件 m1+m2+m=0
100        (1, 1, 2, 1, 1, -2, "3j符号测试1"),
101        (1, 1, 1, 1, -1, 0, "3j符号测试2"),
102        (0.5, 0.5, 1, 0.5, -0.5, 0, "3j符号测试3")
103    ]
104
105    print("测试样例及结果:")
106    print("-" * 50)
107
108    for j1, j2, j, m1, m2, m, desc in test_cases:
109        cg = clebsch_gordan(j1, j2, j, m1, m2, m)
110        three_j = three_j_symbol(j1, j2, j, m1, m2, m)
111
112        print(f"案例: {desc}")
113        print(f"输入: j1={j1}, j2={j2}, j={j}, m1={m1}, m2={m2}, m={m}")
114        print(f"CG系数: {cg:.10f}")
115        print(f"3j符号: {three_j:.10f}")
116        print("-" * 40)
117
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     except ValueError:
147         print("错误: 请输入有效的数字!")
148     except Exception as e:
149         print(f"计算错误: {e}")
150
151
152 def main():
153     """主函数"""
154     # 首先运行测试样例
155     run_test_cases()
156
157     # 然后进入交互式输入模式
158     interactive_input()
159
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>
```