高等量子力学笔记

陈炎柯*

版本：*1.03*

更新时间：*October 30, 2020*

*chenyanke@stu.pku.edu.cn, 个人主页 http://yankechen.xyz

写在前面

该笔记是在北京大学 2020 年秋季学期上尹澜教授的高等量子力学课程所记录，该课程主要使用的教材是 J. J. Sakurai 以及 Jim Napolitano 所著的《Modern Quantum Mechanics》。课程和教材本身的难度不高，易于理解，对于细节的讲述十分详细，本笔记主要用于快速浏览，追求简短，故省略了大部分如推导一类的过程。主要记录思路和结果。

笔记大部分是随着上课在课堂上写的，目前还没有进行订正，所以可能会有很多笔误，等后续慢慢再修改吧。

第一章的内容省略了很多，主要原因是我在第一章上课时笔记是手写的，由于内容都是基础，后面也比较懒，就没再整理成 LaTeX 版的。

笔记模板来自 ElegantLaTeX Group，模板下载地址：https://ddswhu.me/resource/

随课程进行每周更新。

2020.09.30 更新至 2.3 节

2020.10.14 更新至 2.6 节

2020.10.21 更新至 3.4 节

2020.10.30 更新至 3.6 节

Contents

1 量子力学的数学基础和基本原理

1.1 量子力学的数学基础

希尔伯特空间、算符、本征态和本征值的基本介绍略。

厄米算符的重要性质 (证明略)

- 厄米算符的本征值是实数。
- 厄米算符的属于不同本征值的本征态相互正交

完备性定理:

可以把任意态矢用厄米算符的本征态展开，设 $\hat{A}\left|\psi_n\right\rangle = \lambda_n \left|\psi_n\right\rangle$。

$$\left|\Psi\right\rangle = \sum_n c_n \left|\psi_n\right\rangle, \quad c_n = \left\langle\psi_n \middle| \Psi\right\rangle \tag{1.1}$$

$\left|\psi\right\rangle_n$ 方向的投影算符为:$\left|\psi_n\right\rangle \left\langle\psi_n\right|$，且

$$\sum_n \left|\psi_n\right\rangle \left\langle\psi_n\right| = 1 \tag{1.2}$$

算符的矩阵表示:

设 $\hat{A}\left|\psi_n\right\rangle = \lambda_n \left|\psi_n\right\rangle$，则

$$\hat{B} = \sum_{m,n} \left|\psi_m\right\rangle \left\langle\psi_m\right| \hat{B} \left|\psi_n\right\rangle \left\langle\psi_n\right| = \sum_{m,n} B_{mn} \left|\psi_m\right\rangle \left\langle\psi_n\right| \tag{1.3}$$

1.2 测量、观测量与不确定原理

观测: 观测前系统处于 $\left|\Psi\right\rangle$, 针对可观测量 $\hat{A}$ 进行观测，则观测结果为本征值 λ_n，观测到个本征值的几率为 $|c_n|^2 = |\left\langle\psi_n \middle| \Psi\right\rangle|^2$，且期望为:

$$\langle\hat{A}\rangle = \left\langle\Psi\right| \hat{A} \left|\Psi\right\rangle = \sum_n c_n^* c_n A_n = A_n P_n \tag{1.4}$$

不确定原理

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle\langle\Delta\hat{B}^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|^2 \tag{1.5}$$

位置空间、动量空间的展开，波函数等略。

2 量子动力学

2.1 时间演化与薛定谔方程

时间演化算符 $|\psi_t\rangle = \hat{U}(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$

$$\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle \Rightarrow \hat{U}^\dagger\hat{U} = 1 \tag{2.1}$$

$$\hat{U}(t_2,t_1)\hat{U}(t_1,t_0) = \hat{U}(t_2,t_0), \quad \hat{U}(t_1,t_0) = \exp\left[\frac{-i\hat{H}(t_1-t_0)}{\hbar}\right] \tag{2.2}$$

$$\hat{U}(t+dt,t_0) - \hat{U}(t,t_0) = \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)dt \Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle \tag{2.3}$$

设 $\hat{H}\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$，以 $|\psi_n\rangle$ 为基矢

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|\psi_n\rangle\,, \quad c_n(t) = \langle\psi_n|\,\psi(t)\rangle \Rightarrow c_n(t) = c_n(0)e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}} \tag{2.4}$$

可观测量随时间的变化:

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \tag{2.5}$$

如果 $[\hat{A},\hat{H}] = 0$ 则 $\langle\hat{A}\rangle$ 不随时间变化，如果 $[\hat{A},\hat{H}] \neq 0$，则在 $\hat{H}$ 本征矢做基底的情况下

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_{n,m} A_{mn}c_m^*(t_0)c_n(t_0)\exp\left[\frac{-i(E_n-E_m)(t-t_0)}{\hbar}\right], \quad \omega_{nm} = \frac{E_n-E_m}{\hbar} \tag{2.6}$$

时间关联函数:

$$C(t) = \langle\psi(t_0)|\psi(t)\rangle = \sum_n |c_n(t_0)|^2\exp\left[\frac{-iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right] \tag{2.7}$$

关于时间的测不准原理

$$\Delta t\Delta E \geq \hbar \tag{2.8}$$

其中 Δt 是系统状态变化的特征时间，ΔE 是系统在能量空间的分布范围。

2.2 两种绘景

薛定谔绘景: 算符不随时间变化，态矢随时间的变化由薛定谔方程描述

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle\,, \quad i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \tag{2.9}$$

海森堡绘景: 态矢不随时间变化，算符随时间的变化由海森堡方程描述

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}(0)\hat{U}(t), \quad \frac{d\hat{F}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{F}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{F}\hat{H}\hat{U}\right) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t),\hat{H}(t)] \tag{2.10}$$

以上约定两种绘景在 $t_0 = 0$ 时刻是相同的

$$\hat{A}^H(t_0 = 0) = \hat{A}^S, \quad |\psi^H\rangle = |\psi^S(t_0 = 0)\rangle, \quad \hat{U}(t) = \hat{U}(t, t_0 = 0) \tag{2.11}$$

埃伦福斯特定理:

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle = -\langle\nabla V(\hat{x})\rangle \tag{2.12}$$

基矢的变化:

在薛定谔绘景下

$$\hat{A}^S = |\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle, \quad |\psi^S(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n\rangle, \quad c_n(t) = \langle\psi_n| \psi^S(t)\rangle \tag{2.13}$$

在海森堡绘景下:

$$\hat{A}^H(t) |\psi^H(t)\rangle = \lambda_n |\psi_n^H(t)\rangle, \quad |\psi_n^H(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t) |\psi^H\rangle \tag{2.14}$$

$$|\psi^H\rangle = c_n(t)\psi_n^H(t)\rangle, \quad c_n(t) = \langle\psi_n^H(t)| \psi^H\rangle \tag{2.15}$$

从海森堡绘景下也可以得到形式上的薛定谔方程 (两种绘景相互等价)

2.3 谐振子

一维谐振子

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{2.16}$$

(后面为了简单不算符不写上标了) 定义:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + \frac{ip}{m\omega}), \quad a^\dagger = a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - \frac{ip}{m\omega}) \tag{2.17}$$

可得

$$[a, a] = 0, \quad [a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad [a, a^\dagger] = 1 \tag{2.18}$$

定义粒子数算符

$$N = a^\dagger a, \quad N^\dagger = N, \quad [N, a] = -a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \tag{2.19}$$

则有

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \tag{2.20}$$

设 $N|n\rangle = n|n\rangle$，有

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = \langle n| a^\dagger a |n\rangle \geq 0 \tag{2.21}$$

此外有

$$Na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \tag{2.22}$$

可设 $a|n\rangle = c_n(n-1)$，可得 $c_n = \sqrt{n}$，即

$$a_n|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\,, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{2.23}$$

由于 $n \geq 0$ 不能无限减小，需设 $a^{n+1}|\alpha\rangle = 0$，可得 $\alpha = n$。n 必须为非负整数。H 的基态为 $|0\rangle$，$E_0 = 1/2\hbar\omega$

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle\,, \quad E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \tag{2.24}$$

易得

$$\langle n|x|n\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0, \quad \langle\frac{m\omega^2x^2}{2}\rangle = \langle\frac{p^2}{2m}\rangle = \frac{\langle H\rangle}{2} \tag{2.25}$$

在基态有

$$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle\left\langle(\Delta p)^2\right\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \tag{2.26}$$

本征波函数

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle, \langle x|a|0\rangle = 0 \tag{2.27}$$

$$(x+\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x})\psi_0(x) = 0, \quad \psi_0(x) = \frac{1}{\pi^4\sqrt{x_0}}e^{-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2}, \quad x_0 = \frac{\hbar}{\omega} \tag{2.28}$$

$$\psi_n(x) = \langle x|\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\right)\left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\right)\left(x - x_0^2\frac{d}{dx}\right)^n \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right] \tag{2.29}$$

时间的演化:

由海森堡方程可得:

$$\frac{da}{dt} = -i\omega a, \quad \frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \tag{2.30}$$

定义相干态 $|\alpha\rangle$，是 a 的本征态，$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$，对 N 的本征态 $|n\rangle$ 展开:

$$|\alpha\rangle = \sum_n \alpha_n|n\rangle\,, \quad \alpha_{n+1}\sqrt{n} = \alpha_n\alpha, \quad \alpha_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\alpha_0 \tag{2.31}$$

$$|\alpha\rangle = \alpha_0\sum_n\frac{\alpha^n}{n!}(a^\dagger)^n|0\rangle \tag{2.32}$$

由于 a 不是厄米算符，基矢没有正交性，约定归一化系数

$$|\alpha_0|^2e^{|\alpha|^2} = 1 \tag{2.33}$$

有完备性

$$\int d\alpha d\alpha^*|\alpha\rangle\langle\alpha| = \pi \tag{2.34}$$

2.4 薛定谔方程经典极限和 WKB 近似

系统的哈密顿量为:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V, \quad \langle r|V|r'\rangle = V(r)\delta(r-r') \tag{2.35}$$

在坐标表象下:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)]\psi(r) \tag{2.36}$$

稳态解:

$$\psi_n(\vec{r},t) = e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(\vec{r}) \tag{2.37}$$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)]\psi_n = E_n\psi_n \tag{2.38}$$

几率密度与几率流: 由薛定谔方程可以推导出几率密度和几率流:

$$\rho = \psi^*\psi, \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi], \quad \frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla\cdot\vec{j} = 0 \tag{2.39}$$

设波函数为:

$$\psi(\vec{r},t) = \sqrt{\rho(\vec{r},t)}\exp\left(\frac{iS(\vec{r},t)}{\hbar}\right), \quad \psi^*\nabla\psi = \sqrt{\rho}\nabla(\sqrt{\rho}) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\rho\nabla S \tag{2.40}$$

可以得到:

$$\vec{j} = \frac{\rho\nabla S}{m} \tag{2.41}$$

即相位在坐标空间的变化导致几率流。

经典极限: 将刚刚写出的波函数的形式应用于薛定谔方程:

$$\begin{aligned} -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[\nabla^2\sqrt{\rho} + \left(\frac{2i}{\hbar}\right)(\nabla\sqrt{\rho})\cdot(\nabla S) - \left(\frac{1}{\hbar^2}\right)\sqrt{\rho}|\nabla S|^2 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{\rho}\nabla^2 S\right] + \sqrt{\rho}V \\ = i\hbar\left[\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t} + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\sqrt{\rho}\frac{\partial S}{\partial t}\right] \end{aligned} \tag{2.42}$$

在经典极限下，$\hbar\,|\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2$，可以得到:

$$\frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \tag{2.43}$$

此即 Hamilton-Jacobi 方程。从经典极限上看，波函数的相位对应经典力学中的作用量。

WKB 近似: 考虑一维问题, 在 $E > V$ 时

$$S(x,t) = W(x) - Et \Rightarrow W(x) = \pm\int^x dx'\sqrt{2m(E-V)} \tag{2.44}$$

对于稳态，由连续性方程以及:

$$\vec{j} = \frac{\rho\nabla W}{m} \tag{2.45}$$

即:

$$\rho \propto (\nabla W)^{-1}=\left(\sqrt{2m(E-V)}\right)^{-1} \tag{2.46}$$

波函数即可写为:

$$\psi(x,t)\propto \frac{1}{(E-V)^{(1/4)}}\exp\left[\pm\frac{i}{\hbar}\int^{x}dx'\sqrt{2m(E-V)}\right]e^{-iEt/\hbar} \tag{2.47}$$

对于 $E<V$ 类似地可以得到:

$$\psi(x,t)\propto \frac{1}{(V-E)^{(1/4)}}\exp\left[\pm\frac{1}{\hbar}\int^{x}dx'\sqrt{2m(V-E)}\right]e^{-iEt/\hbar} \tag{2.48}$$

WKB 近似条件 $\hbar\left|\nabla^2 S\right|\ll|\nabla S|^2$，对应:

$$\lambda=\frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}}\ll\frac{2(E-V)}{\left|\frac{dV}{dx}\right|} \tag{2.49}$$

即德布罗意波长远小于势井的特征长度。
在 $E=V(x)$ 附近，WKB 近似不成立，在 $E=V(x_0)$ 附近做线性展开:

$$V(x)\simeq V(x_0)+V'(x-x_0) \tag{2.50}$$

然后严格求解薛定谔方程，本征波函数为 1/3 阶贝塞尔函数。

2.5 路径积分

$$\psi\left(\mathbf{x}'',t\right)=\int d^3x' K\left(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0\right)\psi\left(\mathbf{x}',t_0\right) \tag{2.51}$$

其中传播子为:

$$K\left(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0\right)=\sum_{a'}\left\langle\mathbf{x}''\mid a'\right\rangle\left\langle a'\mid\mathbf{x}'\right\rangle\exp\left[\frac{-iE_{a'}\left(t-t_0\right)}{\hbar}\right] \tag{2.52}$$

有两点值得注意:

(1). $K\left(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0\right)$ 在 $\mathbf{x}',t_0$ 给定的情况下，作为 $\mathbf{x}'',t$ 的函数，满足 Schrödinger 方程。
(2). $\lim_{t\to t_0}K\left(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0\right)=\delta^3\left(\mathbf{x}''-\mathbf{x}'\right)$
(3). $K\left(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0\right)=0,\quad$ for $t<t_0$

传播子是含时 Schrödinger 方程的格林函数，即:

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla''^2+V\left(\mathbf{x}''\right)-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]K\left(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0\right)=-i\hbar\delta^3\left(\mathbf{x}''-\mathbf{x}'\right)\delta\left(t-t_0\right) \tag{2.53}$$

于是只需要得到 K 就可解出 Schrödinger 方程。

Example 2.1 自由粒子: 选取动量本征态 $p\left|p'\right\rangle = p'\left|p'\right\rangle \quad H\left|p'\right\rangle = \left(\frac{p'^2}{2m}\right)\left|p'\right\rangle$

$$K\left(x'', t; x', t_0\right) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp\left[\frac{ip\left(x''-x'\right)}{\hbar} - \frac{ip'^2\left(t-t_0\right)}{2m\hbar}\right] \tag{2.54}$$

积分后可以得到

$$K\left(x'', t; x', t_0\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t-t_0\right)}} \exp\left[\frac{im\left(x''-x'\right)^2}{2\hbar\left(t-t_0\right)}\right] \tag{2.55}$$

可以将传播子写为另一种形式:

$$\begin{aligned} K\left(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0\right) &= \sum_{a'}\left\langle\mathbf{x}'' \mid a'\right\rangle\left\langle a' \mid \mathbf{x}'\right\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}\left(t-t_0\right)}{\hbar}\right] \\ &= \sum_{a'}\left\langle\mathbf{x}''\left|\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)\right|a'\right\rangle\left\langle a'\left|\exp\left(\frac{iHt_0}{\hbar}\right)\right|\mathbf{x}'\right\rangle \\ &= \left\langle\mathbf{x}'', t \mid \mathbf{x}', t_0\right\rangle \end{aligned} \tag{2.56}$$

传播子除了理解为跃迁振幅外，也可以理解为在海森堡绘景下对两组位置基矢的变换，海森堡绘景中也有完备性条件:

$$\int d^3x''\left|\mathbf{x}'', t''\right\rangle\left\langle\mathbf{x}'', t''\right| = 1 \tag{2.57}$$

我们可以在传播子中插入完备集将时间间隔分成多个部分:

$$\begin{aligned} \left\langle\mathbf{x}''', t''' \mid \mathbf{x}', t'\right\rangle = \int d^3x''\left\langle\mathbf{x}''', t''' \mid \mathbf{x}'', t''\right\rangle\left\langle\mathbf{x}'', t'' \mid \mathbf{x}', t'\right\rangle \\ \left(t''' > t'' > t'\right) \end{aligned} \tag{2.58}$$

这成为跃迁振幅的结合性。我们可以任意的将时间间隔分为无穷多份:

$$\begin{aligned} \left\langle x_N, t_N \mid x_1, t_1\right\rangle = &\int dx_{N-1}\int dx_{N-2}\cdots\int dx_2\left\langle x_N, t_N \mid x_{N-1}, t_{N-1}\right\rangle \\ &\times\left\langle x_{N-1}, t_{N-1} \mid x_{N-2}, t_{N-2}\right\rangle\cdots\left\langle x_2, t_2 \mid x_1, t_1\right\rangle \end{aligned} \tag{2.59}$$

由于 $\lim_{\Delta t\to 0}\langle\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}, t+\Delta t|\mathbf{x}, t\rangle \to \delta(\Delta\mathbf{x})$，可以只考虑 $\Delta\mathbf{x}$ 很小的情况。

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}, t+\Delta t|\mathbf{x}, t\rangle &= \langle\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}|e^{-iH\Delta t/\hbar}|\mathbf{x}\rangle \\ &= \langle\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}|e^{-i(p^2/2m)\Delta t/\hbar}|\mathbf{x}\rangle\exp\left(-iV(x)\Delta t/\hbar\right) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi m\Delta t}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{-i\Delta}{\hbar}\left(-\left(\frac{\Delta\mathbf{x}}{\Delta t}\right)^2 + V(\mathbf{x})\right)\right] \\ &= \left(\frac{m}{2\pi m\Delta t}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_t^{t+\Delta t} dtL(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})\right] \\ \Rightarrow \left\langle\mathbf{x}'', t \mid \mathbf{x}', t_0\right\rangle &= \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}''} D[\mathbf{x}]\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_t^{t+\Delta t} dtL(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})\right] \end{aligned} \tag{2.60}$$

2.6 A-B 效应

在电磁场中运动的电子:

$$H=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2+e\phi \tag{2.61}$$

连续性方程为:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{j}=0 \tag{2.62}$$

其中:

$$\mathbf{j}=\left(\frac{\hbar}{m}\right)\mathrm{Im}\left(\psi^*\nabla\psi\right)-\left(\frac{e}{mc}\right)\mathbf{A}|\psi|^2=\left(\frac{\rho}{m}\right)\left(\nabla S-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right) \tag{2.63}$$

规范变换：矢势和标势的选取不唯一

$$\phi\rightarrow\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t},\quad \mathbf{A}\rightarrow\mathbf{A}+\nabla\Lambda \tag{2.64}$$

此式电场和磁场不发生变化:

$$\mathbf{E}=-\nabla\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t},\quad \mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A} \tag{2.65}$$

但是哈密顿量和薛定谔方程会发生变化:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'=H'\psi',\quad H'=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}'}{c}\right)^2+e\phi' \tag{2.66}$$

即:

$$H'=gHg^\dagger,\quad g=\exp\left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x})}{\hbar c}\right] \tag{2.67}$$

有性质:

$$g^\dagger g=1,\quad g^\dagger\mathbf{x}g=\mathbf{x},\quad g^\dagger\mathbf{p}g=\mathbf{p}+\frac{e+\nabla\Lambda}{e} \tag{2.68}$$

$$\psi'=g\psi,\quad S'=S+\frac{e\Lambda}{c} \tag{2.69}$$

考虑在图 2.1中 $\rho_a<\rho<\rho_b$ 部分运动的电子，均匀磁场为:$\mathbf{B}=B\hat{\mathbf{z}}$，产生的磁矢势为:

$$\mathbf{A}=\left(\frac{B\rho_a^2}{2\rho}\right)\hat{\mathbf{e}}_\phi,\quad \nabla\cdot\mathbf{A}=0 \tag{2.70}$$

其中 $\hat{\mathbf{e}}_\phi$ 为沿幅角变化的单位矢量，在柱坐标系下:

$$H=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2,\quad \nabla=\hat{\mathbf{e}}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\hat{\mathbf{z}}\frac{\partial}{\partial z}+\hat{\mathbf{e}}_\rho\frac{1}{\phi}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{2.71}$$

考虑边界条件:

$$\psi(\mathbf{x})|_{\rho=\rho_a,\rho_b}=0 \tag{2.72}$$

考虑 $\rho_a\rightarrow\rho_b$ 的情况，可以分离变量，只考虑沿幅角变化的方向，将问题简化为沿圆周运动的一维问题:

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho_a^2}\left[\frac{\partial}{\partial\rho}-\left(\frac{ie}{\hbar c}\frac{B\rho_a^2}{2}\right)\right]^2 \tag{2.73}$$

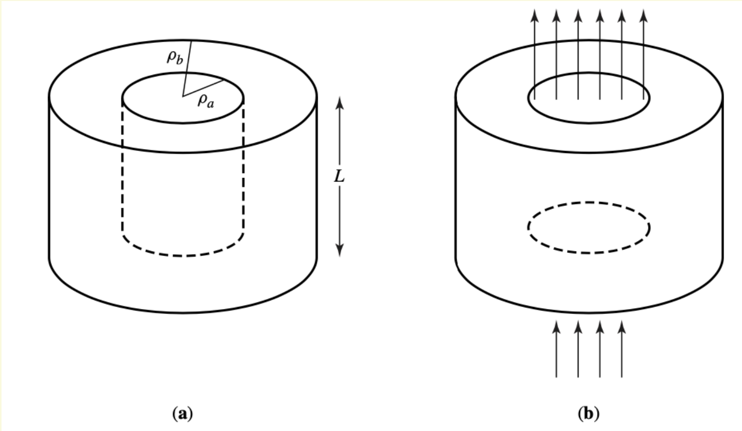

Figure 2.1: Hollow cylindrical shell (a) without a magnetic field, (b) with a uniform magnetic field.

本征函数和本征值为:

$$\psi_n = e^{in\phi}, \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m\rho_a^2}\left(n - \frac{eB\rho_a^2}{2\hbar c}\right)^2 \tag{2.74}$$

当 $\frac{eB\rho_a^2}{2\hbar c}$ 为整数 n_0 时，有基态 $\psi_{n_0}, E_{n_0} = 0$，对于磁通:

$$\frac{\phi}{\phi_0} = n_0, \quad \phi = \pi\rho_a^2 B, \quad \phi_0 = \frac{\hbar c}{e} \tag{2.75}$$

虽然电子不会感受到磁场，但是会感受其他区域的磁场。下面从路径积分角度分析这个问题，对于图 2.2所示的两条积分路径

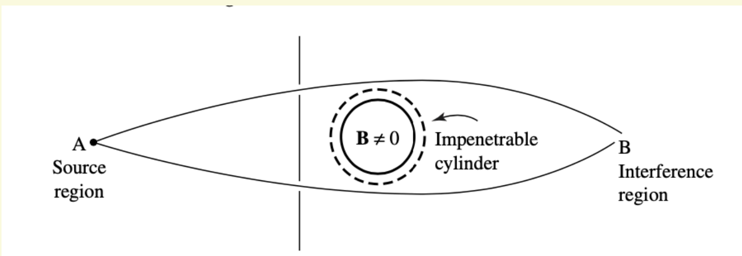

Figure 2.2: The Aharonov-Bohm effect.

上下路径的相位差为:

$$\Delta S = \int_t^{t'} dt(L_{\text{above}} - L_{\text{down}}), \quad L^{(0)}_{\text{classical}} = \frac{m}{2}\left(\frac{d\mathbf{x}}{dt}\right)^2 \to L^{(0)}_{\text{classical}} + \frac{e}{c}\frac{d\mathbf{x}}{dt}\cdot\mathbf{A} \tag{2.76}$$

只考虑磁场引起的相位差:

$$\begin{aligned}\Delta S_B &= \left[\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\right]_{\text{above}} - \left[\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\right]_{\text{below}} = \left(\frac{e}{\hbar c}\right)\oint\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\\ &= \left(\frac{e}{\hbar c}\right)\Phi_B\end{aligned} \tag{2.77}$$

两条路径相同相位，传播几率大，有利于电子运动。

3 角动量理论

3.1 转动与角动量

用 $R(\phi)$ 表示实空间的一个转动，实空间矢量矢量经过转动变换为:

$$V_i' = R_{ij}(\phi)V_j \tag{3.1}$$

R_{ij} 即为转动操作的表示矩阵，这是一个实正交矩阵，即 e$R^T R = RR^T = 1$。
量子力学中的转动:
设系统的初始状态为 $|\psi\rangle$，经过转动后变为 $|\psi\rangle_R$:

$$|\psi\rangle_R = \mathcal{D}(R)\,|\psi\rangle \tag{3.2}$$

考虑绕 z 轴有一无穷小转动:

$$\mathcal{D}(R) = 1 - i\frac{J_z}{\hbar}d\phi + \cdots \tag{3.3}$$

J_z 即为 z 方向转动的生成元，也是量子力学中的角动量算符。绕一般的方向为 $\hat{\mathbf{n}}$ 的无穷小转动为:

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, d\phi) = 1 - i\left(\frac{\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}}{\hbar}\right)d\phi \tag{3.4}$$

对于有限转动 ϕ，可以写成 e 指数的形式:

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, \phi) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \tag{3.5}$$

转动变换生成元 J_i 形成 Lie 代数关系:

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \tag{3.6}$$

可以引入角动量的升降算符:

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y, \quad [J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_z, \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z \tag{3.7}$$

$$\boldsymbol{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \tag{3.8}$$

角动量的各分量不存在共同的本征态，但是 $\boldsymbol{J}^2$ 与所有角动量分量对易:

$$[\boldsymbol{J}^2, J_i] = 0 \tag{3.9}$$

通常选取 $\{\boldsymbol{J}^2, J_z\}$ 作为动力学量的完备集，其本征态为 $|j,m\rangle$。利用升降阶算符推导，可以得到:

$$\boldsymbol{J}^2\,|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\,|j,m\rangle\,, \quad J_z\,|j,m\rangle = m\hbar\,|j,m\rangle \tag{3.10}$$

其中 $m = -J, -J+1, \cdots, J-1, J$.

3.2 自旋 $\frac{1}{2}$ 系统

自选 $\frac{1}{2}$ 系统是一个两分量系统，设:

$$S_z\left|+\right\rangle = +\frac{1}{2}\hbar\left|+\right\rangle, \quad S_z\left|-\right\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\left|-\right\rangle \tag{3.11}$$

$$S_x = \left(\frac{\hbar}{2}\right)\{(|+\rangle\langle-|) + (|-\rangle\langle+|)\} \tag{3.12a}$$

$$S_y = \left(\frac{i\hbar}{2}\right)\{-(|+\rangle\langle-|) + (|-\rangle\langle+|)\} \tag{3.12b}$$

$$S_z = \left(\frac{\hbar}{2}\right)\{(|+\rangle\langle+|) - (|-\rangle\langle-|)\} \tag{3.12c}$$

绕 z 轴的转动为:

$$\mathcal{D}_z(\phi) = \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) \tag{3.13}$$

Example 3.1 计算经过转动的自旋算符*:*

$$\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right)S_x\exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) = S_x\cos\phi - S_y\sin\phi \tag{3.14}$$

两分量系统转动构成 $SU(2)$ 群，该群与 $SO(3)$ 群同态但是不不同构。N 个基矢态空间的转动构成 $SU(N)$ 群。
两分量系统的旋量表示:

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+ \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_- \tag{3.15a}$$

$$S_i \to \sigma_i \tag{3.15b}$$

绕 $\hat{\mathbf{n}}$ 轴的转动为:

$$\exp\left[-i\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\right] = \cos\frac{\phi}{2} - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\sin\frac{\phi}{2} \tag{3.16}$$

欧拉角

3.3 角动量本征态

用角动量本征态 $|jm\rangle$ 进行表示:

$$\langle jm|\,J_z\,|j'm'\rangle = \hbar m\delta jj'\delta mm', \quad \langle jm|\,J^2\,|j'm'\rangle = \hbar^2 j(j+1)\delta jj'\delta mm' \tag{3.17}$$

对于升降阶算符:

$$J_+|j,m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar|j,m+1\rangle \tag{3.18a}$$

$$J_-|j,m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\mid j,m-1\rangle \tag{3.18b}$$

即:

$$\langle j',m'\,|J_\pm|\,j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\hbar\delta_{j'j}\delta_{m',m\pm 1} \tag{3.19}$$

Wigner 函数

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R) = \left\langle j,m'\left|\exp\left(\frac{-i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right)\right|j,m\right\rangle \tag{3.20}$$

Wigner 函数的性质:

(1). $\sum_{m'}\mathcal{D}^{(j)}_{m''m'}(R_1)\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R_2) = \mathcal{D}^{(j)}_{m''m}(R_1R_2)$
(2). $\mathcal{D}_{m'm}(R^{-1}) = \mathcal{D}^*_{mm'}(R)$
(3). $\mathcal{D}(R)|j,m\rangle = \sum_{m'}|j,m'\rangle\,\langle j,m'|\mathcal{D}(R)|j,m\rangle = \sum_{m'}|j,m'\rangle\,\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R)$

用欧拉角表示 $D(R)$:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) &= \left\langle j,m'\left|\exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right)\right|j,m\right\rangle \\ &= = e^{-i(m'\alpha+m\gamma)}\left\langle j,m'\left|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\right|j,m\right\rangle\end{aligned} \tag{3.21}$$

只需要知道 y 方向转动的表示即可:

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) \equiv \left\langle j,m'\left|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\right|j,m\right\rangle \tag{3.22}$$

$j=\frac{1}{2}$ 系统:

$$d^{1/2} = \begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\end{pmatrix} = \cos\frac{\beta}{2} - i\sigma_y\sin\frac{\beta}{2} \tag{3.23}$$

$j=1$ 系统，见 Sakurai 书 198 页，笔记里略了。

3.4 轨道角动量

没有自旋的自由度，所有态都可以用位置的本征态 $|\vec{r}\rangle$ 来表示，首先说明，轨道角动量的表达式和对易关系为:

$$\mathbf{L} = \mathbf{x}\times\mathbf{p},\quad [L_i,L_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar L_k \tag{3.24}$$

为了验证该表达式，考虑绕 z 轴的转动:

$$\exp\left[-i\frac{\delta\phi}{\hbar}L_z\right]|x',y',z'\rangle = |x'-y'\delta\phi, y'+x'\delta\phi\rangle \tag{3.25}$$

或者写为:

$$\begin{aligned}\left[1-i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|x',y',z'\rangle &= \left[1-i\left(\frac{p_y}{\hbar}\right)(\delta\phi x')+i\left(\frac{p_x}{\hbar}\right)(\delta\phi y')\right]|x',y',z'\rangle \\ &= |x'-y'\delta\phi, y'+x'\delta\phi, z'\rangle\end{aligned} \tag{3.26}$$

于是可以得到验证。在球坐标系下:

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{3.27}$$

剩下的略了，在 Sakurai 书中 200-201 页

球谐函数

对于一个中心势，系统的 Hamiltonian 的本征函数:

$$\langle \mathbf{x}' \mid n,l,m\rangle = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{3.28}$$

球谐函数:

$$Y_l^m(\theta,\phi) \propto P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{3.29}$$

满足:

$$L_zY_l^m = \hbar m Y_l^m, \quad L^2Y_l^m = \hbar^2 l(l+1)Y_m^l \tag{3.30}$$

球谐函数的正交性:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) Y_{l'}^{m'*}(\theta,\phi)Y_l^m(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{3.31}$$

球谐函数的完备性:

$$\sum_{l,m} Y_l^{m*}(\theta,\phi)Y_l^m(\theta',\phi') = \delta(\hat{\mathbf{n}}-\hat{\mathbf{n}}') = \delta(\phi-\phi')\sin\theta\delta(\theta-\theta') \tag{3.32}$$

球谐函数的一般表达式:

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}e^{im\phi}\frac{1}{\sin^m\theta}\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(\sin\theta)^{2l} \tag{3.33}$$

球谐函数有性质:

$$Y_l^{-m}(\theta,\phi) = (-1)^m\left[Y_l^m(\theta,\phi)\right]^* \tag{3.34}$$

球谐函数和 Wigner 函数之间的关系

对一方位角方向 $\hat{\mathbf{n}}$，都可以找到一个转动操作:

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \mathcal{D}(R)|\mathbf{z}\rangle \tag{3.35}$$

用欧拉角表示应满足:

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \tag{3.36}$$

可以表示为:

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \sum_l \sum_m \mathcal{D}(R)|l, m\rangle\langle l, m \mid \hat{\mathbf{z}}\rangle \tag{3.37}$$

也就是说:

$$\langle l, m' \mid \hat{\mathbf{n}}\rangle = \sum_m \mathcal{D}^{(l)}_{m'm}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0)\langle l, m \mid \hat{\mathbf{z}}\rangle \tag{3.38}$$

进一步推导可得:

$$Y_l^{m'*}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}}\mathcal{D}^{(l)}_{m'0}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \tag{3.39}$$

或者写为:

$$\mathcal{D}^{(l)}_{m0}(\alpha, \beta, \gamma = 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}}Y_l^{m^*}(\theta, \phi)\bigg|_{\theta=\beta, \phi=\alpha} \tag{3.40}$$

3.5 角动量的耦合

考虑两个子空间的角动量 $\mathbf{J}_1$ 和 $\mathbf{J}_2$ 的耦合:

$$[J_{1\alpha}, J_{2\beta}] = 0, \quad J_{1\alpha}, J_{1\beta} = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}J_{1\gamma}, \quad J_{2\alpha}, J_{2\beta} = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}J_{2\gamma} \tag{3.41}$$

总的转动表示为两个子空间转动的直积:

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}^1(R) \otimes \mathcal{D}^{(2)}(R) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\mathbf{R}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \tag{3.42}$$

总角动量:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{J_2} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2, \quad [J_\alpha, J_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma \tag{3.43}$$

有两种方式表示态矢量，一种是直积空间，一种是总角动量空间，首先是在直积空间，本征态为:

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \tag{3.44a}$$

$$J_i^2|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = j_i(j_i+1)\hbar^2|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle, \quad i = 1, 2 \tag{3.44b}$$

$$J_{iz}|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = m_i\hbar|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle, \quad i = 1, 2 \tag{3.44c}$$

在总角动量空间，选取力学量完备集 J^2, J_z, J_1^2, J_2^2，满足:

$$J^2|j_1,j_2;j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j_1,j_2;j,m\rangle \tag{3.45}$$

其他的本征值很简单略去不写。两种基矢之间的变换为:

$$|j_1j_2;jm\rangle = \sum_{m_1}\sum_{m_2}|j_1j_2;m_1m_2\rangle\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;jm\rangle \tag{3.46}$$

其中矩阵元 $\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;jm\rangle$ 即为 C-G 系数. 有几个性质:

(1). $m = m_1+m_2$

(2). $|j_1-j_2|\le j\le j_1+j_2$

(3). 总的态的数目为:$N=(2j_1+1)(2j_2+1)=\sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2}(2j+1)$

下面是 C-G 系数的一些性质，首先是正交性:

$$\sum_{j}\sum_{m}\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;jm\rangle\langle j_1j_2;m_1'm_2'\mid j_1j_2;jm\rangle = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'} \tag{3.47a}$$

$$\sum_{m_1}\sum_{m_2}\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;jm\rangle\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{3.47b}$$

特殊地，取 $j'=j, m'=m=m_1+m_2$ 时:

$$\sum_{m_1}\sum_{m_2}|\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;jm\rangle|^2 = 1 \tag{3.48}$$

Wigner's 3-j symbol:

$$\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;jm\rangle = (-1)^{j_1-j_2+m}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m\end{pmatrix} \tag{3.49}$$

C-G 系数的迭代关系:

使用角动量升降算符:

$$\begin{aligned}J_{\pm}|j_1j_2;jm\rangle =&\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j_1j_2;j,m\pm1\rangle \\ =&(J_{1\pm}+J_{2\pm})\sum_{m_1}\sum_{m_2}|j_1j_2;m_1m_2\rangle\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;jm\rangle \\ =&\sum_{m_1'}\sum_{m_2'}\left(\sqrt{(j_1\mp m_1')(j_1\pm m_1'+1)}\,|j_1j_2;m_1'\pm1,m_2'\rangle\right. \\ &\left.+\sqrt{(j_2\mp m_2')(j_2\pm m_2'+1)}\,|j_1j_2;m_1',m_2'\pm1\rangle\right) \\ &\times\langle j_1j_2;m_1'm_2'\mid j_1j_2;jm\rangle\end{aligned} \tag{3.50}$$

等式两边左乘 $\langle j_1j_2;m_1m_2|$，可以得到 C-G 系数的迭代关系:

$$\begin{aligned}&\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;j,m\pm1\rangle \\ &=\sqrt{(j_1\mp m_1+1)(j_1\pm m_1)}\,\langle j_1j_2;m_1\mp1,m_2\mid j_1j_2;jm\rangle \\ &\quad+\sqrt{(j_2\mp m_2+1)(j_2\pm m_2)}\,\langle j_1j_2;m_1,m_2\mp1\mid j_1j_2;jm\rangle\end{aligned} \tag{3.51}$$

如 Figure3.1所示，C-G 系数是可以知 2 求 2 的。

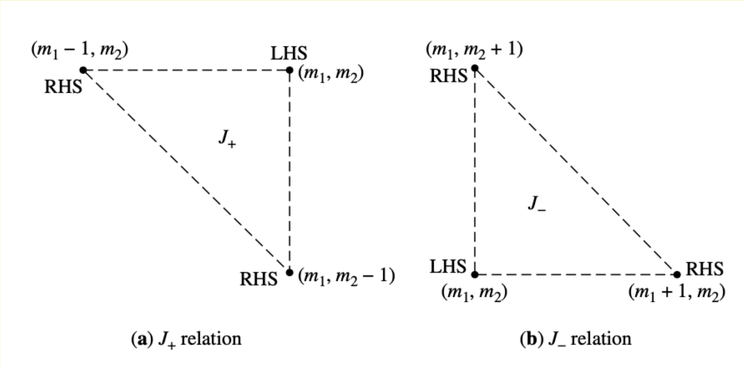

Figure 3.1: m_1m_2-plane showing the Clebsch-Gordan coefficients related by the re- cursion relations

可以通过 Figure3.2所示的顺序求得所有的 C-G 系数。

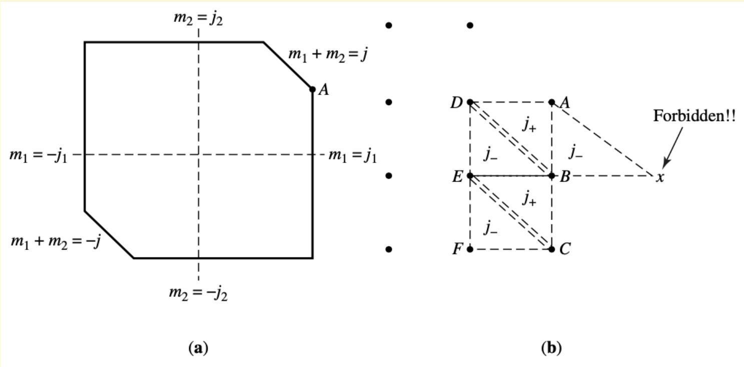

Figure 3.2: Use of the recursion relations to obtain the Clebsch-Gordan coefficients.

CG 系数与转动矩阵

总的空间转动可以写为两个转动的直积:

$$\mathcal{D}(R)=\mathcal{D}_1(R)+\mathcal{D}_1(R) \tag{3.52}$$

对应的 Wigner 函数:$\mathcal{D}^{(j_1)}\otimes\mathcal{D}^{(j_1)}$ 可约化为一些不可约表示的直和:

$$\mathcal{D}^{(j_1)}\otimes\mathcal{D}^{(j_2)}=\mathcal{D}^{(j_1+j_2)}\oplus\mathcal{D}^{(j_1+j_2-1)}\oplus\cdots\oplus\mathcal{D}^{(|j_1-j_2|)} \tag{3.53}$$

相应的表示矩阵元可以用 CG 系数展开:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1m_1'}(R)\mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2m_2'}(R)=&\sum_j\sum_m\sum_{m'}\langle j_1j_2;m_1m_2\mid j_1j_2;jm\rangle\\&\times\langle j_1j_2;m_1'm_2'\mid j_1j_2;jm'\rangle\,\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(R)\end{aligned} \tag{3.54}$$

证明比较直接了当，在 Sakurai 书 230 页。

3.6 张量算符

矢量算符的期待值在转动操作下应有性质:

$$\langle\alpha\left|V_i\right|\alpha\rangle\rightarrow\left\langle\alpha\left|\mathcal{D}^{\dagger}(R)V_i\mathcal{D}(R)\right|\alpha\right\rangle=\sum_j R_{ij}\left\langle\alpha\left|V_j\right|\alpha\right\rangle\tag{3.55}$$

或者写为:

$$\mathcal{D}^{\dagger}(R)V_i\mathcal{D}(R)=\sum_j R_{ij}V_j\tag{3.56}$$

也就是任意矢量算符 $\vec{V}$ 必须满足易关系:

$$V_i+\frac{\varepsilon}{i\hbar}\left[V_i,\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\right]=\sum_j R_{ij}(\hat{\mathbf{n}};\varepsilon)V_j\Rightarrow\left[V_i,J_j\right]=i\varepsilon_{ijk}\hbar V_k\tag{3.57}$$

笛卡尔张量与不可约张量

将矢量的变换性质进行推广得到张量的变换性质:

$$T_{ijk\cdots}\rightarrow\sum_{i'}\sum_{j'}\sum_{k'}\cdots R_{ii'}R_{jj'}\cdots T_{i'j'k'\cdots}\tag{3.58}$$

张量表示 $R_{ii'}R_{jj'}\cdots$ 常是可约表示，例如设 $\mathbf{U},\mathbf{V}$ 是两个矢量，考虑一个并矢张量:

$$T_{ij}=U_iV_j\tag{3.59}$$

可将其约化为:

$$U_iV_j=\frac{\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}}{3}\delta_{ij}+\frac{\left(U_iV_j-U_jV_i\right)}{2}+\left(\frac{U_iV_j+U_jV_i}{2}-\frac{\mathbf{U}\cdot\mathbf{V}}{3}\delta_{ij}\right)\tag{3.60}$$

第一项是转动下不变的标量，第二项是反对称张量，第三项为对称的张量，独立分量个数为:

$$3\times3=1+3+5\tag{3.61}$$

与球谐函数 $Y_0^0,Y_{m_1}^1,Y_{m_2}^2$ 非常相似。

量子力学中的球张量算符

下面介绍量子力学中的球张量算符，将球谐函数推广为球张量算符:

$$T_q^{(k)}(\mathbf{V})\leftrightarrow Y_{m=q}^{l=k}(\mathbf{V})\tag{3.62}$$

其中 $Y_m^l(\mathbf{V})$ 代表用 $\mathbf{V}$ 代替 $\hat{\mathbf{n}}$，例如:

$$Y_{\pm 1}^1=\mp\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x\pm iy}{\sqrt{2}r}\rightarrow T_{\pm 1}^{(1)}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\mp\frac{V_x\pm iV_y}{\sqrt{2}}\right)\tag{3.63}$$

球张量是不可约的，有转动性质:

$$\mathcal{D}^{\dagger}(R)T_q^{(k)}\mathcal{D}(R)=\sum_{q'=-k}^{k}\mathcal{D}_{qq'}^{(k)*}T_{q'}^{(k)}\tag{3.64}$$

考虑无穷小转动，将其展开，可以推导得到:

$$\left[J_z,T_q^{(k)}\right]=\hbar qT_q^{(k)},\quad\left[J_{\pm},T_q^{(k)}\right]=\hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}T_{q\pm 1}^{(k)}\tag{3.65}$$

有的教科书直接采用对易关系定义球张量算符。
利用球张量和 CG 系数，可以定义更高阶的球张量。设 $X_{q_1}^{k_1},Z_{q_2}^{k_2}$ 是两个不可约球张量，则:

$$T_q^k=\sum_{q_1,q_2}\langle k_1,k_2;q_1,q_2|k_1,k_2;k,q\rangle X_{q_1}^{k_1}Z_{q_2}^{k_2}\tag{3.66}$$

Wigner-Eckart 定理

首先通过 $\left[J_z,T_q^{(k)}\right]-\hbar qT_q^{(k)}=0$，很容易证明:

$$\left\langle\alpha',j'm'\left|T_q^{(k)}\right|\alpha,jm\right\rangle=0,\ \text{unless}\ m'=q+m\tag{3.67}$$

Wigner-Eckart 定理给出球张量的矩阵元:

$$\left\langle\alpha',j'm'\left|T_q^{(k)}\right|\alpha,jm\right\rangle=\langle jk;mq\mid jk;j'm'\rangle\frac{\langle\alpha'j'||T^{(k)}||\alpha j\rangle}{\sqrt{2j+1}}\tag{3.68}$$

其中 $|\alpha\rangle,|\alpha'\rangle$ 是与角动量无关的量子数。证明略，见 Sakurai 253 页