角动量的耦合

步允霆

2023 年 11 月 24 日

目录

1 问题的梗概

1.1 态空间

我们考虑两个粒子的体系，给这两个子体系的各个量分别用指标 1 和 2 表示。

在子体系 (1) 的态空间 $\mathscr{E}_1$ 中,我们假设已经知道一个标准基 $|k_1, j_1, m_1\rangle$，他由 $\boldsymbol{J}_1^2$ 和 J_{1z} 的共同本征矢构成，这里的 $\boldsymbol{J}_1$ 是子体系 (1) 的角动量算符：

$$\boldsymbol{J}_1^2|k_1, j_1, m_1\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2|k_1, j_1, m_1\rangle \tag{1a}$$

$$J_{1z}|k_1, j_1, m_1\rangle = m_1\hbar|k_1, j_1, m_1\rangle \tag{1b}$$

$$J_{1\pm}|k_1, j_1, m_1\rangle = \hbar\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)}|k_1, j_1, m_1 \pm 1\rangle \tag{1c}$$

同样，子体系 (2) 的态空间 $\mathscr{E}_2$ 和另一个标准基 $|k_2, j_2, m_2\rangle$ 相联系：

$$\boldsymbol{J}_2^2|k_2, j_2, m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2|k_2, j_2, m_2\rangle \tag{2a}$$

$$J_{2z}|k_2, j_2, m_2\rangle = m_2\hbar|k_2, j_2, m_2\rangle \tag{2b}$$

$$J_{2\pm}|k_2, j_2, m_2\rangle = \hbar\sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)}|k_2, j_2, m_2 \pm 1\rangle \tag{2c}$$

总体系的态空间是 $\mathscr{E}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 的张量积：

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2 \tag{3}$$

我们已经知道这个空间中的一个基，他由 $\mathscr{E}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 中已选定的基的张量积构成，可将这个基中的矢量记作：

$$
\begin{aligned}
&|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \\
&|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |k_1, j_1, m_1\rangle \otimes |k_2, j_2, m_2\rangle
\end{aligned} \tag{4}
$$

我们可将空间看做两两正交的诸子空间 $\mathscr{E}(k, j)$ 的直和，这些空间具有下述性质：

(1)$\mathscr{E}(k, j)$ 是 $(2j+1)$ 维的。

(2)$\mathscr{E}(k, j)$ 在 $\boldsymbol{J}^2, J_z, J_\pm$ 的作用下，具有空间不变性，即这些算符只在每一个子空间 $\mathscr{E}(k, j)$ 内才有非零矩阵元。

(3) 在一个子空间 $\mathscr{E}(k, j)$ 内，角动量 $\boldsymbol{J}$ 的任意函数 $F(\boldsymbol{J})$ 的矩阵元与 k 无关。

因而，空间 $\mathscr{E}$ 就是得自一个子空间 $\mathscr{E}_1(k_1, j_1)$ 和一个子空间 $\mathscr{E}_2(k_2, j_2)$ 的张量积的子空间 $\mathscr{E}(k_1, k_2, j_1, j_2)$ 的直和：

$$
\mathscr{E}(k_1, k_2, j_1, j_2) = \mathscr{E}_1(k_1, j_1) \otimes \mathscr{E}_2(k_2, j_2) \tag{5}
$$

子空间 $\mathscr{E}(k_1, k_2, j_1, j_2)$ 的维数是 $(2j_1+1)(2j_2+1)$；他在 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 的作用下具有空间不变性。

1.2 对易关系

所考虑的体系的总角动量由下式定义：

$$
\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 \tag{6}
$$

这里 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 是在不同的空间 $\mathscr{E}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 中起作用的算符的延伸，因而是对易的。当然，$\boldsymbol{J}_1$ 的诸分量，$\boldsymbol{J}_2$ 的诸分量都满足作为角动量特征的那些对易关系。很容易验证，$\boldsymbol{J}$ 同样满足那些关系式。

由于 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 分别和 $\boldsymbol{J}_1^2$ 与 $\boldsymbol{J}_2^2$ 对易，$\boldsymbol{J}$ 也就这样；特别的，$\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 可以和 $\boldsymbol{J}_1^2$ 与 $\boldsymbol{J}_2^2$ 对易：

$$
[J_z, \boldsymbol{J}_1^2] = [J_z, \boldsymbol{J}_2^2] = 0 \tag{7a}
$$

$$[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}_1^2] = [\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}_2^2] = 0 \tag{7b}$$

另一方面，J_{1z} 与 J_{2z} 显然可以和 J_z 对易

$$[J_{1z}, J_z] = [J_{2z}, J_z] = 0 \tag{8}$$

但不能和 $\boldsymbol{J}^2$ 对易。实际上，$\boldsymbol{J}^2$ 可以通过 $\boldsymbol{J}_1$ 与 $\boldsymbol{J}_2$ 来表示：

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + 2\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2 \tag{9}$$

但是，$\boldsymbol{J}^2$ 既不能与 J_{1z} 也不能与 J_{2z} 对易：

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{J}^2, J_{1z}] &= [\boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + 2\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2, J_{1z}] \\
&= 2[\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2, J_{1z}] \\
&= 2[J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y}, J_{1z}] \\
&= 2\mathrm{i}\hbar(-J_{1y}J_{2x} + J_{1x}J_{2y})
\end{aligned} \tag{10}$$

我们可以将 $\boldsymbol{J}^2$ 的表示式变换为

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \tag{11}$$

这是因为

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2 &= J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z} \\
&\frac{1}{2}(J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}) + J_{1z}J_{2z}
\end{aligned} \tag{12}$$

1.3 有待进行的基的变换

基(4)中的一个矢量 $|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ 同时是观察算符：

$$\boldsymbol{J}_1^2, \boldsymbol{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z} \tag{13}$$

的本征矢，分别对应于本征值 $j_1(j_1+1)\hbar^2, j_2(j_2+1)\hbar^2, m_1\hbar, m_2\hbar$.(4)式中的基适用于研究两个子体系的各自的角动量 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$。

根据(7)式，观察算符

$$\boldsymbol{J}_1^2, \boldsymbol{J}_2^2, \boldsymbol{J}^2, J_z \tag{14}$$

互相对易。我们要构成这些观察算符的共同本征矢的一个正交归一集合；这个新的基将适用于研究体系的总角动量。这个基和前面那个基不是相同的，因为 $\boldsymbol{J}^2$ 不能和 J_{1z} 与 J_{2z} 对易。

由(5)定义的 $\mathscr{E}$ 的子空间 $\mathscr{E}(k_1,k_2;j_1,j_2)$，在 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 的一切算符函数的作用下，具有整体不变性，因而在总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的一切函数的作用下也具有整体不变性。由此推知，我们想要对角化的观察算符 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z，只在同一子空间 $\mathscr{E}(k_1,k_2;j_1,j_2)$ 的诸矢量之间，才有非零矩阵元；在(4)的基中，表示 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的矩阵是分块对角化的，也就是说，这种矩阵被分解为一系列子矩阵，其中的每一个对应于确定的子空间间 $\mathscr{E}(k_1,k_2;j_1,j_2)$。于是，问题归结于每一个子空间间 $\mathscr{E}(k_1,k_2;j_1,j_2)$ 内部的基的变换，这些子空间的维数 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 是有限的。

此外，在(4)的基中，$\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 的一个任意函数的矩阵元与 k_1 及 k_2 无关；当然，$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的矩阵元也是这样的。因而 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的对角化问题，在对应于同一个 j_1 和同一个 j_2 的一切子空间 $\mathscr{E}(k_1,k_2;j_1,j_2)$ 中，是完全相同的。正是由于这个原因，我们通常说，将角动量 j_1 和 j_2 相加，而不指名其他量子数。为了书写简便，我们省略 k_1 和 k_2，用 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 表示子空间 $\mathscr{E}(k_1,k_2;j_1,j_2)$，用 $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ 表示在(4)的基中属于这个子空间的诸矢量：

$$\mathscr{E}(j_1,j_2)\equiv\mathscr{E}(k_1,k_2;j_1,j_2) \tag{15a}$$

$$|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\equiv|k_1,k_2;j_1,j_2;m_1,m_2\rangle \tag{15b}$$

而 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 是两两正交的诸子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 的直和，其中的每一个在算符 $\boldsymbol{J}^2,J_z,J_+,J_-$ 的作用下是具有整体不变性：

$$\mathscr{E}(j_1,j_2)=\sum_{\oplus}\mathscr{E}(k,j) \tag{16}$$

归结起来，我们要解决的是两方面的问题：

(1) 假设已知 j_1 和 j_2，问公式(16)中的 J 的值如何？与每一个值相联系的不同的子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 有多少个？

(2) 怎样将 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的属于子空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 的本征矢在基 $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ 中展开？

2 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值

2.1 两个自旋 1/2 的耦合的特例

2.1.1 态空间

我们将一个正交归一基，即 $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$，具体的写出来，这就是：

$$\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\} = \{|+,+\rangle, |+,-\rangle, |-,+\rangle, |-,-\rangle\} \tag{17}$$

这些矢量是观察算符 $\boldsymbol{S}_1^2, S_{1z}, \boldsymbol{S}_2^2, S_{2z}$ 的本征矢：

$$\boldsymbol{S}_1^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \boldsymbol{S}_2^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle \tag{18a}$$

$$S_{1z}|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_1\frac{\hbar}{2}|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle \tag{18b}$$

$$S_{2z}|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_2\frac{\hbar}{2}|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle \tag{18c}$$

$\boldsymbol{S}_1^2, S_{1z}, \boldsymbol{S}_2^2, S_{2z}$ 构成一个 CSCO。

2.1.2 对易关系

我们将体系的总自旋定义为：

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2 \tag{19}$$

由于 $\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$ 可以对易，我们便可以得到算符 $\boldsymbol{S}^2$：

$$\boldsymbol{S}^2 = (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 = \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 \tag{20}$$

标量积 $\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$ 可以通过算符 $S_{1\pm}, S_{1z}$ 和 $S_{2\pm}, S_{2z}$ 来表示，实际上，很容易证明：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 &= S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z} \\ &= \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) + S_{1z}S_{2z}\end{aligned} \tag{21}$$

注意，由于 $\boldsymbol{S}_1$ 和 $\boldsymbol{S}_2$ 分别于 $\boldsymbol{S}_1^2$ 及 $\boldsymbol{S}_2^2$ 对易，故 $\boldsymbol{S}$ 的三个分量也具有

这样的性质；特别的，$\boldsymbol{S}^2$ 和 S_z 可以与 $\boldsymbol{S}_1^2$ 及 $\boldsymbol{S}_2^2$ 对易：

$$[S_z, \boldsymbol{S}_1^2] = [S_z, \boldsymbol{S}_2^2] = 0 \tag{22a}$$

$$[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{S}_1^2] = [\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{S}_2^2] = 0 \tag{22b}$$

此外，S_z 显然与 S_{1z} 及 S_{2z} 对易：

$$[S_z, S_{1z}] = [S_z, S_{2z}] = 0 \tag{23}$$

但是，$\boldsymbol{S}^2$ 既不能与 S_{1z} 也不能与 S_{2z} 对易：

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{S}^2, S_{1z}] &= [\boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2, S_{1z}] \\
&= 2[\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2, S_{1z}] \\
&= 2[S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}, S_{1z}] \\
&= 2\mathrm{i}\hbar(-S_{1y}S_{2x} + S_{1x}S_{2y})
\end{aligned} \tag{24}$$

当然，$\boldsymbol{S}^2$ 和 S_{2z} 的对易子正好和上式反号，所以，$S_z = S_{1z} + S_{2z}$ 和 $\boldsymbol{S}^2$ 对易。

2.1.3 有待进行的基的变换

我们已经看过，(17)式中的基是由下列 CSCO：

$$\{\boldsymbol{S}_1^2, \boldsymbol{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}\} \tag{25}$$

的共同本征矢构成的。此外，我们刚才证明过下列四个观察算符：

$$\boldsymbol{S}_1^2, \boldsymbol{S}_2^2, \boldsymbol{S}^2, S_z \tag{26}$$

互相对易，他们也构成一个 CSCO。

要将两个自旋 $\boldsymbol{S}_1$ 和 $\boldsymbol{S}_2$ 相加，就是要构成算符集合(26)的共同本征矢的一个正交归一集合。因 $\boldsymbol{S}^2$ 不能和 S_{1z} 及 S_{2z} 对易，故这个集合将不同于(17)中的集合。我们将这个新的基矢量记作 $|S, M\rangle$，而 $\boldsymbol{S}_1^2$ 和 $\boldsymbol{S}_2^2$ 的本征

值的符号略去不写。于是，矢量 $|S,M\rangle$ 满足下列方程：

$$\boldsymbol{S}_1^2|S,M\rangle = \boldsymbol{S}_2^2|S,M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S,M\rangle \tag{27a}$$

$$\boldsymbol{S}^2|S,M\rangle = S(S+1)\hbar^2|S,M\rangle \tag{27b}$$

$$S_z|S,M\rangle = M\hbar|S,M\rangle \tag{27c}$$

由于 $\boldsymbol{S}$ 是一个角动量，因此，S 只能是正的整数或半整数，而 M 的值则在 $-S$ 与 $+S$ 之间变化，每次改变一个单位。

2.1.4 S_z 的本征值及其简并度

对于 $\boldsymbol{S}_1^2$ 与 $\boldsymbol{S}_2^2$ 这两个算符，态空间的所有矢量都是他们的本征矢，而且属于同一本征值 $3\hbar^2/4$，所以，无论 $|S,M\rangle$ 为任何右矢，(27a)都会自动满足。

由于 S_z 可以和 CSCO 中四个观察算符对易，因此，我们可以预料，基 $\{|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle\}$ 中的矢量本来就是 S_z 的本征矢。我们可以用(18b)(18c)实际检验一下：

$$S_z|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle = (S_{1z}+S_{2z})|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{2}(\varepsilon_1+\varepsilon_2)|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle \tag{28}$$

由此可见，$|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle$ 是 S_z 的本征矢，属于本征值：

$$M = \frac{1}{2}(\varepsilon_1+\varepsilon_2) \tag{29}$$

由于 ε_1 和 ε_2 中的每一个都可以等于 ±1,从而推知 M 可取的值为 $+1,0,-1$。

$M=1$ 和 $M=-1$ 这两个值是非简并的，因为对应于前者的本征矢只有 $|+,+\rangle$，对应于后者的只有 $|-,-\rangle$。反之，$M=0$ 是二重简并的，因为有两个正交的本征矢 $|+,-\rangle$ 和 $|-,+\rangle$ 与之相联系；这两个矢量的一切线性组合都是 S_z 的本征矢，属于本征值 0。

从基 $\{|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle\}$ 中表示 S_z 的矩阵来看，这个结果是很明显的；如果我们按(17)中的顺序来安排基矢量，那么这个矩阵可以写作：

$$(S_z) = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{30}$$

现在，剩下的任务仅仅是计算在基 $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ 中表示 $\boldsymbol{S}^2$ 的矩阵，再将他对角化。事先，我们就知道这个矩阵并不是对角化的，因为 $\boldsymbol{S}^2$ 不能与 S_{1z} 及 S_{2z} 对易。

2.1.5 表示 $\boldsymbol{S}^2$ 矩阵的计算

我们把算符 $\boldsymbol{S}^2$ 作用于每一个基矢量，为此：

$$\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \tag{31}$$

四个矢量 $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$ 都是 $\boldsymbol{S}_1^2, \boldsymbol{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ 的本征矢，而算符 $S_{1\pm}$ 和 $S_{2\pm}$ 的作用也可以用角动量升降算符导出，这样，我们得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2|+,+\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right)|+,+\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2|+,+\rangle \\ &= 2\hbar^2|+,+\rangle\end{aligned} \tag{32a}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2|+,-\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right)|+,-\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2|+,-\rangle + \hbar^2|-,+\rangle \\ &= \hbar^2[|+,-\rangle + |-,+\rangle]\end{aligned} \tag{32b}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2|-,+\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right)|-,+\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2|-,+\rangle + \hbar^2|+,-\rangle \\ &= \hbar^2[|-,+\rangle + |+,-\rangle]\end{aligned} \tag{32c}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2|-,-\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right)|-,-\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2|-,-\rangle \\ &= 2\hbar^2|-,-\rangle\end{aligned} \tag{32d}$$

于是，在四个矢量 $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$ 组成的基中，表示 $\boldsymbol{S}^2$ 的矩阵可以写成：

$$(\boldsymbol{S}^2) = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{33}$$

2.1.6 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征值和本征矢

矩阵(33)可以分为三个子矩阵，其中的两个是一阶的，这就是说，$|+,+\rangle$ 和 $|-,-\rangle$ 都是 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征矢，他们对应的两个本征值都等于 $2\hbar^2$。

现在还要将子矩阵：

$$(\boldsymbol{S}^2)_0 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{34}$$

对角化。这个子矩阵在 $|+,-\rangle$ 和 $|-,+\rangle$ 所张成的二维子空间 (即 S_z 的对应于 $M=0$ 的本征子空间) 内部表示 $\boldsymbol{S}^2$。矩阵(34)的本征值 $\lambda\hbar^2$ 可以得自下列特征方程：

$$(1-\lambda)^2 - 1 = 0 \tag{35}$$

的解。此方程的跟 $\lambda = 0$ 和 $\lambda = 2$，他们给出了 $\boldsymbol{S}^2$ 的另外两个本征值：$0, 2\hbar^2$，以及他们的本征值：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|+,-\rangle + |-,+\rangle] \quad \text{对应于本征值 } 2\hbar^2 \tag{36a}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|+,-\rangle - |-,+\rangle] \quad \text{对应于本征值 } 0 \tag{36b}$$

可见算符 $\boldsymbol{S}^2$ 有两个不同的本征值:$0, 2\hbar^2$。第一个是非简并的，和他对应的矢量是(36b)；第二个本征值是三重简并的，在与他相联系的本征子空间中，矢量 $|+,-\rangle, |-,-\rangle$，和(36a)构成一个正交归一基。

于是，四维空间 $\mathscr{E}(1/2, 1/2)$ 分解为与 $S=1$ 相联系的一个子空间 (三维的) 以及与 $S=0$ 相联系的一个子空间 (一维的)。

2.2 J_z 的本征值及其简并度

我们将在 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维的一个确定的子空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 的内部来分析问题。下面假设 j_1 和 j_2 的相对大小符合不等式：

$$j_1 \geqslant j_2 \tag{37}$$

诸矢量 $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ 本来就是 J_z 的本征矢：

$$\begin{aligned} J_z|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle &= (J_{1z}+J_{2z})|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle \\ &= (m_1+m_2)\hbar|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle \end{aligned} \tag{38}$$

对应的本征值 $M\hbar$ 应该取这样的值，使得

$$M = m_1 + m_2 \tag{39}$$

因而，M 应取下列的数值：

$$j_1+j_2, j_1+j_2-1, j_1+j_2-2, \cdots, -(j_1+j_2) \tag{40}$$

为了求得这些数值的简并度 $g_{j_1,j_2}(M)$，我们可以采用下述的几何方法。对于每一个矢量 $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$，我们用平面上的一个点来和他对应，点的横坐标为 m_1，纵坐标为 m_2。所有这些都落在一个矩形的内部或其边缘上，这个矩阵的顶点的坐标是：$(j_1,j_2),(j_1,-j_2),(-j_1,-j_2)$ 和 $(-j_1,j_2)$。例如，取 $j_1=2, j_2=1$；那么，对应于基矢量的 15 个点的位置如图 1。对应于 $M=m_1+m_2$ 的同一个值的诸点都在平行于第二角平分线的同一条直线上；因而，这些点的个数就是那个 M 值的简并度 $g_{j_1,j_2}(M)$。

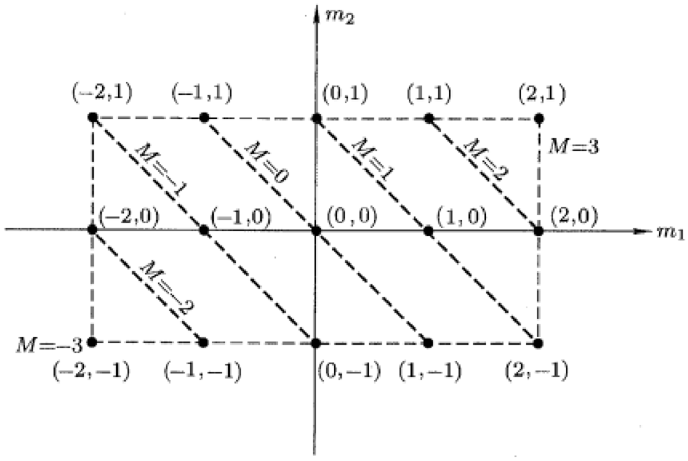

图 1: 对于右矢 $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ 而言，(m_1, m_2) 的可能值组

下面再来考察 M 的各个值，并做出每个值确定的平行于第二角平分线的诸直线；$M = j_1 + j_2$ 是简并的，因为他所确定的直线仅仅通过矩阵的右上顶角 (j_1, j_2)，即：

$$g_{j_1,j_2}(j_1 + j_2) = 1 \tag{41}$$

$M = j_1 + j_2 - 1$ 是二重简并的，因为对应的直线通过点 $(j_1, j_2 - 1)$ 和点 $(j_1 - 1, j_2)$，即：

$$g_{j_1,j_2}(j + 1 + j_2 - 1) = 2 \tag{42}$$

像这样，M 的值每减小一个单位，简并度就增加一个单位，这个过程一直进行到矩阵的右下顶点 $(m_1 = j_1, m_2 = -j_2)$ 即直到 $M = j_1 - j_2$；于是这条直线上的点的个数达到极大值，即：

$$g_{j_1,j_2}(j + 1 - j_2) = 2j_2 + 1 \tag{43}$$

如果 M 的值捡到小于 $j_1 - j_2$，则 $g_{j_1,j_2}(M)$ 首先保持其极大值不变，一直保持到与 M 对应的直线以矩阵的整个宽度与之相割，即一直保持到该直线通过矩形的左上顶点 $(m_1 = -j_1, m_2 = j_2)$；这时：

$$g_{j_1,j_2}(M) = 2j_2 + 1, \quad for \ -(j_1 - j_2) \leqslant M \leqslant j_1 - j_2 \tag{44}$$

最后，若 M 的值小于 $-(j_1-j_2)$，则对应的直线不能再与矩阵的水平上边相交，于是，M 的值减小一个单位，$g_{j_1,j_2}(M)$ 的值也减小一个单位，以致 $M=-(j_1+j_2)$ 时，简并度重新回到了 1；因而

$$g_{j_1,j_2}(-M)=g_{j_1,j_2}(M) \tag{45}$$

对于 $j_1=2, j_2=1$ 的情况，全部归结于图 2，此图描绘了 $g_{2,1}(M)$ 随 M 变化的情况。

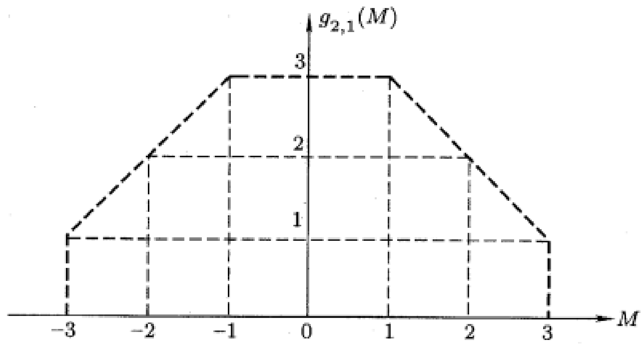

图 2: $g_{2,1}(M)$ 随 M 变化的情况

2.3 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值

首先我们注意列举 M 的值的(40)，如果 j_1 和 j_2 都是整数或都是半整数，则 M 的值都是整数；如果 j_1 和 j_2 中，一个是整数，一个是半整数，则 M 的值都是半整数。因而 J 的对应数值，在前一种情况下也将都是整数，而在后一种情况下，也将都是半整数。

由于 M 所达到的极大值为 j_1+j_2，故 J 的每一个大于 j_1+j_2 的值在空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中都不能实现，于是也不会出现在直和(16)中。与 $J=j_1+j_2$ 联系着一个不变子空间 (因为 $M=j_1+j_2$ 这个值存在)，而且只联系着这样一个 (因为 $M=j_1+j_2$ 是非简并的)。在这个子空间 $\mathscr{E}(J=j_1+j_2)$ 中，有一个而且只有一个矢量，他所对应的 $M=j_1+j_2-1$ 但 M 的这个值在空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中是二重简并的；于是 $J=j_1+j_2-1$ 也是可以实现的，而且与他对应着一个唯一的不变子空间 $\mathscr{E}(J=j_1+j_2-1)$。

更普遍一点，我们用 $p_{j_1,j_2}(J)$ 表示空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中与 J 的一个给定值相联系的子空间 $\mathscr{E}(k,J)$ 的数目；也就是对于 J 的这个值，k 的互异值的个

数；这个 $p_{j_1,j_2}(J)$ 与 $g_{j_1,j_2}(M)$ 之间有一个简单的关系。实际上，我们来考虑 M 的一个特殊值；在符合 $J \geqslant |M|$ 的每一个子空间 $\mathscr{E}(k,J)$ 中，都有一个而且只有一个矢量与 M 的那个值对应，于是那个值在空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中的简并度 $g_{j_1,j_2}(M)$ 可以写作：

$$\begin{aligned} g_{j_1,j_2}(M) = & p_{j_1,j_2}(J=|M|) + p_{j_1,j_2}(J=|M|+1) \\ & p_{j_1,j_2}(J=|M|+2) + \cdots \end{aligned} \tag{46}$$

由此式，可以反过来用 $g_{j_1,j_2}(M)$ 来表示 $p_{j_1,j_2}(J)$：

$$\begin{aligned} p_{j_1,j_2}(J) &= g_{j_1,j_2}(M=J) - g_{j_1,j_2}(M=J-1) \\ &= g_{j_1,j_2}(M=-J) - g_{j_1,j_2}(M=-J-1) \end{aligned} \tag{47}$$

于是，上一节的结果可以用来直接确定合空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中量子数 J 实际可取的那些值以及与他们相联系的不变子空间 $\mathscr{E}(k,J)$ 的数目。首先，我们显然有：

$$p_{j_1,j_2}(J) = 0, \quad for\ J > j_1 + j_2 \tag{48}$$

这是因为对于 $|M| > j_1 + j_2, g_{j_1,j_2}(M)$ 为零。此外，根据(41)(42)，有：

$$p_{j_1,j_2}(J=j_1+j_2) = g_{j_1,j_2}(M=j_1+j_2) = 1 \tag{49a}$$

$$p_{j_1,j_2}(J=j_1+j_2-1) = g_{j_1,j_2}(M=j_1+j_2-1) - g_{j_1,j_2}(M=j_1+j_2) = 1 \tag{49b}$$

这样，我们可以逐个地求得 $p_{j_1,j_2}(J)$ 的全体数值

$$p_{j_1,j_2}(J=j_1+j_2-2) = 1, \cdots, \tag{50a}$$

$$\cdots, p_{j_1,j_2}(J=j_1-j_2) = 1 \tag{50b}$$

最后，根据(44)，有：

$$p_{j_1,j_2}(J) = 0, \quad for\ J < j_1 - j_2 \tag{51}$$

对于 j_1 和 j_2 的固定值，$\boldsymbol{J}^2$ 的本征值中的 J 应为：

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \cdots, |j_1 - j_2| \tag{52}$$

与每一个这样的值联系着唯一的一个不变子空间 $\mathscr{E}(J)$，于是，(16)中的指标 k 实际上没有用了。特别地，由此推知，如果在(52)的集合中，取定 J 的一个值，随之取定与他相容的一个 M 的值，那么，在空间 $\mathscr{E}(j_1, j_2)$ 中，与他们对应的矢量只有一个；实际上，J 的数值就足以确定子空间 $\mathscr{E}(J)$，在这个子空间中，M 的数值就确定了一个唯一的矢量。换句话说，$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 构成 $\mathscr{E}(j_1, j_2)$ 空间中的一个 CSCO。

我们可以证明，在空间 $\mathscr{E}(j_1, j_2)$ 中可以实现的 (J, M) 值的组数正好等于该空间维数 $(2j_1+1)(2j_2+1)$。实际上，这个数等于：

$$\sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2}(2J+1) \tag{53}$$

如果令

$$J = j_1 - j_2 + i \tag{54}$$

那么，我们可以算出

$$\begin{aligned}\sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2}(2J+1) &= \sum_{i=0}^{2j_2}[2(j_1-j_2+i)+1] \\ &= [2(j_1-j_2)+1](2j_2+1) + 2\frac{2j_2(2j_2+1)}{2} \\ &= (2j_2+1)(2j_1+1)\end{aligned} \tag{55}$$

3 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的共同本征矢

我们将 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的属于空间 $\mathscr{E}(j_1, j_2)$ 的共同本征矢记作 $|J, M\rangle$。严格的说，本来应该在这个记号中注明 j_1 和 j_2 的值，但我们没有注明，因为他们的值和矢量(15b)中的相同，而 $|J, M\rangle$ 不过是那些矢量的线性组合。当然，指标 J 和 M 的值与 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值相联系：

$$\boldsymbol{J}^2|J, M\rangle = J(J+1)\hbar^2|J, M\rangle \tag{56a}$$

$$J_z|J, M\rangle = M\hbar|J, M\rangle \tag{56b}$$

而矢量 $|J, M\rangle$，正如空间 $\mathscr{E}(j_1, j_2)$ 中所有的这些矢量一样，都是 $\boldsymbol{J}_1^2$ 和 $\boldsymbol{J}_2^2$ 的本征矢，分别属于本征值 $j_1(j_1+1)\hbar^2$ 和 $j_2(j_2+1)\hbar^2$。

3.1 两个自旋 1/2 的特例

3.1.1 子空间 $\mathscr{E}(S=1)$

在态空间 $\mathscr{E}=\mathscr{E}(1/2,1/2)$ 中，右矢 $|+,+\rangle$ 是 S_z 的对应于 $M=1$ 的唯一的一个本征矢。由于 $\boldsymbol{S}^2$ 和 S_z 对易，而且 $M=1$ 这个值是非简并的，故右矢 $|+,+\rangle$ 一定也是 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征矢。根据之前的分析，S 的值只能等于 1；因此，我们可以如此选择矢量 $|S=1,M=1\rangle$ 的相位，使得：

$$|1,1\rangle=|+,+\rangle \tag{57}$$

然后，三重态中的其他态就好求了。实际上，根据角动量理论的普遍理论，我们知道：

$$\begin{aligned}S_-|1,1\rangle&=\hbar\sqrt{1(1+1)-1(1-1)}|1,0\rangle\\&=\hbar\sqrt{2}|1,0\rangle\end{aligned} \tag{58}$$

因此

$$|1,0\rangle=\frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-|+,+\rangle \tag{59}$$

于是，可以求得

$$\begin{aligned}|1,0\rangle&=\frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_{1-}+S_{2-})|+,+\rangle\\&=\frac{1}{\hbar\sqrt{2}}[\hbar|-,+\rangle+\hbar|+,-\rangle]\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}[|-,+\rangle+|+,-\rangle]\end{aligned} \tag{60}$$

最后，我们可以再将算符 S_- 应用于 $|1,0\rangle$，也就是将算符 $(S_{1-}+S_{2-})$ 应

用于(60)。这样便得到

$$\begin{aligned}|1,-1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-|1,0\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_{1-}+S_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}[|-,+\rangle+|+,-\rangle] \\ &= \frac{1}{2\hbar}[\hbar|-,-\rangle+\hbar|-,-\rangle] \\ &= |-,-\rangle \end{aligned} \tag{61}$$

当然，仿照上面对右矢 $|+,+\rangle$ 所作的推理，本来也可以直接得到最后这个结果。但是，上面这个算法有一点方便之处：这个方法可以确定由于在(57)中已经给右矢 $|+,+\rangle$ 选定了相位而可能出现在右矢 $|1,0\rangle$ 和 $|1,-1\rangle$ 中的那些相位因子。

3.1.2 态 $|S=0,M=0\rangle$

子空间 $\mathscr{E}(S=0)$ 中独一无二的矢量 $|S=0,M=0\rangle$ 必须与刚才求得的三个矢量 $|1,M\rangle$ 正交，根据这个简单的条件就可以确定这个矢量。

实际上，矢量 $|0,0\rangle$ 既然正交于 $|1,1\rangle=|+,+\rangle$ 和 $|1,-1\rangle=|-,-\rangle$，那么，他只可能是 $|+,-\rangle$ 和 $|-,+\rangle$ 的线性组合：

$$|0,0\rangle=\alpha|+,-\rangle+\beta|-,+\rangle \tag{62}$$

为将他归一化，须使

$$\langle 0,0|0,0\rangle=|\alpha|^2+|\beta|^2=1 \tag{63}$$

他与右矢 $|1,0\rangle$ 的标量积等于零，即应有：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta)=0 \tag{64}$$

因此，系数 α 和 β 的符号相反，这个条件，并结合(63)，便可确定 (除相位因子外)：

$$\alpha=-\beta=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\chi} \tag{65}$$

式中的 χ 为任意实数，我们不妨选择 $\chi = 0$，这样便得到：

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+,-\rangle - |-,+\rangle] \tag{66}$$

至此，我们已经求得四个矢量 $|S,M\rangle$，而并不需要在基 $\{|\varepsilon_1,\varepsilon_2\}$ 中表示 $\boldsymbol{S}^2$ 的矩阵的显式。

3.2 j_1 和 j_2 是任意的一般情况

我们已经证明过，$\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 作为不变子空间 $\mathscr{E}(J)$ 的直和的分解式为：

$$\mathscr{E}(j_1,j_2) = \mathscr{E}(j_1+j_2) \oplus \mathscr{E}(j_1+j_2-1) \oplus \cdots \oplus \mathscr{E}(|j_1-j_2|) \tag{67}$$

下面我们将说明怎样确定张成这些子空间的诸矢量 $|J,M\rangle$。

3.2.1 子空间 $\mathscr{E}(J = j_1 + j_2)$

在空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中，右矢 $|j_1,j_2;m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle$ 是 J_z 的对应于 $M = j_1 + j_2$ 的唯一的一个本征矢。由于 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 对易，而且 $M = j_1 + j_2$ 这个值是非简并的，故矢量矢 $|j_1,j_2;m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle$ 一定也是 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征矢。根据(59)，J 的对应值只可能是 $j_1 + j_2$。我们可以如此选择矢量：

$$|J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle \tag{68}$$

的相位，使得：

$$|j_1+j_2, j_1+j_2\rangle = |j_1,j_2;j_1,j_2\rangle \tag{69}$$

根据这个公式，重复应用算符 J_-，就可以求得符合 $J = j_1 + j_2$ 的全体矢量 $|J,M\rangle$。于是，根据角动量的普遍公式，有：

$$J_-|j_1+j_2, j_1+j_2\rangle = \hbar\sqrt{2(j_1+j_2)}|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle \tag{70}$$

现将算符 $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ 应用于 $|j_1,j_2;j_1,j_2\rangle$，我们便可以求得对应于

$J=j_1+j_2$ 和 $M=j_1+j_2-1$ 的矢量：

$$\begin{aligned}|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1+j_2)}}J_-|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1+j_2)}}(J_{1-}+J_{2-})|j_1,j_2;j_1,j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2(j_1+j_2)}}[\hbar\sqrt{2j_1}|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle] \\ &\quad +\hbar\sqrt{2j_2}|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle]\end{aligned} \tag{71}$$

也就是说

$$\begin{aligned}|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle =& \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle \\ &+\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle\end{aligned} \tag{72}$$

注意，按这种方式，我们求得了对应于 $M=j_1+j_2-1$ 的两个基矢量的线性组合，而且这种组合本身已经是归一化的。

然后，我们重复下面的步骤：将算符 J_- 作用于(72)两端 (在右端，将此算符写作 $J_{1-}+J_{2-}$ 的形式)，以构成矢量 $|j_1+j_2,j_1+j_2-2\rangle$，像这个逐步进行下去，直到矢量 $|j_1+j_2,-(j_1+j_2)\rangle$，我们将会看到他等于矢量 $|j_1,j_2;-j_1,-j_2\rangle$。

这样一来，我们便能算出基 $\{|J,M\rangle\}$ 中的前 $[2(j_1+j_2)+1]$ 个矢量，他们对应于 $J=j_1+j_2$ 和 $M=j_1+j_2,j_1+j_2-1,\cdots,-(j_1+j_2)$，并张成空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中的子空间 $\mathscr{E}(J=j_1+j_2)$。

3.2.2 其他子空间 $\mathscr{E}(J)$

现在我们来考虑在空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中和 $\mathscr{E}(j_1+j_2)$ 互补的空间 $\mathscr{J}(j_1+j_2)$。根据(67)，空间 $\mathscr{J}(j_1+j_2)$ 分解为：

$$\mathscr{J}(j_1,j_2)=\mathscr{E}(j_1+j_2-1)\oplus\mathscr{E}(j_1+j_2-2)\oplus\cdots\oplus\mathscr{E}(|j_1-j_2|) \tag{73}$$

在空间 $\mathscr{J}(j_1+j_2)$ 中，M 的一个给定值的简并度 $g'_{j_1,j_2}(M)$ 比 $g_{j_1,j_2}(M)$

小 1，这是因为空间 $\mathscr{E}(j_1+j_2)$ 仅仅包含与 M 的这个值相联系的一个矢量：

$$g'_{j_1,j_2}(M) = g_{j_1,j_2}(M) - 1 \tag{74}$$

这一点特别表明，$M = j_1 + j_2$ 这个值在空间 $\mathscr{J}(j_1+j_2)$ 中不复存在，而且新的极大值 $M = j_1 + j_2 - 1$ 是非简并的。如同前一节所述，由此可以推知，对应的矢量一定正比于 $|J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1\rangle$。我们不难求得那个矢量在基 $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ 中的展开式；实际上，由于 M 的值，展开式一定具有下列形式：

$$\begin{aligned}|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle =& \alpha|j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle \\ &+ \beta|j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle\end{aligned} \tag{75}$$

其中的系数须满足

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{76}$$

以保证矢量的归一化。此外，他还应该正交于空间 $\mathscr{E}(j_1+j_2)$ 中的矢量 $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$，后者的表示已由(72)给出，因此，系数 α 和 β 应该满足：

$$\alpha\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} + \beta\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} = 0 \tag{77}$$

(76)和(77)便确定了 (除相位因子以外)α 和 β；我们将 α 和 β 选做实数，并且选 α 为正的；按照这些规定，便得到

$$\begin{aligned}|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle =& \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle \\ &- \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle\end{aligned} \tag{78}$$

这个矢量以 $J = j_1 + j_2 - 1$ 为标志的一族新矢量的第一个。将算符 J_- 作用所需的那么多次，便可由这个矢量得到其他矢量。如此，我们可以得到 $[2(j_1 + j_2 - 1) + 1]$ 个矢量 $|J, M\rangle$，他们对应于：

$$J = j_1 + j_2 \; and \; M = j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \cdots, -(j_1 + j_2 - 1) \tag{79}$$

并且张成子空间 $\mathscr{E}(J=j_1+j_2-1)$。

然后，我们来考虑空间 $\mathscr{J}(j_1+j_2,j_1+j_2-1)$，他是 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 空间中的直和 $\mathscr{E}(j_1,j_2)\oplus\mathscr{E}(j_1,j_2-1)$ 的补空间：

$$\mathscr{J}(j_1+j_2,j_1+j_2-1)=\mathscr{E}(j_1,j_2-2)\oplus\cdots\oplus\mathscr{E}(|j_1-j_2|) \tag{80}$$

在空间 $\mathscr{J}(j_1+j_2,j_1+j_2-1)$ 中，M 的每一个值的简并度和空间 $\mathscr{J}(j_1+j_2)$ 中的相比，仍然小于 1。特别的，现在的极大值为 $M=j_1+j_2-2$ 而且这个非简并的；因此，属于空间 $\mathscr{J}(j_1+j_2,j_1+j_2-1)$ 的对应矢量一定是 $|J=j_1+j_2-2,M=j_1+j_2-2\rangle$ 为了在基 $\{|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\}$ 中求出这个矢量，我们只需注意，他是三个矢量 $|j_1,j_2;j_1,j_2-2\rangle,|j_1,j_2;j_1-1,j_2-1\rangle,|j_1,j_2;j_1-2,j_2\rangle$ 的线性组合；组合系数决定于三个条件，即此组合是归一化的并正交于 $|j_1+j_2,j_1+j_2-2\rangle$ 和 $|j_1+j_2-1,j_1+j_2-2\rangle$。然后，应用算符 J_-，便可以求得张成空间 $\mathscr{E}(j_1+j_2-2)$ 的第三组矢量中的其他矢量。

这个过程很容易继续进行下去，直到针对 M 的大于或等于 $|j_1-j_2|$ 的一切数值都已计算完毕。这样一来，我们就知道了带求的全体矢量 $|J,M\rangle$。

3.3 克莱布希-高登系数

在每一个空间 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 中，$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征矢都是原来的基 $\{|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\}$ 中的矢量的线性组合：

$$|J,M\rangle=\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M\rangle \tag{81}$$

这个展开式中的系数 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M\rangle$ 就叫克莱布希-高登系数。

实际上，为了唯一的确定克莱布希-高登系数，我们必须提出几条关于相位的约定：我们总是将克莱布希-高登系数取作实数，只是其中的某些系数的符号还有待选择。

根据之前所述，系数 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M\rangle$，只有在：

$$M=m_1+m_2 \tag{82a}$$

$$|j_1-j_2|\leqslant J\leqslant j_1+j_2 \tag{82b}$$

时才不等于零；这里的 J 和 j_1+j_2 以及 $|j_1-j_2|$ 属于同一类型 (整数或半

整数)。条件(82b)通常叫做“三角形法则”：长度等于 j_1, j_2 和 J 的三个线段，应该构成一个三角形。

诸矢量 $|J,M\rangle$ 同样也构成 $\mathscr{E}(j_1,j_2)$ 空间中的一个正交归一基，与(81)相反的公式可以写作：

$$|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^{J} |J,M\rangle\langle J,M|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle \tag{83}$$

因此，这些数仍是克莱布希-高登系数，通过他们可以将原基 $\{|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\}$ 中的矢量表示为新基 $\{|J,M\rangle\}$ 中的矢量的线性组合。克莱布希-高登系数具有一些很有意思的性质，我们新开一章仔细介绍。

4 克莱布希-高登系数

4.1 克莱布希-高登系数的一般性质

4.1.1 选择定则

如果下列两个条件：

$$M = m_1 + m_2 \tag{84a}$$

$$|j_1 - j_2| \leqslant J \leqslant j_1 + j_2 \tag{84b}$$

不能同时满足，那么，克莱布希-高登系数 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M\rangle$ 一定等于零。从而，j_1, j_2 和 J 这三个数具有对称性，故(84b)也可以写成下列形式：

$$|J - j_1| \leqslant j_2 \leqslant J + j_1 \tag{85}$$

或

$$|J - j_2| \leqslant j_1 \leqslant J + j_2 \tag{86}$$

此外，从角动量的一般性质可以推知，只当 M 取下列数值：

$$M = J, J-1, J-2, \cdots, -J \tag{87}$$

之一时，右矢 $|J,M\rangle$，因而系数 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M\rangle$，才会存在。同时，还

必须有下列关系：

$$m_1 = j_1, j_1 - 1, \cdots, -j_1 \tag{88a}$$

$$m_2 = j_2, j_2 - 1, \cdots, -j_2 \tag{88b}$$

如果不是这样，诸克莱布希-高登系数都将是不确定的。但是以后为方便起见，我们可以这样考虑：不论 m_1, m_2 和 M 的值如何，这些系数都存在，但是(88)中的条件至少有一个不能满足，这些系数就等于零；于是，最后这些条件就表现为克莱布希-高登系数的新的选择定则。

4.1.2 正交关系式

将封闭性关系：

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\langle j_1, j_2; m_1, m_2| = 1 \tag{89}$$

插入诸右矢 $|J, M\rangle$ 的正交关系式：

$$\langle J, M|J', M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{90}$$

我们就得到：

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle J, M|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\langle j_1, j_2; m_1, m_2|J', M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{91}$$

我们将会看到，克莱布希-高登系数都是实数，因此，这个式子可以写成下列形式：

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2|J, M\rangle\langle j_1, j_2; m_1, m_2|J', M'\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{92}$$

这样，我们就得到了诸克莱布希-高登系数之间的第一个“正交关系式”。此外，我们可以看到，上式的求和运算实际上只涉及一个指标；这是因为，若要使左端的诸系数不等于零，那么，m_1 和 m_2 就必由(84a)联系起来。

同样的，将封闭性关系：

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M=-J}^{J}|J,M\rangle\langle J,M|=1 \tag{93}$$

插入诸右矢 $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ 之间的正交关系式，便有：

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M=-J}^{J}\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M\rangle\langle J,M|j_1,j_2;m_1',m_2'\rangle=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'} \tag{94}$$

考虑到实数性，这就是

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{M=-J}^{J}\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M\rangle\langle j_1,j_2;m_1',m_2'|J,M\rangle=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'} \tag{95}$$

这里的求和运算仍然只涉及一个指标，这是因为必须有 $M=m_1+m_2$，于是对 M 求和简化为单独的一项。

4.1.3 递推关系式

在这里，我们要用一个事实，即诸右矢 $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ 构成一个标准基，由此推知：

$$J_{1\pm}|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle=\hbar\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\pm1)}|j_1,j_2;m_1\pm1,m_2\rangle \tag{96a}$$

$$J_{2\pm}|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle=\hbar\sqrt{j_2(j_2+1)-m_1(m_2\pm2)}|j_1,j_2;m_1,m_2\pm1\rangle \tag{96b}$$

同样的，诸右矢 $|J,M\rangle$，按其结构，应满足

$$J_\pm|J,M\rangle=\hbar\sqrt{J(J+1)-M(M\pm1)}|J,M\pm1\rangle \tag{97}$$

现将算符 J_- 作用于(81)，由于 $J_-=J_{1-}+J_{2-}$，我们可以得到 (如果

$M > -J$)

$$\begin{aligned}
&\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}|J,M-1\rangle \\
&= \sum_{m_1'=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2'=-j_2}^{j_2} \langle j_1,j_2;m_1',m_2'|J,M\rangle \\
&\quad \times [\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1'(m_1'-1)}|j_1,j_2;m_1'-1,m_2'\rangle \\
&\quad + \sqrt{j_2(j_1+2)-m_2'(m_2'-1)}|j_1,j_2;m_1',m_2'-1\rangle] \qquad (98)
\end{aligned}$$

用左矢 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|$ 乘此式，则得：

$$\begin{aligned}
&\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}|J,M-1\rangle\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M-1\rangle \\
&= \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)}\langle j_1,j_2;m_1+1,m_2|J,M\rangle \\
&\quad + \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)}\langle j_1,j_2;m_1,m_2+1|J,M\rangle \qquad (99)
\end{aligned}$$

如果 M 的值等于 $-J$，便有 $J_-|J,-J\rangle = 0$；如果我们利用前面的惯例，则(99)仍然成立。这是因为，如果 $|M| > J$，则 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M\rangle$ 等于零。

与上面相似，若将算符 $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$ 作用于(81)，便得到：

$$\begin{aligned}
&\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,M+1\rangle \\
&= \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\langle j_1,j_2;m_1-1,m_2|J,M\rangle \\
&\quad + \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\langle j_1,j_2;m_1,m_2-1|J,M\rangle \qquad (100)
\end{aligned}$$

(若 $M = J$，此式的左端为零)；(99)(100)就是克莱布希-高登系数之间的递推关系式。

4.2 关于相位的惯例

正如我们在上面所看到的，(98)确定了与 J 的同一个值相联系的诸右矢 $|J,M\rangle$ 的相对相位；为了确定(81)中的克莱布希-高登系数，我们只须选定诸右矢 $|J,J\rangle$ 的相位。为此目的，我们先研究系数 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,J\rangle$ 的几个性质。

4.2.1 实数性

在(100)中，令 $M=-J$，则有：

$$\langle j_1,j_2;m_1-1,m_2|J,J\rangle=-\sqrt{\frac{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}}\langle j_1,j_2;m_1,m_2-1|J,J\rangle \tag{101}$$

只要此式中的克莱布希-高登系数满足定则，则右端的根式将永远不为零，也不为无穷大。因此，(101)表明，如果系数 $\langle j_1,j_2;j_1,J-j_1|J,J\rangle$ 等于零，则系数 $\langle j_1,j_2;j_1-1,J-j_1-1|J,J\rangle$ 也等于零；逐步类推，所有系数 $\langle j_1,j_1;m_1,J-m_1|J,J\rangle$ 都将如此。但这是不可能的，这是因为已经归一化的右矢 $|J,J\rangle$ 不可能为零。由此可见，所有系数 $\langle j_1,j_1;m_1,J-m_1|J,J\rangle$(其中的 $j_1\geqslant m_1\geqslant J-j_2$) 都不等于零。

特别的，系数 $\langle j_1,j_1;j_1,J-j_1|J,J\rangle$(其中 m_1 取极大值) 不等于零。为了确定右矢 $|J,J\rangle$ 的相位，我们规定此系数满足下列条件：

$$\langle j_1,j_1;j_1,J-j_1|J,J\rangle \quad \text{为正实数} \tag{102}$$

于是从(101)递推下去便知道所有的系数 $\langle j_1,j_1;j_1,J-j_1|J,J\rangle$ 都是实数 [他们的符号是 $(-1)^{j_1-m_1}$]。

我们为右矢 $|J,J\rangle$ 规定的相位惯例对于 $\boldsymbol{J}_1,\boldsymbol{J}_2$ 这两个角动量来说是不对称的。事实上，这个惯例依赖于量子数 j_1 和 j_2 在克莱布希-高登系数中的顺序。我们若将 j_1 和 j_2 交换一下，则右矢 $|J,J\rangle$ 的相位将决定于下列条件：

$$\langle j_1,j_1;j_1,J-j_2|J,J\rangle \quad \text{为正实数} \tag{103}$$

可以指出，由于(102)与(103)确定的右矢 $|J,J\rangle$ 的相位可能是不相同的，所以这两个条件并不等价。

4.2.2 其他的克莱布希-高登系数

利用关系式(99)我们可以将所有的系数 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,J-1\rangle$ 通过 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,J\rangle$ 来表示，然后再表示出系数 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,J-2\rangle,\cdots$。从这个不含任何虚数的关系式，可以推知所有的克莱布希-高登系数都是实数：

$$\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,J\rangle^*=\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J,J\rangle \tag{104}$$

此式又可以写作：

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J\rangle = \langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \tag{105}$$

但是，若 $M \neq J$，则系数 $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J\rangle$ 的符号并无简单的规律可循。