第三章、角动量理论

$ 3.1 三维空间转动群及其表示

3.1.1 转动算符及其表示

我们知道，角动量的三个算符满足对易关系

$$\left[\hat{J}_\alpha,\,\hat{J}_\beta\right]=i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{J}_\gamma,\quad \hat{J}_\alpha=\hat{J}_x,\,\hat{J}_y,\,\hat{J}_z. \tag{1}$$

因此， $\hat{J}^2=\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2+\hat{J}_z^2$ 与 $\hat{J}_z$ 是对易的。而它们的共同本征矢量可被写作 $\{\psi_{jm},\,-j\le m\le j\}$ 。它们满足方程

$$\hat{J}^2\psi_{jm}\equiv\hat{J}^2|jm\rangle=j(j+1)\hbar^2|jm\rangle,\quad \hat{J}_z\psi_{jm}\equiv\hat{J}_z|jm\rangle=m\hbar|jm\rangle. \tag{2}$$

下面，我们常会依照角动量理论中的惯例，将 $\hbar$ 取作单位。

在经典力学中，我们知道，总角动量在一个各向同性的体系中是守恒量。同样的结论在量子力学中也是成立的。此时，一个体系是各向同性的，是指它的哈密顿量算符 $\hat{H}$ 在任何一个三维空间转动操作下都是不变的。由于每一个转动操作可以看成是绕空间某一个固定轴 (方向)$\mathbf{n}$ ，转动一个角度 θ 的结果，我们将它记作 $\hat{\rho}(\mathbf{n},\,\theta)$ 。相对应地，它在体系的 Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中诱导出一个酉正线性变换

$$\hat{Q}=\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta):L^2(\Omega)\to L^2(\Omega). \tag{3}$$

因此，所谓哈密顿量算符 $\hat{H}$ 在三维空间转动操作 $\hat{\rho}(\mathbf{n},\,\theta)$ 下是不变的，应该理解作下式

$$\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)\hat{H}\hat{\mathcal{R}}^{-1}(\mathbf{n},\,\theta)=\hat{H} \tag{4}$$

成立。另外，所有的三维空间的转动操作的全体集合 $SO(3)=\{\hat{\rho}(\mathbf{n},\,\theta)\}$ 实际上是一个连续群。也就是说，任何两个转动操作 $\hat{\rho}(\mathbf{n}_1,\,\theta_1)$ 和 $\hat{\rho}(\mathbf{n}_2,\,\theta_2)$ 的接连操作 (乘积) 仍然是一个转动操作，可以写作 $\hat{\rho}(\mathbf{n}_3,\,\theta_3)$ 。而又由于方向矢量 $\mathbf{n}$ 以及 θ 的取值都可以连续的变化，因此 $SO(3)$ 是一个连续群。同时，这些操作在 Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中诱导出的全体线性变换 $\{\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)\}$ 构成其一个酉正

线性表示。下面，我们将证明，在条件 (4) 被满足的情况下，角动量算符是一个守恒量。

现在，让我们考虑 $SO(3)$ 群的线性表示 $\{\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)\}$ 。我们要证明，在 Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中， $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)$ 可以写作

$$\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta) = \exp\left(-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar\right). \tag{5}$$

也就是说，对于任何空间 $L^2(\Omega)$ 中的波函数 Ψ ，我们有

$$\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)\Psi = \exp\left(-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar\right)\Psi. \tag{6}$$

在此，我们仅对于 $\hat{\mathbf{J}}=\hat{\mathbf{L}}$ 的情况证明上述结论。更为一般的证明需要用到有关李群的知识，就略去了。

首先，我们注意到，由于量子力学的几率解释，转动群的线性表示 $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\theta)$ 必须满足条件

$$\langle\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)\Psi|\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)\Psi\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1. \tag{7}$$

因此，它是一个依赖连续变量 θ 的酉正算符。对于这类算符，我们可以应用所谓的 Stone 定理。它告诉我们， $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)$ 一定可以写成

$$\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta) = \exp(-i\theta\hat{K}/\hbar) \tag{8}$$

的形式。并且 $\hat{K}$ 是一个厄密算符。(有关 Stone 定理的证明，可以参考 K. Yosida 著 "Functional Analysis" (1980 版) 的第 345 页上的证明) 。我们下面所要做的就是证明，当角动量算符仅是轨道角动量算符 $\hat{\mathbf{L}}$ 时，

$$\hat{K} = \frac{\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}. \tag{9}$$

假设，我们将实验室系坐标轴固定不动，而将包括外场在内的整个体系绕 $\mathbf{n}$ 轴旋转一个无穷小的角度 $\delta\theta$ 。这种转动称为主动转动。在这一转动下，体系内一个给定点的坐标将按规律

$$\mathbf{r}' = \hat{\rho}(\mathbf{n},\,\delta\theta)\mathbf{r} \tag{10}$$

改变。对应地，在 Hilbert 空间 $L^2(\Omega)$ 中，我们有

$$\Psi' = \hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\, \delta\theta)\Psi. \tag{11}$$

另一方面，根据主动旋转的定义，我们看到，变换前后的波函数在该点处的值应该保持不变。换句话说，公式

$$\Psi'(\mathbf{r}') = \Psi(\mathbf{r}) \tag{12}$$

应该成立。利用 $\hat{\rho}(\mathbf{n},\, \delta\theta)$ 和 $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\, \delta\theta)$ 的定义，这一公式又可被重新写作

$$\Psi'(\mathbf{r}') = \left[\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\, \delta\theta)\Psi\right](\hat{\rho}(\mathbf{n},\, \delta\theta)\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}), \tag{13}$$

或是

$$\left[\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\, \delta\theta)\Psi\right](\mathbf{r}) = \Psi\left(\hat{\rho}^{-1}(\mathbf{n},\, \delta\theta)\mathbf{r}\right). \tag{14}$$

另一方面，当绕方向 $\mathbf{n}$ 转一个无穷小角度 $\delta\theta$ 时， $\mathbf{r}'$ 可近似写作

$$\mathbf{r}' = \hat{\rho}(\mathbf{n},\, \delta\theta)\mathbf{r} \simeq \mathbf{r} + \delta\mathbf{r} = \mathbf{r} + \delta\theta\, \mathbf{n}\times\mathbf{r}. \tag{15}$$

因此，我们有

$$\hat{\rho}^{-1}(\mathbf{n},\, \delta\theta)\mathbf{r} \simeq \mathbf{r} - \delta\theta\, \mathbf{n}\times\mathbf{r}. \tag{16}$$

代入公式 (14) 后，我们有

$$\left[\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\, \delta\theta)\Psi\right](\mathbf{r}) = \Psi\left(\mathbf{r} - \delta\theta\, \mathbf{n}\times\mathbf{r}\right) = \Psi(\mathbf{r}) - (\delta\theta\mathbf{n}\times\mathbf{r})\cdot\hat{\nabla}\Psi(\mathbf{r}) + O(\delta\theta^2). \tag{17}$$

因此，准确到 $\delta\theta$ 的一次项，我们有

$$\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\, \delta\theta) \sim \hat{I} - (\delta\theta\, \mathbf{n}\times\mathbf{r})\cdot\hat{\nabla} \simeq \exp\left[-\delta\theta\mathbf{n}\cdot\left(\mathbf{r}\times\hat{\nabla}\right)\right] = \exp\left[-i\delta\theta\, \mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar\right]. \tag{18}$$

再根据 Stone 定理，我们看到，对于任何有限角度 θ，上式也是成立的。即我们有

$$\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\, \theta) = \exp\left[-i\theta\, \mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar\right]. \tag{19}$$

将这一公式推广到一般情况，即当 $\hat{\mathbf{J}}$ 为体系的总角动量算符时，我们有

$$\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\, \theta) = \exp\left[-i\theta\, \mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar\right]. \tag{20}$$

将 $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)$ 的表达式 (20) 代入公式 (4) 后，我们有

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)\hat{H}\hat{\mathcal{R}}^\dagger(\mathbf{n},\,\theta) \\
&= \exp\left[-i\theta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar\right]\hat{H}\exp\left[i\theta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar\right] \\
&= \left(1+(-i\theta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar)+\frac{1}{2!}(-i\theta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar)^2+\cdots\right) \\
&\times\ \hat{H}\left(1+(i\theta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar)+\frac{1}{2!}(i\theta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar)^2+\cdots\right).
\end{aligned}
\tag{21}
$$

取 θ 为一无穷小数值 δ 时，我们仅需考虑 $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)$ 展开式中的前两项。由此我们得到

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &\approx \left(1-i\delta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar\right)\hat{H}\left(1+i\delta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar\right) \\
&= \hat{H}-\frac{i}{\hbar}\delta\,(\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}})\hat{H}+\hat{H}\frac{i}{\hbar}\delta\,(\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}})+O(\delta^2).
\end{aligned}
\tag{22}
$$

整理后，我们有

$$
i\delta\left[\hat{H},\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right]+O(\delta^2)\approx 0. \tag{23}
$$

将此式两边同除 $i\delta$ 再令 $\delta\to 0$ 。我们得到

$$
\left[\hat{H},\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right]=0. \tag{24}
$$

由于 $\mathbf{n}$ 是任意的，我们可以先取 $\mathbf{n}=\mathbf{e}_x$ 。由此我们得到

$$
\left[\hat{H},\,\hat{J}_x\right]=0. \tag{25}
$$

同理，我们可得

$$
\left[\hat{H},\,\hat{J}_y\right]=0,\quad \left[\hat{H},\,\hat{J}_z\right]=0. \tag{26}
$$

利用这些关系，我们可以很容易地验证

$$
\left[\hat{H},\,\hat{J}^2\right]=\left[\hat{H},\,\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2+\hat{J}_z^2\right]=0. \tag{27}
$$

因此， $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 都是守恒量。

特别是，若将线性表示算符 $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)$ 作用到角动量算符 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的共同本征态 $|jm\rangle$ 上，我们得到

$$
\begin{aligned}
& \hat{\mathcal{R}}\left(\mathbf{n},\,\theta\right)|jm\rangle = \exp\left(-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)|jm\rangle = \hat{I}\exp\left(-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)|jm\rangle \\
= & \sum_{j'}\sum_{m'=-j'}^{j'}|j'm'\rangle\langle jm'|\exp\left(-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)|jm\rangle\delta_{j,j'} \\
= & \sum_{m'=-j}^{j}|jm'\rangle\langle jm'|\exp\left(-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)|jm\rangle \\
= & \sum_{m'=-j}^{j}\langle jm'|\exp\left(-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)|jm\rangle\psi_{jm'} = \sum_{m'=-j}^{j}D^{j}_{m'm}\left(\mathbf{n},\,\theta\right)|jm'\rangle.
\end{aligned}
\tag{28}
$$

这里，

$$
D^{j}_{m'm}(\mathbf{n},\,\theta)\equiv\langle jm'|\exp\left(-i\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)|jm\rangle \tag{29}
$$

构成一个矩阵。这些矩阵的全体构成一个矩阵群，称为转动群的 $2j+1$ 维不可约表示。

3.1.2 D 函数的一般性质

可以证明，任何一个三维空间中的转动可以分解成三个转动的乘积。即转动算符 $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)$ 可以写作

$$
\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\theta)=\exp\left[-i\gamma\hat{J}_{z''}\right]\exp\left[-i\beta\hat{J}_{y'}\right]\exp\left[-i\alpha\hat{J}_{z}\right]. \tag{30}
$$

这里，角度 $\alpha,\,\beta$ 和 γ 被称为 Euler 角。这一公式可以被解释作，先将实验室系的 z 轴旋转到一个新的具有球坐标 $\varphi'=\alpha$ 和 $\tilde{\theta}'=\beta$ 的转动轴，然后再绕这一转动轴旋转角度 $\theta'=\gamma$ 的操作。由此，我们得到 Euler 角的取值范围为 $0\le\alpha<2\pi,\,0\le\beta\le\pi$ 和 $0\le\gamma<2\pi$ 。

显然，由于在这一乘积中既有实验室系坐标轴出现，也有转动系坐标轴出现，它不大适宜用来做具体计算。因此，我们最好用角动量在实验室坐标系中的分量算符 $\hat{J}_x,\,\hat{J}_y$ 和 $\hat{J}_z$ 来表示 $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)$ 。我们注意到下列关系成立

$$
\begin{aligned}
\exp\left[-i\gamma\hat{J}_{z''}\right] &= \exp\left[-i\beta\hat{J}_{y'}\right]\exp\left[-i\gamma\hat{J}_{z'}\right]\exp\left[i\beta\hat{J}_{y'}\right], \\
\exp\left[-i\beta\hat{J}_{y'}\right] &= \exp\left[-i\alpha\hat{J}_{z}\right]\exp\left[-i\beta\hat{J}_{y}\right]\exp\left[i\alpha\hat{J}_{z}\right].
\end{aligned}
\tag{31}
$$

因此，我们有

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{R}} &= \exp\left[-i\gamma\hat{J}_{z''}\right]\exp\left[-i\beta\hat{J}_{y'}\right]\exp\left[-i\alpha\hat{J}_z\right] \\
&= \exp\left[-i\beta\hat{J}_{y'}\right]\exp\left[-i\gamma\hat{J}_{z'}\right]\exp\left[i\beta\hat{J}_{y'}\right]\exp\left[-i\beta\hat{J}_{y'}\right]\exp\left[-i\alpha\hat{J}_z\right] \\
&= \exp\left[-i\beta\hat{J}_{y'}\right]\exp\left[-i\gamma\hat{J}_{z'}\right]\exp\left[-i\alpha\hat{J}_z\right] \\
&= \exp\left[-i\alpha\hat{J}_z\right]\exp\left[-i\beta\hat{J}_y\right]\exp\left[i\alpha\hat{J}_z\right]\exp\left[-i\gamma\hat{J}_{z'}\right]\exp\left[-i\alpha\hat{J}_z\right]. \qquad (32)
\end{aligned}$$

注意到 z' 轴实际上是与 z 轴重合的，故我们得到

$$\hat{\mathcal{R}} = \exp\left[-i\alpha\hat{J}_z\right]\exp\left[-i\beta\hat{J}_y\right]\exp\left[-i\gamma\hat{J}_z\right]. \qquad (33)$$

这样，我们可以将 $D^j_{m'm}(\mathbf{n},\,\theta)$ 重新写作

$$\begin{aligned}
D^j_{m'm}(\alpha,\,\beta,\,\gamma) &= \left\langle jm'\left|\exp\left[-i\alpha\hat{J}_z\right]\exp\left[-i\beta\hat{J}_y\right]\exp\left[-i\gamma\hat{J}_z\right]\right|jm\right\rangle \\
&= \exp\left(-im'\alpha - im\gamma\right)\left\langle jm'\left|\exp\left[-i\beta\hat{J}_y\right]\right|jm\right\rangle \\
&\equiv \exp\left(-im'\alpha - im\gamma\right)\rangle d^j_{m'm}(\beta). \qquad (34)
\end{aligned}$$

$d^j_{m'm}(\beta)$ 的一般表达式由下式给出

$$\begin{aligned}
d^j_{m'm}(\beta) &= \left[(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!\right]^{1/2} \\
&\times \sum_\nu \left[(-1)^\nu(j-m'-\nu)!(j+m-\nu)!(\nu+m'-m)!\nu!\right]^{-1} \\
&\times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j+m-m'-2\nu}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m+2\nu}. \qquad (35)
\end{aligned}$$

在上式中， ν 的取值应保证各因子为非负整数。有关这一公式的推导，可以参考韩其智和孙洪洲著《群论》一书的 4.3 节。

$d^j_{m'm}(\beta)$ 的一些简单性质可由其定义直接推出。

(1) 首先，我们有

$$\begin{aligned}
d^j_{m'm}(-\beta) &= \left\langle jm'\left|\exp\left[i\beta\hat{J}_y\right]\right|jm\right\rangle = \left\langle jm'\left|\left(\exp\left[-i\beta\hat{J}_y\right]\right)^\dagger\right|jm\right\rangle \\
&= \overline{\langle jm|e^{-i\beta\hat{J}_y}|jm'\rangle} = \bar{d}^j_{mm'}(\beta). \qquad (36)
\end{aligned}$$

另一方面，由 $d^j_{m'm}(\beta)$ 的表达式，我们知道它是实数。因此

$$d^j_{m'm}(-\beta)\rangle = d^j_{mm'}(\beta). \tag{37}$$

(2) 在 $d^j_{m'm}(\beta)$ 的一般表达式中，若我们将 β 换为 $-\beta$ ，则有

$$\begin{aligned}
d^j_{m'm}(-\beta) &= [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2} \\
&\times \sum_\nu [(-1)^\nu (j-m'-\nu)!(j+m-\nu)!(\nu+m'-m)!\nu!]^{-1} \\
&\times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j+m-m'-2\nu} \left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m+2\nu} (-1)^{m'-m+2\nu} \\
&= (-1)^{m'-m} d^j_{m'm}(\beta).
\end{aligned} \tag{38}$$

(3) 比较上面两个结论后，我们得到

$$d^j_{mm'}(\beta) = (-1)^{m'-m} d^j_{m'm}(\beta). \tag{39}$$

即矩阵的行列互换时，将出现一个因子 $(-1)^{m'-m}$ 。

(4) 在 $d^j_{m'm}(\beta)$ 的表达式中，将 m 换为 $-m'$ ， m' 换为 $-m$ 后，我们有

$$\begin{aligned}
d^j_{-m,-m'}(\beta) &= [(j-m')!(j+m')!(j-m)!(j+m)!]^{1/2} \\
&\times \sum_\nu [(-1)^\nu (j+m-\nu)!(j-m'-\nu)!(\nu-m+m')!\nu!]^{-1} \\
&\times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-m'+m-2\nu} \left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{-m+m'+2\nu} \\
&= d^j_{m'm}(\beta).
\end{aligned} \tag{40}$$

因此， $d^j_{m'm}(\beta) = (-1)^{m-m'} d^j_{-m',-m}(\beta)$ 。

(5) 当 $\beta=\pi$ 时， $\cos\frac{\beta}{2} = \cos\frac{\pi}{2} \equiv 0$ 。此时，$d^j_{m'm}(\pi)$ 仍有可能非零。为此 $\cos\frac{\beta}{2}$ 的幂次必须满足条件

$$2j+m-m'-2\nu = 0, \tag{41}$$

即 $\nu = j+\frac{1}{2}(m-m')$ 。否则， $d_{mm'}(\pi)=0$ 。这导致了如下的联立方程

$$(j-m'-\nu)! = \left[-\frac{1}{2}(m+m')\right]!, \quad (j+m-\nu)! = \left[\frac{1}{2}(m'+m)\right]!. \tag{42}$$

因此， $m'+m$ 必须为零，否则两个方程中的一个没有意义。由此，我们推出

$$\nu = j+m,\quad (j-m'-\nu)! = 1,\quad (j+m-\nu)! = 1. \tag{43}$$

同时，我们有

$$\begin{aligned}
d^j_{m'm}(\pi) &= [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2} \\
&\times \sum_\nu [(-1)^\nu (j-m'-\nu)!(j+m-\nu)!(\nu+m'-m)!\nu!]^{-1} \\
&\times (-1)^{m'-m+2\nu}\delta_{m,-m'} \\
&= [(j+m)!(j-m)!(j-m)!(j+m)!]^{1/2} \\
&\times \delta_{m,-m'}\left[(-1)^{j+m}(j+m+m'-m)!(j+m)!\right]^{-1}(-1)^{-2m+2\nu} \\
&= \delta_{m,-m'}(j+m)!(j-m)!(-1)^{j-m}\frac{1}{(j+m)!(j-m)!} \\
&= (-1)^{j-m}\delta_{m',-m}.
\end{aligned} \tag{44}$$

同理可得

$$d^j_{m'm}(-\pi) = (-1)^{j+m}\delta_{m',-m}. \tag{45}$$

当 j 是整数时， m' 也只能取整数值。此时我们有

$$(-1)^{j-m} = (-1)^{j-2m+m} = (-1)^{j+m}. \tag{46}$$

因此

$$d^j_{m'm}(-\pi) = d^j_{m'm}(\pi). \tag{47}$$

但是，当 j 取半整数值时，这一结论并不一定成立。

(6) 最后，利用恒等式

$$\exp\left[-i(\pi+\beta)\hat{J}_y\right] = \exp\left(-i\pi\hat{J}_y\right)\exp\left(-i\beta\hat{J}_y\right), \tag{48}$$

我们得到

$$\begin{aligned}
d^j_{m'm}(\pi+\beta) &= \langle jm'|\exp\left(-i\pi\hat{J}_y\right)\exp\left(-i\beta\hat{J}_y\right)|jm\rangle \\
&= \sum_{m''=-j}^{j}\langle jm'|\exp\left(-i\pi\hat{J}_y\right)|jm''\rangle\langle jm''|\exp\left(-i\beta\hat{J}_y\right)|jm\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{m''=-j}^{j} d^j_{m'm''}(\pi) d^j_{m''m}(\beta) = \sum_{m''=-j}^{j} (-1)^{j-m''} \delta_{m',-m''} d^j_{m''m}(\beta) \\
&= (-1)^{j+m'} d^j_{-m',\,m}(\beta). \qquad (49)
\end{aligned}
$$

同理，我们也可以证明， $d^j_{m'm}(\pi-\beta) = (-1)^{j+m'} d_{m',-m}(\beta)$ 。

通过 D 函数与 d 函数之间的关系，我们可以很容易地得到下面的有关 D 函数的一些性质。

(1) 首先，我们有

$$
\begin{aligned}
D^j_{m'm}(-\gamma,-\beta,-\alpha) &= \langle jm'|\hat{\mathcal{R}}^{-1}(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle = \langle jm'|\hat{\mathcal{R}}^{\dagger}(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle \\
&= \overline{\langle jm|\hat{\mathcal{R}}|jm'\rangle} = \overline{D}^j_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma). \qquad (50)
\end{aligned}
$$

(2) 又由于

$$
D^j_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma) = \exp(-im\alpha) d^j_{mm'}(\beta) \exp\left[-im'\gamma\right]. \qquad (51)
$$

我们有

$$
\begin{aligned}
\overline{D}^j_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma) &= \exp(im\alpha) \overline{d}^j_{mm'}(\beta) \exp(im'\gamma) \\
&= \exp(im\alpha) d^j_{mm'}(\beta) \exp(im'\gamma) \\
&= \exp(im\alpha) (-1)^{m-m'} d_{-m,\,-m'}(\beta) \exp(im'\gamma) \\
&= (-1)^{m-m'} D^j_{-m,-m'}(\alpha,\beta,\gamma). \qquad (52)
\end{aligned}
$$

联合 (50) 和 (52) 两式，我们得到

$$
D_{m'm}(-\gamma,-\beta,-\alpha) = (-1)^{m-m'} D_{-m,-m'}(\alpha,\beta,\gamma). \qquad (53)
$$

(3) 最后，利用 $\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\theta) = \hat{\mathcal{R}}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的酉正性，我们有

$$
\begin{aligned}
&\delta_{m',m} \\
&= \langle jm'|\hat{\mathcal{R}}^{\dagger}\hat{\mathcal{R}}|jm\rangle = \sum_{m_1=-j}^{j} \langle jm'|\hat{\mathcal{R}}^{\dagger}|jm_1\rangle\langle jm_1|\hat{\mathcal{R}}|jm\rangle \\
&= \sum_{m_1=-j}^{j} \overline{\langle jm_1|\hat{\mathcal{R}}|jm'\rangle}\langle jm_1|\hat{\mathcal{R}}|jm\rangle = \sum_{m_1=-j}^{j} \overline{D}^j_{m_1m'}(\alpha,\beta,\gamma) D^j_{m_1m}(\alpha,\beta,\gamma). \qquad (54)
\end{aligned}
$$

这些关系式会在下面的推导中被用到。

3.1.3 D 函数的耦合法则

根据角动量的耦合法则，我们知道，由两个角动量耦合而得到的总角动量由下式决定

$$|j_1 - j_2| \le j \le (j_1 + j_2), \quad m = m_1 + m_2. \tag{55}$$

因此，相应的本征态 ψ_{jm} 可被写成如下的形式

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2, jm} \phi_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}. \tag{56}$$

由于函数 $\{\phi_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}\}$ 和 $\{\psi_{jm}\}$ 都是正交归一的, 因此全体的系数 $\{C_{j_1 m_1, j_2 m_2, jm}\}$ 构成了一个 $(2j_1+1)(2j_2+1) \times (2j_1+1)(2j_2+1)$ 的酉正矩阵。又通过适当选取波函数的相位，我们可以将这些系数取作实数。因此，我们有等式

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} C^*_{j_1 m_1, j_2 m_2, j'm'} C_{j_1 m_1, j_2 m_2, jm} = \sum_{m_1} \sum_{m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2, j'm'} C_{j_1 m_1, j_2 m_2, jm} = \delta_{j'j} \delta_{m'm}, \tag{57}$$

和

$$\sum_{j} \sum_{m} C^*_{j_1 m_1', j_2 m_2', jm} C_{j_1 m_1, j_2 m_2, jm} = \sum_{j} \sum_{m} C_{j_1 m_1', j_2 m_2', jm} C_{j_1 m_1, j_2 m_2, jm} = \delta_{m_1' m_1} \delta_{m_2' m_2} \tag{58}$$

成立。其次，我们考虑到，$\{\phi_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}\}$ 和 $\{\psi_{jm}\}$ 都是角动量算符 $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ 的本征态。因此，在 ψ_{jm} 依 $\{\phi_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}\}$ 展开的表达式中，条件 $m = m_1 + m_2$ 必须被满足。为此，我们引入记号

$$C_{j_1 m_1, j_2 m_2, jm} = \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle \, \delta_{m, m_1 + m_2}. \tag{59}$$

将它分别代入表达式 (56)， (57) 和 (58) 后，我们得到

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1} \langle j_1 m_1, j_2 (m - m_1) | jm \rangle \phi_{j_1 m_1} \phi_{j_2, m - m_1}, \tag{60}$$

$$\sum_{m_1} \langle j_1 m_1, j_2 (m - m_1) | j'm' \rangle \langle j_1 m_1, j_2 (m - m_1) | jm \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}, \tag{61}$$

以及

$$
\begin{aligned}
& \sum_j \sum_m \langle j_1 m_1', j_2 m_2' | jm \rangle \delta_{m, m_1'+m_2'} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle \delta_{m, m_1+m_2} \\
= & \sum_j \langle j_1 m_1', j_2 (m - m_1') | jm \rangle \langle j_1 m_1, j_2 (m - m_1) | jm \rangle \\
= & \delta_{m_1' m_1}. \qquad (62)
\end{aligned}
$$

这些满足条件 $m = m_1 + m_2$ 的实的展开系数 $\{\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm = (m_1 + m_2)\rangle\}$ 被称为 Clebsch-Gordon 系数。

下面，我们利用这些关系式推导 D 函数所满足的耦合与分解公式。

在空间转动 $\hat{\rho}(\mathbf{n}, \theta)$ 的作用下， ψ_{jm}, $\phi_{j_1 m_1}$ 和 $\phi_{j_2, m-m_1}$ 分别按照它们各自的表示变换，即我们有

$$
\begin{aligned}
& \hat{\mathcal{R}}(\alpha, \beta, \gamma) \psi_{jm} = \sum_\mu D^j_{\mu m} \psi_{j\mu} \\
= & \sum_{m_1} \langle j_1 m_1, j_2 (m - m_1) | jm \rangle \left(\hat{\mathcal{R}}(\alpha, \beta, \gamma) \phi_{j_1 m_1} \right) \left(\hat{\mathcal{R}}(\alpha, \beta, \gamma) \phi_{j_2, m-m_1} \right) \\
= & \sum_{m_1} \langle j_1 m_1, j_2 (m - m_1) | jm \rangle \left(\sum_{\mu_1} D^{j_1}_{\mu_1 m_1} \phi_{j_1 \mu_1} \right) \left(\sum_{\mu_2} D^{j_2}_{\mu_2,\, m-m_1} \phi_{j_2 \mu_2} \right) \\
= & \sum_{m_1} \sum_{\mu_1} \sum_{\mu_2} \langle j_1 m_1, j_2\, (m - m_1) | jm \rangle D^{j_1}_{\mu_1 m_1} D^{j_2}_{\mu_2,\, m-m_1} \phi_{j_1 \mu_1} \phi_{j_2 \mu_2}. \qquad (63)
\end{aligned}
$$

另一方面，将 $\psi_{j\mu}$ 再次展开后，我们得到

$$
\begin{aligned}
& \sum_\mu D^j_{\mu m} \sum_s \langle j_1 s, j_2 (\mu - s) | j\mu \rangle \phi_{j_1 s} \phi_{j_2,\, \mu - s} \\
= & \sum_{m_1} \sum_{\mu_1} \sum_{\mu_2} \langle j_1 m_1, j_2 (m - m_1) | jm \rangle D^{j_1}_{\mu_1 m_1} D^{j_2}_{\mu_2,\, m-m_1} \phi_{j_1 \mu_1} \phi_{j_2 \mu_2}. \qquad (64)
\end{aligned}
$$

由于函数族 $\{\phi_{j_1 m_1} \phi_{j_2 m_2}\}$ 是线性无关的，比较上式两边的系数后，我们有

$$
\begin{aligned}
& D^j_{\mu m} \langle j_1 s, j_2 (\mu - s) | j\mu \rangle \\
= & \sum_{m_1} \sum_{\mu_1} \sum_{\mu_2} \langle j_1 m_1, j_2\, (m - m_1) | jm \rangle D^{j_1}_{\mu_1 m_1} \delta_{\mu_1,\, s} D^{j_2}_{\mu_2,\, m-m_1} \delta_{\mu_2, \mu - s} \\
= & \sum_{m_1} \langle j_1 m_1, j_2 (m - m_1) | jm \rangle D^{j_1}_{s m_1} D^{j_2}_{\mu - s, m - m_1}. \qquad (65)
\end{aligned}
$$

此既 D 函数的耦合公式。

现在，我们再来推导 D 函数的分解公式。在上式中，令 $m = m_1 + m_2$ 及 $\mu = \mu_1 + \mu_2$ 。我们有

$$\begin{aligned} & D^j_{\mu_1+\mu_2,m_1+m_2}\langle j_1 s, j_2(\mu_1+\mu_2-s)|j(\mu_1+\mu_2)\rangle \\ = & \sum_{m_1'}\langle j_1 m_1', j_2(m_1+m_2-m_1')|j(m_1+m_2)\rangle D^{j_1}_{sm_1'} D^{j_2}_{\mu_1+\mu_2-s,m_1+m_2-m_1'}. \end{aligned} \tag{66}$$

再在公式两边同乘 $\langle j_1\widetilde{m}_1, j_2\widetilde{m}_2|j(m=\widetilde{m}_1+\widetilde{m}_2=m_1+m_2)\rangle$ ，并对 j 求和后，我们得到

$$\begin{aligned} & \sum_j \langle j_1\widetilde{m}_1, j_2\widetilde{m}_2|j(\widetilde{m}_1+\widetilde{m}_2)\rangle\langle j_1 s, j_2(\mu_1+\mu_2-s)|j(\mu_1+\mu_2)\rangle D^j_{\mu m} \\ = & \sum_{m_1'}\left[\sum_j \langle j_1\widetilde{m}_1, j_2\widetilde{m}_2|j(\widetilde{m}_1+\widetilde{m}_2=m)\rangle\langle j_1 m_1', j_2(m-m_1')|j(m_1+m_2=m)\rangle\right] \\ \times & D^{j_1}_{sm_1'} D^{j_2}_{\mu_1+\mu_2-s,m_1+m_2-m_1'} \\ = & \sum_{m_1'}\delta_{\widetilde{m}_1,m_1'} D^{j_1}_{sm_1'} D^{j_2}_{\mu_1+\mu_2-s,m-m_1'} = D^{j_1}_{s\widetilde{m}_1} D^{j_2}_{(\mu_1+\mu_2-s),\widetilde{m}_2}. \end{aligned} \tag{67}$$

最后令 $s = \mu_1$ ，我们得到

$$\sum_j \langle j_1\widetilde{m}_1, j_2\widetilde{m}_2|jm\rangle\langle j_1\mu_1, j_2\mu_2|j\mu\rangle D^j_{\mu m} = D^{j_1}_{\mu_1,\widetilde{m}_1} D^{j_2}_{\mu_2,\widetilde{m}_2}. \tag{68}$$

自然，我们将其称为 D 函数的分解公式。注意，这一公式成立的条件是 $m = \widetilde{m}_1 + \widetilde{m}_2$ 和 $\mu = \mu_1 + \mu_2$ 。

3.1.4 D 函数的积分公式

下面，我们要证明，当 j 为整数时 $\{D^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\}$ 是彼此正交的。即我们有

$$K = \int d\Omega \overline{D}^{j_1}_{m_1k_1}(\alpha,\beta,\gamma) D^{j_2}_{m_2k_2}(\alpha,\beta,\gamma) = \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{m_1,m_2}\delta_{k_1,k_2}\delta_{j_1,j_2}. \tag{69}$$

这里，

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin\beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \tag{70}$$

是对全部旋转群元素求和。

证：由于

$$\overline{D}^{j_1}_{m_1k_1}(\alpha,\beta,\gamma)=(-1)^{m_1-k_1}D^{j_1}_{-m_1,-k_1}(\alpha,\beta,\gamma), \tag{71}$$

我们有

$$\begin{aligned} K &= \int d\Omega(-1)^{m_1-k_1}D^{j_1}_{-m_1,-k_1}(\alpha,\beta,\gamma)D^{j_2}_{m_2k_2}(\alpha,\beta,\gamma) \\ &= \int d\Omega(-1)^{m_1-k_1}\sum_j\langle j_1(-m_1),j_2m_2|j(m_2-m_1)\rangle \\ &\times \langle j_1(-k_1),j_2k_2|j(k_2-k_1)\rangle D^j_{m_2-m_1,k_2-k_1}(\alpha,\beta,\gamma). \end{aligned} \tag{72}$$

按照定义，最后一行中的积分可被进一步写作

$$\begin{aligned} &\int d\Omega D^j_{m_2-m_1,k_2-k_1}(\alpha,\beta,\gamma) \\ =\ & \int_0^{2\pi}d\alpha\exp(-i(m_2-m_1)\alpha)\int_0^{2\pi}d\gamma\exp(-i(k_2-k_1)\gamma)\int_0^{\pi}\sin\beta d\beta d^j_{m_2-m_1,k_2-k_1}(\beta) \\ =\ & (2\pi\delta_{m_1,m_2})(2\pi\delta_{k_1,k_2})\int_0^{\pi}\sin\beta d\beta d^j_{00}(\beta). \end{aligned} \tag{73}$$

利用 $d^j_{mm'}(\beta)$ 的表达式，我们得到

$$\begin{aligned} d^j_{00}(\beta) &= (j!)^2\sum_\nu\left[(-1)^\nu((j-\nu)!)^2(\nu!)^2\right]^{-1}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2\nu}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2\nu} \\ &= P_j(\cos\beta). \end{aligned} \tag{74}$$

因此，我们有

$$\begin{aligned} &\int d\Omega D^j_{m_2-m_1,k_2-k_1}(\alpha,\beta,\gamma)=4\pi^2\delta_{m_1,m_2}\delta_{k_1,k_2}\int_0^{\pi}\sin\beta d\beta P_j(\cos\beta) \\ =\ & 4\pi^2\delta_{m_1,m_2}\delta_{k_1,k_2}\int_{-1}^{1}P_j(x)dx=4\pi^2\delta_{m_1,m_2}\delta_{k_1,k_2}2\delta_{j,0}. \end{aligned} \tag{75}$$

由于 $j\geq|j_1-j_2|$， $j=0$ 意味着 $j_1=j_2$ 。故我们有 $\delta_{j,0}=\delta_{j_1,j_2}$ 。将这些结果代入 K 的表达式后得到

$$K=8\pi^2\delta_{m_1,m_2}\delta_{k_1,k_2}\delta_{j_1,,j_2}(-1)^{m_1-k_1}\langle j_1(-m_1),j_1m_1|00\rangle\langle j_1(-k_1),j_1k_1|00\rangle. \tag{76}$$

利用单重态的构造方法 (见习题集 6.65 题)，我们有

$$\langle j_1-k_1,j_1k_1|00\rangle=\frac{(-1)^{j_1+k_1}}{\sqrt{2j_1+1}}. \tag{77}$$

因此我们最后得到

$$\begin{aligned}K &= \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{m_1,m_2}\delta_{k_1,k_2}\delta_{j_1,j_2}(-1)^{m_1-k_1+j_1+m_1+j_1+k_1}\\ &= \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{m_1,m_2}\delta_{k_1,k_2}\delta_{j_1,j_2}(-1)^{2j_1+2m_1}=\frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{m_1,m_2}\delta_{k_1,k_2}\delta_{j_1,j_2}.\end{aligned} \tag{78}$$

$ 3.2 原子及原子核的转动谱

3.2.1 转动刚体体系的量子化

当人们研究原子或原子核的转动谱时，可以采用 Born-Oppenhamer 近似，将之视为一个刚体。它的转动由其角动量 $\hat{I}$ 来表征。在实验室系中，刚体角动量的三个分量 $\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z$ 分别满足对易关系

$$[\hat{I}_x,\, \hat{I}_y] = i\hat{I}_z,\quad [\hat{I}_y,\, \hat{I}_z] = i\hat{I}_x,\quad [\hat{I}_z,\, \hat{I}_x] = i\hat{I}_y. \tag{79}$$

由这些角动量算符，我们可以写出转动刚体的哈密顿量 H 。一般来说，这样导出来的哈密顿量比较复杂。只有在特殊的参照系中，它才有一个较为简单的形式。我们现在就来寻找这一参照系。

在经典力学中，一个转动刚体的动能可以写作

$$T = \frac{1}{2}\int_\Omega \rho(\vec{r})(\vec{V}_c + \vec{\omega}\times\vec{r})^2 d^3\vec{r}. \tag{80}$$

这里 $\vec{V}_c$ 为质心速度，我们取作零。而 $(\vec{\omega}\times\vec{r})^2$ 可写作

$$(\vec{\omega}\times\vec{r})^2 = (\vec{\omega}\times\vec{r})\cdot(\vec{\omega}\times\vec{r}) = (\vec{\omega}\cdot\vec{\omega})(\vec{r}\cdot\vec{r}) - (\vec{\omega}\cdot\vec{r})^2 = \omega^2 r^2 - (\vec{\omega}\cdot\vec{r})^2. \tag{81}$$

因此，

$$T = \frac{1}{2}\int_\Omega \rho(\vec{r})\left(\omega^2 r^2 - (\vec{\omega}\cdot\vec{r})^2\right) d^3\vec{r}. \tag{82}$$

若我们引入转动惯量矩阵

$$J = \begin{pmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{yx} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{zx} & J_{zy} & J_{zz} \end{pmatrix}, \tag{83}$$

这里

$$J_{xx} = \int_\Omega \rho(\vec{r})(y^2+z^2)d^3\vec{r}, \quad J_{xy} = -\int_\Omega \rho(\vec{r})xyd^3\vec{r}, \ldots\ldots, \tag{84}$$

则上式可写为

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{k=1}^{3} J_{ik}\omega_i\omega_k. \tag{85}$$

由于 J 是一个对称矩阵，我们总可以找到一个酉正变换 U，使得

$$U^\dagger JU = \begin{pmatrix} J_1 & 0 & 0 \\ 0 & J_2 & 0 \\ 0 & 0 & J_3 \end{pmatrix} \equiv J_D \tag{86}$$

成立。它被称为刚体的主转动惯性张量。将其代入动能的表达式后有

$$T = \frac{1}{2}(J_1\widetilde{\omega}_1^2 + J_2\widetilde{\omega}_2^2 + J_3\widetilde{\omega}_3^2). \tag{87}$$

这里，

$$\begin{pmatrix} \widetilde{\omega}_1 \\ \widetilde{\omega}_2 \\ \widetilde{\omega}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix} \tag{88}$$

被称为沿主轴的转动角速度。

下面，我们来看一下如何利用正则量子化过程将这一体系量子化。

首先，我们写出转子的经典的拉格朗日量

$$L = T = \frac{1}{2}J_1\dot{\theta_1}^2 + \frac{1}{2}J_2\dot{\theta_2}^2 + \frac{1}{2}J_3\dot{\theta_3}^2. \tag{89}$$

因此，与 θ_i 共轭的角动量为

$$I_\xi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}_1} = J_1\dot{\theta}_1, \quad I_\eta = \frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}_2} = J_2\dot{\theta}_2, \quad I_\zeta = \frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}_3} = J_3\dot{\theta}_3. \tag{90}$$

由此，我们得到转子的哈密顿量为

$$H = I_\xi\dot{\theta}_1 + I_\eta\dot{\theta}_2 + I_\zeta\dot{\theta}_3 - L = \frac{1}{2}J_1\dot{\theta_1}^2 + \frac{1}{2}J_2\dot{\theta_2}^2 + \frac{1}{2}J_3\dot{\theta_3}^2 = \frac{I_\xi^2}{2J_1} + \frac{I_\eta^2}{2J_2} + \frac{I_\zeta^2}{2J_3}. \tag{91}$$

现在，将 I_ξ, I_η, I_ζ 用相应的算符 $\hat{I}_\xi, \hat{I}_\eta, \hat{I}_\zeta$ 代替，我们就得到量子陀螺的哈密顿量。

3.2.2 转子角动量所满足的对易关系

但是，这一表达式也有它的问题。由于这一简单形式仅对刚体的主转动轴成立，而我们做观测是相对于实验室系进行的。这就要求我们找到 $\hat{I}_\xi, \hat{I}_\eta, \hat{I}_\zeta$ 对 $\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z$ 依赖关系。因此，我们需要对角动量算符在不同参照系间的变换理论有一个详尽的了解。下面的讨论引自 Davydov 的 "Quantum Mechanics" 一书的 173 页。

首先，让我们引入一个假想系统：取一个实验室 xyz 坐标系以及固定在转动刚体上的 $\xi\eta\zeta$ 坐标系 (后者可以认为是由前者做一个坐标旋转而得) 。同时，再引入一个自旋为 j 的独立粒子，它与刚体之间并无相互作用。令 $\mathbf{r}' = (\theta', \phi')$ 和 $\mathbf{r} = (\theta, \phi)$ 分别为空间中同一点相对于 $\xi\eta\zeta$ 和 xyz 坐标系的坐标，而 ψ' 和 ψ 则为同一个粒子在两个坐标系中的波函数。显然，我们应当有

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}'). \tag{92}$$

引入 Dirac 记号，上式又可改写作 $\langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}'|\psi'\rangle$ 。

假设开始时，$\xi\eta\zeta$ 坐标系与 xyz 坐标系是重合的。我们取一个在 z 方向 (同时也是在 ζ 方向) 上具有磁量子数 m 的粒子角动量本征态 $|\psi\rangle = |jm\rangle$ ，并将其与 xyz 坐标系固定。现在，我们做一个空间的有限旋转 $\hat{\rho}(\mathbf{n}, \theta)$ ，将 $\xi\eta\zeta$ 坐标系旋转到一个特定的位置。显然，相对于粒子而言，这是一个被动旋转。因此，我们有

$$\begin{aligned}
|\psi'\rangle &= \exp(i\theta\,\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}})|jm\rangle = \sum_k D^j_{km}\left(\hat{\mathcal{R}}^{-1}(\mathbf{n},\,\theta)\right)|jk\rangle = \sum_k \overline{D}^j_{mk}\left(\hat{\mathcal{R}}(\mathbf{n},\,\theta)\right)|jk\rangle \\
&= \sum_k \overline{D}^j_{mk}\,(\alpha,\beta,\gamma)\,|jk\rangle.
\end{aligned} \tag{93}$$

这里，$|jk\rangle$ 是在 ζ 轴方向上具有磁量子数 k 的粒子的本征态。在坐标表象中，这一方程等价于下面的表达式

$$\langle\theta', \phi'|\psi'\rangle = \sum_k \overline{D}^j_{mk}\,(\alpha,\beta,\gamma)\,\langle\theta', \phi'|jk\rangle = \langle\theta, \phi|\psi\rangle = \langle\theta, \phi|jm\rangle. \tag{94}$$

下面，我们再取某一个方向 $\mathbf{n}_1$ ，但仅将 $\xi\eta\zeta$ 系绕 $\mathbf{n}_1$ 转一个无穷小的角度 δ 。显然，对于粒子而言，这仍是一个被动转动。因此，我们有

$$\langle\theta'\phi'|jk\rangle' = \exp\left(i\delta\,\mathbf{n}_1\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)\langle\theta'\phi'|jk\rangle \cong \left(1+i\delta\,\mathbf{n}_1\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)\langle\theta'\phi'|jk\rangle. \tag{95}$$

其次，由于 xyz 系统在此转动下不变，故 $\langle\theta\phi|jm\rangle$ 保持不变。但是，$\overline{D}^j_{mk}$ 则要按照如下的规律变换

$$\left(\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\right)' = \exp\left(-i\delta\,\mathbf{n}_1\cdot\hat{\mathbf{I}}\right)\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma) \cong \left(1-i\delta\,\mathbf{n}_1\cdot\hat{\mathbf{I}}\right)\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{96}$$

这是由于，对于函数 $\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)$ 而言，固定在刚体上的 $\xi\eta\zeta$ 系的转动是一个主动转动。将这些结果代入公式 (94) 后，我们得到恒等式

$$\sum_k\left(\mathbf{n}_1\cdot\hat{\mathbf{I}}\right)\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)|jk\rangle = \sum_k\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\left(\mathbf{n}_1\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)|jk\rangle. \tag{97}$$

现在，我们看一个特例。令 $\mathbf{n}_1=\zeta$ 轴，我们有

$$\sum_k\hat{I}_\zeta\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)|jk\rangle = \sum_k\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\,\hat{J}_\zeta|jk\rangle = \sum_k\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\;k\,|jk\rangle. \tag{98}$$

这样，我们得到

$$\hat{I}_\zeta\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma) = k\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{99}$$

同理，我们有

$$\sum_k\hat{I}_\xi\overline{D}^j_{mk}|jk\rangle = \sum_k\overline{D}^j_{mk}\,\hat{J}_\xi|jk\rangle,\;\;\sum_k\hat{I}_\eta\overline{D}^j_{mk}|jk\rangle = \sum_k\overline{D}^j_{mk}\,\hat{J}_\eta|jk\rangle. \tag{100}$$

此式等价于

$$\begin{aligned}\sum_k\hat{I}_+\overline{D}^j_{mk}|jk\rangle &= \sum_k\overline{D}^j_{mk}\,\hat{J}_+|jk\rangle = \sum_k\overline{D}^j_{mk}\sqrt{j(j+1)-k(k+1)}\,|j,\,k+1\rangle,\\ \sum_k\hat{I}_-\overline{D}^j_{mk}|jk\rangle &= \sum_k\overline{D}^j_{mk}\,\hat{J}_-|jk\rangle = \sum_k\overline{D}^j_{mk}\sqrt{j(j+1)-k(k-1)}\,|j,\,k-1\rangle.\end{aligned} \tag{101}$$

因此，我们有

$$\begin{aligned}\hat{I}_+\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\,\beta,\,\gamma) &= \sqrt{j(j+1)-k(k-1)}\;\overline{D}^j_{m(k-1)}(\alpha,\,\beta,\,\gamma),\\ \hat{I}_-\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\,\beta,\,\gamma) &= \sqrt{j(j+1)-k(k+1)}\;\overline{D}^j_{m(k+1)}(\alpha,\,\beta,\,\gamma).\end{aligned} \tag{102}$$

或是

$$
\begin{aligned}
& \hat{I}_\xi \overline{D}^j_{mk}(\alpha,\,\beta,\,\gamma) \\
= \ & \frac{1}{2}\left[\sqrt{j(j+1)-k(k-1)}\ \overline{D}^j_{m(k-1)} + \sqrt{j(j+1)-k(k+1)}\ \overline{D}^j_{m(k+1)}\right], \\
& \hat{I}_\eta \overline{D}^j_{mk}(\alpha,\,\beta,\,\gamma) \\
= \ & \frac{1}{2i}\left[\sqrt{j(j+1)-k(k-1)}\ \overline{D}^j_{m(k-1)} - \sqrt{j(j+1)-k(k+1)}\ \overline{D}^j_{m(k+1)}\right].
\end{aligned} \tag{103}
$$

有了这些表达式后，我们现在可以验证对易关系

$$
\left[\hat{I}_\xi,\,\hat{I}_\eta\right] = -i\hat{I}_\zeta,\quad \left[\hat{I}_\eta,\,\hat{I}_\zeta\right] = -i\hat{I}_\xi,\quad \left[\hat{I}_\zeta,\,\hat{I}_\xi\right] = -i\hat{I}_\eta \tag{104}
$$

成立。例如，

$$
\begin{aligned}
& \left[\hat{I}_\zeta,\,\hat{I}_\xi\right]\overline{D}^j_{mk} = (\hat{I}_\zeta\hat{I}_\xi - \hat{I}_\xi\hat{I}_\zeta)\overline{D}^j_{mk} \\
= \ & \hat{I}_\zeta\left[\frac{1}{2}\left(\overline{D}^j_{m(k-1)}\sqrt{j(j+1)-k(k-1)} + \overline{D}^j_{m(k+1)}\sqrt{j(j+1)-k(k+1)}\right)\right] - \hat{I}_\xi\ k\overline{D}^j_{mk} \\
= \ & \frac{1}{2}(k-1)\overline{D}^j_{m(k-1)}\sqrt{j(j+1)-k(k-1)} + \frac{1}{2}(k+1)\overline{D}^j_{m(k+1)}\sqrt{j(j+1)-k(k+1)} \\
- \ & \frac{1}{2}k\,\overline{D}^j_{m(k-1)}\sqrt{j(j+1)-k(k-1)} - \frac{1}{2}k\,\overline{D}^j_{m(k+1)}\sqrt{j(j+1)-k(k+1)} \\
= \ & -\frac{1}{2}\overline{D}^j_{m(k-1)}\sqrt{j(j+1)-k(k-1)} + \frac{1}{2}\overline{D}^j_{m(k+1)}\sqrt{j(j+1)-k(k+1)} \\
= \ & -i\hat{I}_\eta\overline{D}^j_{mk}.
\end{aligned} \tag{105}
$$

作为一个练习，我们还可以利用上面的表达式证明

$$
\hat{I}^2\overline{D}^j_{mk} = \left(\hat{I}^2_\xi + \hat{I}^2_\eta + \hat{I}^2_\zeta\right)\overline{D}^j_{mk} = j(j+1)\overline{D}^j_{mk}, \tag{106}
$$

即 $\overline{D}^j_{mk}$ 是 $\hat{I}^2$ 和 $\hat{I}_\zeta$ 的本征态，而本征值分别为 $j(j+1)$ 和 k 。

同理，在得到公式 (94) 后，我们也可将 xyz 坐标系绕某一根 $\mathbf{n}_2$ 轴做一无穷小旋转 $\hat{R}(\mathbf{n}_2,\delta)$ ，同时保持 $\xi\eta\zeta$ 坐标系不变。但是，不同于上面的做法的是，我们假定粒子现在与 $\xi\eta\zeta$ 坐标系固定在一起。这一旋转相对于函数 $\langle\theta\phi|jm\rangle$ 和 $\overline{D}^j_{mk}$ 而言都是被动的。因此，我们有

$$
(\langle\theta\phi|jm\rangle)' = \exp\left(i\delta\,\mathbf{n}_2\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)\langle\theta\phi|jm\rangle \cong \left(1 + i\delta\,\mathbf{n}_2\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)\langle\theta\phi|jm\rangle \tag{107}
$$

以及

$$\left(\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\right)' = \exp\left(i\delta\,\mathbf{n}_2\cdot\hat{\mathbf{I}}\right)\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma) \cong \left(1+i\delta\,\mathbf{n}_2\cdot\hat{\mathbf{I}}\right)\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{108}$$

但 $\langle\theta'\phi'|jk\rangle$ 保持不变。

由这些关系，我们可导出方程

$$\left(\mathbf{n}_2\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)\langle\theta\phi|jm\rangle = \sum_k \langle\theta'\phi'|jk\rangle\left(\mathbf{n}_2\cdot\hat{\mathbf{I}}\right)\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{109}$$

取 $\mathbf{n}_2$ 为 z 轴后，我们有

$$m\langle\theta\varphi|jm\rangle = \sum_k \langle\theta'\varphi'|jk\rangle\hat{I}_z\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{110}$$

再一次应用公式 (94)，将 $\langle\theta\varphi|jm\rangle$ 展开后，我们得到

$$m\langle\theta\varphi|jm\rangle = \sum_k m\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)\langle\theta'\varphi'|jk\rangle = \sum_k \langle\theta'\varphi'|jk\rangle\hat{I}_z\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma). \tag{111}$$

通过比较上式的两边，我们有

$$\hat{I}_z\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\,\beta,\,\gamma) = m\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\,\beta,\,\gamma). \tag{112}$$

即 $\overline{D}^{j}_{mk}$ 亦是 $\hat{I}_z$ 的本征态，而本征值为 m 。

同理，我们还可以证明

$$\begin{aligned}
&\hat{I}_x\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\,\beta,\,\gamma)\\
=\;&\frac{1}{2}\left(\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\;\overline{D}^{j}_{(m+1)k}+\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\;\overline{D}^{j}_{(m-1)k}\right),\\
&\hat{I}_y\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\,\beta,\,\gamma)\\
=\;&\frac{1}{2i}\left(\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\;\overline{D}^{j}_{(m+1)k}-\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\;\overline{D}^{j}_{(m-1)k}\right).
\end{aligned} \tag{113}$$

利用 $\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\theta)$ 的明显表达式

$$\begin{aligned}
\overline{D}^{j}_{mk}(\alpha,\beta,\gamma) &= \exp(im\alpha)d^{j}_{mk}(\beta)\exp(ik\gamma)\\
&= \exp(im\alpha+ik\gamma)\left[(j+m)!(j-m)!(j+k)!(j-k)!\right]^{\frac{1}{2}}\\
&\times \sum_\nu \left[(-1)^\nu(j-m-\nu)!(j+k-\nu)!(\nu+m-k)!\nu!\right]^{-1}\\
&\times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j+k-m-2\nu}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m-k+2\nu},
\end{aligned} \tag{114}$$

我们可以直接验证

$$
\begin{aligned}
\hat{I}_x &= -i\hbar\left[\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\cot\beta\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}+\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right],\\
\hat{I}_y &= -i\hbar\left[\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}-\cot\beta\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}-\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right],\\
\hat{I}_z &= -i\hbar\left[\frac{\partial}{\partial\alpha}\right].
\end{aligned}
\tag{115}
$$

以及 $\hat{I}_\zeta = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\gamma}$ 。这样一来，我们也就可以很容易地写出算符

$$
\hat{I}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\right)+\frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}+2\cos\beta\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma}+\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right)\right].
\tag{116}
$$

这些结果都是我们下面要用到的。

3.2.3 对称陀螺的运动

现在，再让我们回过头来研究刚性转子的运动。我们首先研究一个简单的特例，即所谓对称陀螺的运动。此时，我们有

$$
J_\xi = J_\eta = J.
\tag{117}
$$

而陀螺的哈密顿量则可被写作

$$
\hat{H} = \frac{1}{2J}\left(\hat{I}_\xi^2+\hat{I}_\eta^2\right)+\frac{1}{2J_\zeta}\hat{I}_\zeta^2 = \frac{1}{2J}\hat{I}^2+\left(\frac{1}{2J_\zeta}-\frac{1}{2J}\right)\hat{I}_\zeta^2.
\tag{118}
$$

利用上面的结论，我们可以看出，$\overline{D}^j_{mk}(\alpha,\beta,\gamma)$ 是哈密顿量 H 的一个本征态。实际上，由于 $\hat{I}^2,\hat{I}_z$ 和 $\hat{I}_\zeta^2$ 彼此对易，并且都与 H 对易，它们构成了一组守恒量完全集。又由于

$$
\begin{aligned}
\hat{I}^2\overline{D}^I_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) &= I(I+1)\,\overline{D}^I_{MK}(\alpha,\ \beta,\ \gamma),\\
\hat{I}_\zeta\overline{D}^I_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) &= K\,\overline{D}^I_{MK}(\alpha,\beta,\gamma),
\end{aligned}
\tag{119}
$$

我们得到

$$
E_{IK} = \frac{\hbar^2}{2J}I(I+1)+\frac{\hbar^2K^2}{2}\left(\frac{1}{J_\zeta}-\frac{1}{J}\right).
\tag{120}
$$

而归一化后的完备本征态由

$$\langle\alpha,\beta,\gamma|IMK\rangle=\sqrt{\frac{2I+1}{8\pi^2}}\overline{D}^I_{MK}(\alpha,\beta,\gamma) \tag{121}$$

给出。因此，对于给定的量子数 $(I,\ K)$ ， E_{IK} 是 $2(2I+1)$ 重简并的。这其中，因子 $(2I+1)$ 是由量子数 $-I\le M\le I$ 引起的，而因子 2 则来源于关系式 $(-K)^2=K^2$ 。自然，相应于 $K=0$ 的能级的简并度为 $2I+1$ 。

当我们固定 K 值后， I 只能取值

$$I=|K|,|K|+1,\cdots \tag{122}$$

相应的诸能级则按 $I(I+1)\hbar^2$ 上升，构成一个转动带，用 K 来标记。

有时，人们也采用另外一种标记简并能级的方式，即选择它们为守恒量完全集 $\hat{I}^2,\hat{I}_z,\hat{I}_\zeta^2$ 和 $\hat{R}_\xi(\pi)$ 的共同本征态。这里 $\hat{R}_\xi(\pi)$ 被定义为

$$\hat{R}_\xi(\pi)=\exp\left[-i\pi\hat{I}_\xi\right]. \tag{123}$$

它代表绕 ξ 轴转角度 π 的旋转。显然，我们有

$$\hat{R}^2_\xi(\pi)=\exp\left[-2\pi i\hat{I}_\xi\right]=\hat{I}. \tag{124}$$

因此， $\hat{R}_\xi(\pi)$ 的本征值为 $r=\pm1$ ，称为旋称。对于这一变换，我们可以证明下面的有关它的性质

(1) $\left[\hat{I}_z,\hat{R}_\xi(\pi)\right]=0$;

(2) $\left[\hat{I}_\zeta^2,\hat{R}_\xi(\pi)\right]=0$;

(3) 在适当选取相因子后， $\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle=(-1)^I|IM(-K)\rangle$ 成立。

证：为了证明 $\left[\hat{I}_z,\exp(-i\pi\hat{I}_\xi)\right]=0$ ，我们只需证明 $\left[\hat{I}_z,\hat{I}_\xi\right]=0$ 即可。由于对于任意的 $\overline{D}^I_{MK}$ ，我们有

$$\begin{aligned}
&\left[\hat{I}_z,\ \hat{I}_\xi\right]\overline{D}^I_{MK}=\hat{I}_z\hat{I}_\xi\overline{D}^I_{MK}-\hat{I}_\xi\hat{I}_z\overline{D}^I_{MK}\\
=\ &\hat{I}_z\left[\frac{1}{2}\sqrt{I(I+1)-K(K-1)}\,\overline{D}^I_{M(K-1)}+\frac{1}{2}\sqrt{I(I+1)-K(K+1)}\,\overline{D}^I_{M(K+1)}\right]\\
-\ &\hat{I}_\xi\,M\,\overline{D}^I_{MK}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\sqrt{I(I+1)-K(K-1)}\,M\,\overline{D}^{I}_{M(K-1)} + \frac{1}{2}\sqrt{I(I+1)-K(K+1)}\,M\,\overline{D}^{I}_{M(K+1)} \\
&- \frac{1}{2}\sqrt{I(I+1)-K(K-1)}\,M\,\overline{D}^{I}_{M(K-1)} - \frac{1}{2}\sqrt{I(I+1)-K(K+1)}\,M\,\overline{D}^{I}_{M(K+1)} \\
&= 0. \qquad (125)
\end{aligned}
$$

因此，(1) 式得证。

为了证明 (2) 式，我们利用 Baker-Hausdorff 公式

$$
e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] + \cdots. \qquad (126)
$$

首先，我们有

$$
\begin{aligned}
[\hat{I}^2_\zeta,\ \hat{R}_\xi(\pi)] &= \hat{I}^2_\zeta\hat{R}_\xi(\pi) - \hat{R}_\xi(\pi)\hat{I}^2_\zeta \\
&= \hat{R}_\xi(\pi)\left(\exp(i\pi\hat{I}_\xi)\hat{I}^2_\zeta\exp(-i\pi\hat{I}_\xi)\right) - \hat{R}_\xi(\pi)\hat{I}^2_\zeta, \qquad (127)
\end{aligned}
$$

以及

$$
\exp\left(i\pi\hat{I}_\xi\right)\hat{I}^2_\zeta\exp\left(-i\pi\hat{I}_\xi\right) = \hat{I}^2_\zeta + i\pi\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right] + \frac{(i\pi)^2}{2!}\left[\hat{I}_\xi,\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right]\right] + \cdots. \qquad (128)
$$

先计算上式的第二和第三项。

$$
\begin{aligned}
&\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right] = \left[\hat{I}_\xi,\hat{I}_\zeta\right]\hat{I}_\zeta + \hat{I}_\zeta\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}_\zeta\right] = i\hat{I}_\eta\hat{I}_\zeta + i\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta = 2i\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta + \hat{I}_\xi, \\
&\left[\hat{I}_\xi,\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right]\right] = \left[\hat{I}_\xi,\ 2i\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta + \hat{I}_\xi\right] = 2i\left[\hat{I}_\xi,\ \hat{I}_\zeta\right]\hat{I}_\eta + 2i\hat{I}_\zeta\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}_\eta\right] \\
&= 2i\left(i\hat{I}_\eta\right)\hat{I}_\eta + 2i\hat{I}_\zeta\left(-i\hat{I}_\zeta\right) = 2\hat{I}^2_\zeta - 2\hat{I}^2_\eta. \qquad (129)
\end{aligned}
$$

下面，我们计算第三个交换子。

$$
\left[\hat{I}_\xi,\left[\hat{I}_\xi,\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right]\right]\right] = \left[\hat{I}_\xi, 2\hat{I}^2_\zeta - 2\hat{I}^2_\eta\right] = 2\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right] - 2\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\eta\right]. \qquad (130)
$$

注意到恒等式

$$
\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\eta\right] = \left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2 - \hat{I}^2_\xi - \hat{I}^2_\zeta\right] = -\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right], \qquad (131)
$$

我们可将上式化为

$$
\left[\hat{I}_\xi,\left[\hat{I}_\xi,\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right]\right]\right] = 4\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right] = 2^2\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}^2_\zeta\right]. \qquad (132)
$$

因此，多重交换子开始出现循环。故我们可以立刻写出展开式的如下封闭形式

$$
\begin{aligned}
& \exp\left(i\pi\hat{I}_\xi\right)\hat{I}_\zeta^2\exp\left(-i\pi\hat{I}_\xi\right) \\
= & \hat{I}_\zeta^2+(i\pi)(i2\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta+\hat{I}_\xi)+\frac{(i\pi)^2}{2!}(2\hat{I}_\zeta^2-2\hat{I}_\eta^2) \\
+ & \frac{(i\pi)^3}{3!}2^2(i2\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta+\hat{I}_\xi)+\frac{(i\pi)^4}{4!}2^2(2\hat{I}_\zeta^2-2\hat{I}_\eta^2)+\cdots \\
= & \hat{I}_\zeta^2+\frac{1}{2}\left[-\frac{(2\pi)^2}{2!}\left(\hat{I}_\zeta^2-\hat{I}_\eta^2\right)+\frac{(2\pi)^4}{4!}\left(\hat{I}_\zeta^2-\hat{I}_\eta^2\right)+\cdots\right] \\
+ & \left[-2\pi\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta+\frac{(2\pi)^3}{3!}\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta-\frac{(2\pi)^5}{5!}\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta+\cdots\right] \\
+ & \frac{i}{2}\left[2\pi\hat{I}_\xi-\frac{(2\pi)^3}{3!}\hat{I}_\xi+\frac{(2\pi)^5}{5!}\hat{I}_\xi-\cdots\right] \\
= & \hat{I}_\zeta^2+\frac{1}{2}\cos 2\pi\left(\hat{I}_\zeta^2-\hat{I}_\eta^2\right)-\frac{1}{2}\left(\hat{I}_\zeta^2-\hat{I}_\eta^2\right)-\sin 2\pi(\hat{I}_\zeta\hat{I}_\eta)+\frac{i}{2}\sin 2\pi\hat{I}_\xi \\
= & \hat{I}_\zeta^2.
\end{aligned}
\tag{133}
$$

因此，我们得到

$$
\left[\hat{I}_\zeta^2,\ \hat{R}_\xi(\pi)\right]=\hat{R}_\xi(\pi)\hat{I}_\zeta^2-\hat{R}_\xi(\pi)\hat{I}_\zeta^2=0. \tag{134}
$$

最后，我们证明

$$
\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle=(-1)^I|IM,\ -K\rangle. \tag{135}
$$

根据定义，我们有

$$
\hat{I}_\zeta\left[\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle\right]=\hat{I}_\zeta\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle=\hat{R}_\xi(\pi)\left(\hat{R}_\xi(-\pi)\hat{I}_\zeta\hat{R}_\xi(\pi)\right)|IMK\rangle. \tag{136}
$$

利用 Baker-Hausdorff 公式，我们可计算括号内的乘积。

$$
\begin{aligned}
& \hat{R}_\xi(-\pi)\hat{I}_\zeta\hat{R}_\xi(\pi) \\
= & \exp\left(i\pi\hat{I}_\xi\right)\hat{I}_\zeta\exp\left(-i\pi\hat{I}_\xi\right) \\
= & \hat{I}_\zeta+i\pi\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}_\zeta\right]+\frac{1}{2!}(i\pi)^2\left[\hat{I}_\xi,\left[\hat{I}_\xi,\hat{I}_\zeta\right]\right]+\cdots \\
= & \hat{I}_\zeta+(i\pi)(i\hat{I}_\eta)+\frac{1}{2!}(i\pi)^2\left[\hat{I}_\xi,i\hat{I}_\eta\right]+\cdots
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \hat{I}_\zeta - \pi \hat{I}_\eta + \frac{1}{2!}(-\pi^2) i(-i)\hat{I}_\zeta + \cdots \\
&= \left(\hat{I}_\zeta - \frac{1}{2!}(\pi^2)\hat{I}_\zeta + \frac{1}{4!}(\pi^4)\hat{I}_\zeta + \cdots\right) - \left(\pi\hat{I}_\eta - \frac{\pi^3}{3!}\hat{I}_\eta + \frac{\pi^5}{5!}\hat{I}_\eta + \cdots\right) \\
&= \cos\pi\hat{I}_\zeta - \sin\pi\hat{I}_\eta \\
&= -\hat{I}_\zeta. \qquad (137)
\end{aligned}
$$

因此，我们有

$$
\hat{I}_\zeta\left[\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle\right] = -\hat{R}_\xi(\pi)\hat{I}_\zeta|IMK\rangle = -K\left[\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle\right], \qquad (138)
$$

即 $\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle$ 正比于 $|IM(-K)\rangle$ 。又由于

$$
\langle IMK|\hat{R}_\xi^\dagger(\pi)\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle = \langle IMK|IMK\rangle = 1, \qquad (139)
$$

我们必有 $\hat{R}_\xi(\pi)|IMK\rangle = \exp^{i\alpha}|IM(-K)\rangle$ 。适当地选取相因子后，我们可令 $e^{i\alpha} = (-1)^I$ 。

现在我们定义如下的态

$$
\begin{aligned}
|IMK, +1\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|IMK\rangle + (-1)^I|IM(-K)\rangle\right), \\
|IMK, -1\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|IMK\rangle - (-1)^I|IM(-K)\rangle\right). \qquad (140)
\end{aligned}
$$

可以证明，这些态满足公式 $\hat{R}_\xi(\pi)|IMK, r\rangle = r|IMK, r\rangle$ 。它们的引入，对于转动带的研究很有好处。当 $K=0$ 时，只有一个转动带. 而当 $K\neq 0$ 时，转动能级 K 由于某些微扰相互作用，又可劈裂为两条。一条由

$$
I = K,\ K+2,\ K+4, \cdots \qquad (141)
$$

决定，而另外一条则由量子数

$$
I = K+1,\ K+3,\ K+5, \cdots \qquad (142)
$$

来标志。其中一条具有偶旋称，而另一条具有奇旋称。

3.2.4 非对称陀螺的转动谱

此时，体系的哈密顿量为

$$H = \alpha_1 \hat{I}_\xi^2 + \alpha_2 \hat{I}_\eta^2 + \alpha_3 \hat{I}_\zeta^2, \quad \alpha_i = \hbar^2/2J_i. \tag{143}$$

对于此哈密顿量， $[I_\zeta, H] \neq 0$ 。因此， K 不再是一个好量子数。但我们总可以取 $\{|IMK,\, r\rangle\}$ 为一组基底，而将 H 的本征态按其做展开，即

$$\psi_{IM,\, r} = \sum_{K \geq 0} A_K |IMK,\, r\rangle. \tag{144}$$

这里 $\{A_K\}$ 为展开系数。首先，我们将哈密顿量 H 改写为

$$\begin{aligned} H &= \left[\frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2)(\hat{I}^2 - \hat{I}_\zeta^2) + \alpha_3 \hat{I}_\zeta^2 + \frac{1}{2}(\alpha_1-\alpha_2)(\hat{I}_\xi^2 - \hat{I}_\eta^2)\right] \\ &= \left[\frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2)(\hat{I}^2 - \hat{I}_\zeta^2) + \alpha_3 \hat{I}_\zeta^2 + \frac{1}{4}(\alpha_1-\alpha_2)(\hat{I}_+^2 + \hat{I}_-^2)\right]. \end{aligned} \tag{145}$$

其中， $\hat{I}_+ = \hat{I}_\xi + i\hat{I}_\eta,\, \hat{I}_- = \hat{I}_\xi - i\hat{I}_\eta$ 。因此，对角元可以写作

$$\langle IMK|H|IMK\rangle = \frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2)\left[I(I+1) - K^2\right] + \alpha_3 K^2, \tag{146}$$

而 H 的非对角元则由下面的公式决定

$$\begin{aligned} & \langle IM(K+2)|H|IMK\rangle \\ = \ & \frac{1}{4}(\alpha_1-\alpha_2)\sqrt{I(I+1)-K(K+1)}\sqrt{I(I+1)-(K+1)(K+2)}, \\ & \langle IM(K-2)|H|IMK\rangle \\ = \ & \frac{1}{4}(\alpha_1-\alpha_2)\sqrt{I(I+1)-K(K-1)}\sqrt{I(I+1)-(K-1)(K-2)}. \end{aligned} \tag{147}$$

例 3.2.1(**教科书** 253 **页上的例题**): 计算 $I^\pi = 2^+$ 的能级。

解: 此时， K 的取值当为 0 和 2 。因此，相应的波函数可被写作

$$\psi_{2M,+} = A_0|2M0,\, +1\rangle + A_2|2M2,\, +1\rangle. \tag{148}$$

同时，需要计算的哈密顿量具有形式

$$H = \begin{pmatrix} \langle 2M0,\, +1|H|2M0,\, +1\rangle & \langle 2M0,\, +1|H|2M2,\, +1\rangle \\ \langle 2M2,\, +1|H|2M0,\, +1\rangle & \langle 2M2,\, +1|H|2M2,\, +1\rangle \end{pmatrix}. \tag{149}$$

先来计算对角元。由于 $|2M0,\ +1\rangle = |2M0\rangle$, 我们有

$$\langle 2M0,\ +1|H|2M0,\ +1\rangle = \frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2)(2\times 3) = 3(\alpha_1+\alpha_2). \tag{150}$$

又由于

$$|2M2,\ +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2M2\rangle + (-1)^{I=2}|2M(-2)\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2M2\rangle + |2M(-2)\rangle\right), \tag{151}$$

我们得到

$$\langle 2M2,\ +1|H|2M2,\ +1\rangle = \frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2)(2\times 3-2^2) + 2^2\alpha_3 = (\alpha_1+\alpha_2) + 4\alpha_3. \tag{152}$$

现在，我们计算非对角矩阵元

$$\begin{aligned}
&\langle 2M2,\ +1|H|2M0,\ +1\rangle \\
=\ & \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 2M2|H|2M0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 2M(-2)|H|2M0\rangle \\
=\ & \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{4}(\alpha_1-\alpha_2)\sqrt{(2\times 3)[(2\times 3)-(1\times 2)]}\right] \\
+\ & \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{4}(\alpha_1-\alpha_2)\sqrt{(2\times 3)[(2\times 3)-(-1)(-2)]}\right] \\
=\ & \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{2}(\alpha_1-\alpha_2)\sqrt{6\times 4} = \sqrt{3}(\alpha_1-\alpha_2).
\end{aligned} \tag{153}$$

由于 H 的厄密性，我们可直接得到

$$\langle 2M0,\ +1|H|2M2,\ +1\rangle = \sqrt{3}(\alpha_1-\alpha_2). \tag{154}$$

因此，哈密顿量可最后写为

$$H = \begin{pmatrix} 3(\alpha_1+\alpha_2) & \sqrt{3}(\alpha_1-\alpha_2) \\ \sqrt{3}(\alpha_1-\alpha_2) & (\alpha_1+\alpha_2)+4\alpha_3 \end{pmatrix}. \tag{155}$$

其本征值由方程

$$\mathrm{Det}(H-\lambda I) = \begin{vmatrix} 3(\alpha_1+\alpha_2)-\lambda & \sqrt{3}(\alpha_1-\alpha_2) \\ \sqrt{3}(\alpha_1-\alpha_2) & (\alpha_1+\alpha_2)+4\alpha_3-\lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{156}$$

给出。解方程

$$\begin{aligned}
& [(3(\alpha_1+\alpha_2)-\lambda)((\alpha_1+\alpha_2+4\alpha_3)-\lambda)]-3(\alpha_1-\alpha_2)^2 \\
= & \ 3(\alpha_1+\alpha_2)(\alpha_1+\alpha_2+4\alpha_3)+\lambda^2-4(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\lambda-3(\alpha_1-\alpha_2)^2=0, \quad (157)
\end{aligned}$$

我们得到两个解

$$E_\pm = 2\left((\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\pm\sqrt{(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)^2-3(\alpha_1\alpha_2+\alpha_1\alpha_3+\alpha_2\alpha_3)}\right). \quad (158)$$

这些就是我们所要求的能级。

\$ 3.3 **不可约张量算符和** Wigner-Eckart **定理**

3.3.1 **不可约张量算符**

上面，我们研究了在转动 $\hat{\rho}$ 的作用下，体系角动量的本征态 $\{\psi_{jm}\}$ 的变换规律。我们有

$$\hat{\mathcal{R}}\psi_{jm} = \sum_{m'} D^j_{m'm}(\hat{\mathcal{R}})\psi_{jm'}. \quad (159)$$

另一方面，我们知道三维空间的全部转动构成一个群，称为 $SO(3)$ 群，即

(i) 若 $\hat{\rho}_1 \in SO(3), \rangle \hat{\rho}_2 \in SO(3)$, 则 $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1\hat{\rho}_2 \in SO(3)$;

(ii) 对任意 $\hat{\rho}$, 存在 $\hat{\rho}^{-1}$, 使得 $\hat{\rho}\hat{\rho}^{-1} = \hat{\rho}^{-1}\hat{\rho} = \hat{I}$;

(iii) $\hat{\rho}_1(\hat{\rho}_2\hat{\rho}_3) = (\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2)\hat{\rho}_3$ 成立。

我们可以证明 $\{D^j_{m'm}(R)\}$ 是 $SO(3)$ 的一个 j 阶表示，即我们有

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{R}}_1\hat{\mathcal{R}}_2\psi_{jm} &= \hat{\mathcal{R}}_1\left(\sum_{m'} D^j_{m'm}(\hat{\mathcal{R}}_2)\psi_{jm'}\right) = \sum_{m'} D^j_{m'm}(\hat{\mathcal{R}}_2)\left(\hat{\mathcal{R}}_1\psi_{jm'}\right) \\
&= \sum_{m''}\left(\sum_{m'} D^j_{m''m'}(\hat{\mathcal{R}}_1)D^j_{m'm}(\hat{\mathcal{R}}_2)\right)\psi_{jm''} = \sum_{m''} D^j_{m''m}(\hat{\mathcal{R}}_1\hat{\mathcal{R}}_2)\psi_{jm''}. \quad (160)
\end{aligned}$$

我们可进一步证明， D^j 是 $SO(3)$ 的一个 $2j+1$ 维不可约表示。下面，我们要利用到如下的逆定理：设有 $2j+1$ 个函数，在转动作用下，按照方程 (159) 变换则它们必是角动量 $\hat{J}^2$ 的本征函数，其本征值为 $J(J+1)$ 。

与上述关于函数在转动下变换相应的是，有时候人们可以找到 $2j+1$ 个算符 $\{\hat{T}^j_m, -j \le m \le j\}$ 。在 $\hat{\rho}$ 的作用下，它们也按照 D^j 函数变换，即我们有：

$$\hat{\mathcal{R}}\hat{T}^j_m\hat{\mathcal{R}}^{-1} = \sum_{m'=-j}^{j} D^j_{m'm}(\hat{\mathcal{R}})\hat{T}^j_{m'}. \quad (161)$$

它们被称为一组不可约张量算符。

例 3.3.1: 以角动量算符 $\hat{J}=(\hat{J}_x,\ \hat{J}_y,\ \hat{J}_z)$ 为例。定义：

$$\hat{T}_1^1=-\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)=-\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{J}_+,\ \ \hat{T}_0^1=\hat{J}_z,\ \ \hat{T}_{-1}^1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{J}_x-i\hat{J}_y)=\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{J}_-. \tag{162}$$

我们要证明，在转动变换 $\mathcal{R}$ 的作用下，它们按照 D^1 表示变换。为此我们注意到，恒等式

(i) $e^{-i\theta\hat{J}_z}\hat{J}_+e^{i\theta\hat{J}_z}=e^{-i\theta}\hat{J}_+,\ \ e^{-i\theta\hat{J}_z}\hat{J}_-e^{i\theta\hat{J}_z}=e^{i\theta}\hat{J}_-$,

(ii) $e^{-i\theta\hat{J}_y}\hat{J}_xe^{i\theta\hat{J}_y}=\cos\theta\hat{J}_x-\sin\theta\hat{J}_z$

成立。

证: 这里，我们只证明第三个公式。按照 Baker-Hansdorff 公式，我们有

$$\begin{aligned}
e^{-i\theta\hat{J}_y}\hat{J}_xe^{i\theta\hat{J}_y} &= \hat{J}_x+[-i\theta\hat{J}_y,\hat{J}_x]+\frac{1}{2!}[-i\theta\hat{J}_y,\left[-i\theta\hat{J}_y,\hat{J}_x\right]]+\cdots\\
&= \hat{J}_x-\theta\hat{J}_z+\left(-\frac{\theta^2}{2!}\right)\hat{J}_x+\ldots\\
&= \hat{J}_x-\theta\hat{J}_z+\left(-\frac{\theta^2}{2!}\right)\hat{J}_x+\frac{\theta^3}{3!}\hat{J}_z+\cdots\\
&= \left(1-\frac{\theta^2}{2!}+\frac{\theta^4}{4!}+\cdots\right)\hat{J}_x+\left(-\theta+\frac{\theta^3}{3!}-\frac{\theta^5}{5!}+\cdots\right)\hat{J}_z\\
&= \cos\theta\hat{J}_x-\sin\theta\hat{J}_z.
\end{aligned} \tag{163}$$

证毕。

利用这些公式，我们先来计算 $\hat{\mathcal{R}}\hat{T}_1^1\hat{\mathcal{R}}^{-1}$ 。我们有

$$\begin{aligned}
&\hat{\mathcal{R}}\hat{T}_1^1\hat{\mathcal{R}}^{-1}\\
=\ &\left(\frac{-1}{\sqrt{2}}\right)\hat{\mathcal{R}}\hat{J}_+\hat{\mathcal{R}}^{-1}=\left(\frac{-1}{\sqrt{2}}\right)e^{-i\alpha\hat{J}_z}e^{-i\beta\hat{J}_y}e^{-i\gamma\hat{J}_z}\hat{J}_+e^{i\gamma\hat{J}_z}e^{i\beta\hat{J}_y}e^{i\alpha\hat{J}_z}\\
=\ &\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)e^{-i\gamma}\left[e^{-i\alpha\hat{J}_z}\left(e^{-i\beta\hat{J}_y}\hat{J}_+e^{i\beta\hat{J}_y}\right)e^{i\alpha\hat{J}_z}\right]\\
=\ &\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)e^{-i\gamma}\left[e^{-i\alpha\hat{J}_z}\left(e^{-i\beta\hat{J}_y}(\hat{J}_x+i\hat{J}_y)e^{i\beta\hat{J}_y}\right)e^{i\alpha\hat{J}_z}\right]\\
=\ &\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)e^{-i\gamma}\left[e^{-i\alpha\hat{J}_z}\left(\cos\beta\hat{J}_x-\sin\beta\hat{J}_z+i\hat{J}_y\right)e^{i\alpha\hat{J}_z}\right]\\
=\ &\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)e^{-i\gamma}\left[e^{-i\alpha\hat{J}_z}\left(\frac{1}{2}\cos\beta\hat{J}_++\frac{1}{2}\cos\beta\hat{J}_--\sin\beta\hat{J}_z+\frac{1}{2}\hat{J}_+-\frac{1}{2}\hat{J}_-\right)e^{i\alpha\hat{J}_z}\right]
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) e^{-i\gamma}\left[\left(\frac{1}{2}\cos\beta+\frac{1}{2}\right)e^{-i\alpha}\hat{J}_+ - \sin\beta\hat{J}_z + e^{i\alpha}\left(\frac{1}{2}\cos\beta-\frac{1}{2}\right)\hat{J}_-\right] \\
&= \frac{1}{2}(1+\cos\beta)e^{-i\alpha}e^{-i\gamma}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{J}_+\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\gamma}\sin\beta\hat{J}_z + \frac{1}{2}(1-\cos\beta)e^{i\alpha}e^{-i\gamma}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{J}_-\right) \\
&= \frac{1}{2}(1+\cos\beta)e^{-i\alpha}e^{-i\gamma}\,\hat{T}^1_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\gamma}\sin\beta\,\hat{T}^1_0 + \frac{1}{2}(1-\cos\beta)e^{i\alpha}e^{-i\gamma}\,\hat{T}^1_{-1}. \qquad (164)
\end{aligned}
$$

将上式的展开系数与教科书 242 页上表 7.2 中的系数相比较，我们即可看到

$$\hat{\mathcal{R}}\hat{T}^1_1\hat{\mathcal{R}}^{-1} = D^1_{11}\hat{T}^1_1 + D^1_{01}\hat{T}^1_0 + D^1_{(-1)1}\hat{T}^1_{-1}. \qquad (165)$$

类似地，我们亦可证明，

$$\hat{\mathcal{R}}\hat{T}^1_0\hat{\mathcal{R}}^{-1} = \sum_{m'=-1}^{1} D^1_{m'0}\hat{T}^1_{m'}, \quad \hat{R}\hat{T}^1_{-1}\hat{R}^{-1} = \sum_{m'=-1}^{1} D^1_{m'(-1)}\hat{T}^1_{m'}. \qquad (166)$$

因此，我们定义的算符组 $(\hat{T}^1_1, \hat{T}^1_0, \hat{T}^1_{-1})$ 的确是一组不可约张量算符。

特别是，若某一算符 $\hat{F}$ 在 $\mathcal{R}$ 的作用下，按下式变换

$$\hat{\mathcal{R}}\hat{F}\hat{\mathcal{R}}^{-1} = \hat{F}, \qquad (167)$$

即 $[\hat{\mathcal{R}}, \hat{F}] = 0$ ，我们称其为标量算符。

当我们有了两组不可约张量算符 $\{\hat{T}^{j_1}_{q_1}\}$ 和 $\{\hat{T}^{j_2}_{q_2}\}$ 时，可以定义它们的张量积为

$$\hat{T}^j_q = \sum_{q_1=-j_1}^{j_1} \langle j_1 q_1, j_2(q-q_1)|jq\rangle \hat{T}^{j_1}_{q_1}\hat{T}^{j_2}_{q-q_1}, \qquad (168)$$

其中量子数 j 满足条件 $|j_1-j_2| \le j \le j_1+j_2$ 。我们要证明， $\{\hat{T}^j_q\}$ 也是一组不可约张量算符，记作 $[T^{j_1}\times T^{j_2}]^j_q$ 。

证：按照定义，让我们来考察 $\hat{R}\hat{T}^j_q\hat{R}^{-1}$ 。

$$
\begin{aligned}
&\hat{\mathcal{R}}\hat{T}^j_q\hat{\mathcal{R}}^{-1} \\
&= \sum_{q_1=-j_1}^{j_1} \langle j_1 q_1, j_2(q-q_1)|jq\rangle (\hat{R}\hat{T}^{j_1}_{q_1}\hat{R}^{-1})(\hat{R}\hat{T}^{j_2}_{q-q_1}\hat{R}^{-1}) \\
&= \sum_{q_1=-j_1}^{j_1} \langle j_1 q_1, j_2(q-q_1)|jq\rangle \left(\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} D^{j_1}_{m_1 q_1}\hat{T}^{j_1}_{m_1}\right)\left(\sum_{m_2=-j_2}^{j_2} D^{j_2}_{m_2(q-q_1)}\hat{T}^{j_2}_{m_2}\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{q_1}\sum_{m_1}\sum_{m_2}\langle j_1q_1, j_2(q-q_1)|jq\rangle\left(D^{j_1}_{m_1q_1}D^{j_2}_{m_2(q-q_1)}\right)\hat{T}^{j_1}_{m_1}\hat{T}^{j_2}_{m_2} \\
&= \sum_{q_1}\sum_{m_1}\sum_{m_2}\langle j_1q_1, j_2(q-q_1)|jq\rangle\left(\sum_J\langle j_1m_1, j_2m_2|J(m_1+m_2)\rangle\right. \\
&\times \left.\langle j_1q_1, j_2(q-q_1)|Jq\rangle D^J_{(m_1+m_2)q}\right)\hat{T}^{j_1}_{m_1}\hat{T}^{j_2}_{m_2} \\
&= \sum_J\sum_{m_1}\sum_{m_2}\left[\sum_{q_1}\langle j_1q_1, j_2(q-q_1)|jq\rangle\langle j_1q_1, j_2(q-q_1)|Jq\rangle\right] \\
&\times \langle j_1m_1, j_2m_2|J(m_1+m_2)\rangle D^J_{(m_1+m_2)q}\hat{T}^{j_1}_{m_1}\hat{T}^{j_2}_{m_2} \\
&= \sum_J\sum_{m_1}\sum_{m_2}\delta_{jJ}\langle j_1m_1, j_2m_2|J(m_1+m_2)\rangle D^J_{(m_1+m_2)q}\hat{T}^{j_1}_{m_1}\hat{T}^{j_2}_{m_2} \\
&= \sum_{m_1}\sum_{m_2}\langle j_1m_1, j_2m_2|j(m_1+m_2)\rangle D^j_{(m_1+m_2)q}\hat{T}^{j_1}_{m_1}\hat{T}^{j_2}_{m_2}. \qquad (169)
\end{aligned}
$$

令 $m_1+m_2=m$ ，则 $m_2=m-m_1$ 。我们进一步得到

$$
\hat{\mathcal{R}}\hat{T}^j_q\hat{\mathcal{R}}^{-1} = \sum_m\left[\sum_{m_1}\langle j_1m_1, j_2(m-m_1)|jm\rangle\hat{T}^{j_1}_{m_1}\hat{T}^{j_2}_{m-m_1}\right]D^j_{mq} = \sum_m D^j_{mq}\hat{T}^j_m. \qquad (170)
$$

也就是说，$\left[\hat{T}^{j_1}\times\hat{T}^{j_2}\right]^j$ 的确是一个 j 阶不可约张量算符组。

对于一个不可约张量算符组 $\{\hat{T}^j_m\}$，我们可以定义其内积为

$$
(\hat{T}^j, \hat{T}^j) \equiv \sum_{m=-j}^{j}(-1)^{-m}\hat{T}^j_m\hat{T}^j_{-m}. \qquad (171)
$$

利用叉乘的定义，我们注意到

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{T}^j\times\hat{T}^j\right]^{J=0} &= \sum_m\langle jm, j(-m)|00\rangle\hat{T}^j_m\hat{T}^j_{-m} = \sum_m\frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}\hat{T}^j_m\hat{T}^j_{-m} \\
&= \frac{(-1)^j}{\sqrt{2j+1}}\sum_m(-1)^{-m}\hat{T}^j_m\hat{T}^j_{-m} = \frac{(-1)^j}{\sqrt{2j+1}}(\hat{T}^j, \hat{T}^j). \qquad (172)
\end{aligned}
$$

即 $\hat{T}^j$ 的内积与 $\left[\hat{T}^j\times\hat{T}^j\right]^{J=0}$ 仅差一个常数因子。因此，$\hat{T}^j$ 的内积是一个 $J=0$ 的不可约张量算符，即标量算符。这一事实我们下面要用到。

显然，若两组算符 $\{\hat{T}^j\}$ 和 $\{\hat{U}^j\}$ 具有相同的阶，我们也可定义它们的内积。作为一个特例，让我们考察 $\hat{\mathbf{L}}=(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ 和 $\hat{\mathbf{S}}=(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ 的内积。首先，我们有

$$
\hat{L}^1_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{L}_x+i\hat{L}_y), \quad \hat{L}^1_0 = \hat{L}_z, \quad \hat{L}^1_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{L}_x-i\hat{L}_y), \qquad (173)
$$

和

$$\hat{S}_1^1=-\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S}_x+i\hat{S}_y),\quad \hat{S}_0^1=\hat{S}_z,\quad \hat{S}_{-1}^1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S}_x-i\hat{S}_y). \tag{174}$$

因此，按定义我们有

$$\begin{aligned}
&(\hat{\mathbf{L}},\,\hat{\mathbf{S}})\\
=\;&(-1)^{(-1)}\left(\frac{-1}{\sqrt{2}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\hat{L}_+^1\hat{S}_-^1+(-1)^0\hat{L}_z\hat{S}_z+(-1)^1\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\left(\frac{-1}{\sqrt{2}}\right)\hat{L}_-\hat{S}_+\\
=\;&\hat{L}_x\hat{S}_x+\hat{L}_y\hat{S}_y+\hat{L}_z\hat{S}_z=\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}.
\end{aligned}\tag{175}$$

因此，现在定义的内积与通常定义下的内积是完全一致的。

上述有关不可约张量算符组的定义，在实际工作中运用起来不大方便。为此我们引入下面的等价形式。当体系绕 $\mathbf{n}$ 轴旋转一个无穷小角度 δ 时，$\hat{R}(\mathbf{n},\delta)$ 可被近似地写作

$$\hat{R}(\mathbf{n},\,\delta)=\exp(-i\delta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}})\cong 1-i\delta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}. \tag{176}$$

因此，我们有

$$\begin{aligned}
\hat{R}(\mathbf{n},\,\delta)\hat{T}_q^j\hat{R}^\dagger(\mathbf{n},\,\delta)\;&\cong\;(1-i\delta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}})\hat{T}_q^j(1+i\delta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}})=\hat{T}_q^j-i\delta\left[\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}},\,\hat{T}_q^j\right]+O(\delta^2)\\
&=\;\sum_{q'}\langle jq'|\hat{R}(\mathbf{n},\,\delta)|jq\rangle\,\hat{T}_{q'}^j\cong\sum_{q'}\langle jq'|1-i\delta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}|jq\rangle\,\hat{T}_{q'}^j\\
&=\;\hat{T}_q^j-i\delta\sum_{q'}\langle jq'|\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}|jq\rangle\,\hat{T}_{q'}^j,
\end{aligned}\tag{177}$$

或是

$$\left[\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}},\,\hat{T}_q^j\right]+O(\delta)\cong\sum_{q'}\langle jq'|\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}|jq\rangle\,\hat{T}_{q'}^j. \tag{178}$$

取极限 $\delta\to 0$ 后，我们得到

$$\left[\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}},\,\hat{T}_q^j\right]=\sum_{q'}\langle jq'|\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}|jq\rangle\,\hat{T}_{q'}^j. \tag{179}$$

现在，我们考虑几种特殊情况。

1. 令 $\mathbf{n}$ 为 z 轴方向，则我们得到

$$\left[\hat{J}_z,\,\hat{T}_q^j\right]=\sum_{q'}\langle jq'|\hat{J}_z|jq\rangle\,\hat{T}_{q'}^j=q\,\hat{T}_q^j. \tag{180}$$

2. 令 $\mathbf{n}$ 为 x 轴和 y 轴方向，我们得到

$$\left[\hat{J}_x, \hat{T}^j_q\right] = \sum_{q'} \langle jq'|\hat{J}_x|jq\rangle\, \hat{T}^j_{q'}, \quad \left[\hat{J}_y, \hat{T}^j_q\right] = \sum_{q'} \langle jq'|\hat{J}_y|jq\rangle\, \hat{T}^j_{q'}. \tag{181}$$

从这两式，我们进一步得到

$$\begin{aligned}\left[\hat{J}_+,\, \hat{T}^j_q\right] &= \sum_{q'} \langle jq'|\hat{J}_+|jq\rangle\, \hat{T}^j_{q'} = \sqrt{j(j+1) - q(q+1)}\, \hat{T}^j_{q+1}, \\ \left[\hat{J}_-,\, \hat{T}^j_q\right] &= \sum_{q'} \langle jq'|\hat{J}_-|jq\rangle\, \hat{T}^j_{q'} = \sqrt{j(j+1) - q(q-1)}\, \hat{T}^j_{q-1}.\end{aligned} \tag{182}$$

这些公式与张量算符组的原始定义是完全等价的。

上面，我们讨论了波函数与波函数的耦合以及算符与算符的耦合。下面，让我们再来研究一下算符与波函数的耦合。首先，我们定义

$$\widetilde{\psi}_{jm} = \sum_q \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle\ \hat{T}^{j_1}_q |j_2(m-q)\rangle, \ \ |j_1 - j_2| \le j \le j_1 + j_2. \tag{183}$$

我们要证明 $\widetilde{\psi}_{jm}$ 是算符 $(\hat{J}^2, \hat{J}_z)$ 的一个共同本征函数 (可能不归一化) 。

证：首先考察 $\hat{J}_z|\widetilde{\psi}_{jm}\rangle$ 。

$$\begin{aligned}&\hat{J}_z|\widetilde{\psi}_{jm}\rangle = \sum_q \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle\ \hat{J}_z \hat{T}^{j_1}_q |j_2(m-q)\rangle \\ = &\ \sum_q \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle \left[\hat{J}_z,\, \hat{T}^{j_1}_q\right] |j_2(m-q)\rangle \\ + &\ \sum_q \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle\ \hat{T}^{j_1}_q \hat{J}_z |j_2(m-q)\rangle \\ = &\ \sum_q \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle\ (q + (m-q))\ \hat{T}^{j_1}_q |j_2(m-q)\rangle \\ = &\ m|\widetilde{\psi}_{jm}\rangle,\end{aligned} \tag{184}$$

即 $|\widetilde{\psi}_{jm}\rangle$ 是 $\hat{J}_z$ 的本征态，本征值为 m 。

为了证明 $\widetilde{\psi}_{jm}$ 亦是 $\hat{J}^2$ 的本征态，我们可以利用上面的对易关系，但工作量较大。一个巧妙的办法是证明 $\{\widetilde{\psi}_{jm}\}$ 在转动下按 $\{D^j\}$ 做变换，因此它们必是 $\hat{J}^2$ 的本征态，且本征值为 $j(j+1)$ 。按照定义，我们有

$$\hat{\mathcal{R}}\widetilde{\psi}_{jm}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_q \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle (\hat{\mathcal{R}}\hat{T}_q^{j_1}\hat{\mathcal{R}}^{-1})\hat{\mathcal{R}}|j_2(m-q)\rangle \\
&= \sum_q \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle \left(\sum_{q'} D_{q'q}^{j_1}\hat{T}_{q'}^{j_1}\right)\left(\sum_{m'} D_{m'(m-q)}^{j_2}|j_2m'\rangle\right) \\
&= \sum_q\sum_{q'}\sum_{m'} \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle D_{q'q}^{j_1}D_{m'(m-q)}^{j_2}\ \hat{T}_{q'}^{j_1}|j_2m'\rangle \\
&= \sum_q\sum_{q'}\sum_{m'} \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle\ \hat{T}_{q'}^{j_1}|j_2m'\rangle \\
&\times \sum_J \langle j_1 q', j_2m'|J(q'+m')\rangle\langle j_1 q, j_2(m-q)|Jm\rangle D_{(q'+m')m}^J \\
&= \sum_{q'}\sum_{m'}\sum_J \left(\sum_q \langle j_1 q, j_2(m-q)|jm\rangle\langle j_1 q, j_2(m-q)|Jm\rangle\right) \\
&\times \langle j_1 q', j_2m'|J(q'+m')\rangle\ D_{(q'+m')m}^J\ \hat{T}_{q'}^{j_1}|j_2m'\rangle \\
&= \sum_{q'}\sum_{m'}\sum_J \delta_{jJ}\langle j_1 q', j_2m'|J(q'+m')\rangle D_{(q'+m')m}^J\hat{T}_{q'}^{j_1}|j_2m'\rangle \\
&= \sum_{q'}\sum_{m'} \langle j_1 q', j_2m'|j(q'+m')\rangle D_{(q'+m')m}^j\hat{T}_{q'}^{j_1}|j_2m'\rangle.
\end{aligned} \tag{185}
$$

令 $q'+m'=n$ 后，我们得到

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathcal{R}}\widetilde{\psi}_{jm} &= \sum_n\sum_{q'} \langle j_1 q', j_2(n-q')|jn\rangle D_{nm}^j\hat{T}_{q'}^{j_1}|j_2(n-q')\rangle \\
&= \sum_n D_{nm}^j\widetilde{\psi}_{jn}.
\end{aligned} \tag{186}
$$

这就是我们要证明的。

3.3.2 Wigner-Eckart **定理**

下面，我们用以上结果来证明 Wigner-Eckart 定理。

定理 3.3.2: 令 $\{\hat{T}_q^{j_2}\}$ 为一组 j_2 阶张量算符，则我们有

$$
\langle\widetilde{\alpha}' j_1 m'|\hat{T}_q^{j_2}|\widetilde{\alpha} j_3 m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}\langle j_2 q, j_3 m|j_1 m'\rangle\langle\widetilde{\alpha}' j_1\|\hat{T}^{j_2}\|\widetilde{\alpha} j_3\rangle. \tag{187}
$$

这里 $\langle\widetilde{\alpha}' j_1\|\hat{T}^{j_2}\|\widetilde{\alpha} j_3\rangle$ 称为 $\hat{T}^{j_2}$ 的约化矩阵，它不依赖于磁量子数 m', m 和 q 。

这一定理表明，不可约张量算符 T_q^j 的矩阵元对磁量子数的依赖关系，完全由一个 C.-G. 系数决定。

证：我们从恒等式

$$\int d\Omega \hat{\mathcal{R}}^{-1}(\Omega)\hat{\mathcal{R}}(\Omega) = \int d\Omega \hat{I} = 8\pi^2 \hat{I} \tag{188}$$

出发。取上式两边的矩阵元后有

$$\int d\Omega \langle\widetilde{\alpha}' j_1 m'|\hat{\mathcal{R}}^{-1}(\alpha,\beta,\gamma)\hat{\mathcal{R}}(\alpha,\beta,\gamma)|\widetilde{\psi}_{jm}(\widetilde{\alpha})\rangle = 8\pi^2\langle\widetilde{\alpha}' j_1 m'|\widetilde{\psi}_{jm}(\widetilde{\alpha})\rangle. \tag{189}$$

上式的左边可进一步写为

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega\langle\widetilde{\alpha}' j_1 m'|\hat{\mathcal{R}}^{\dagger}\hat{\mathcal{R}}|\widetilde{\psi}_{jm}(\widetilde{\alpha})\rangle \\
= & \sum_n\sum_{n'}\int\int\int \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma \overline{D}^{j_1}_{n'm'}(\alpha,\beta,\gamma)D^{j}_{nm}(\alpha,\beta,\gamma)\langle\widetilde{\alpha}' j_1 n'|\widetilde{\psi}_{jn}(\widetilde{\alpha})\rangle \\
= & \sum_n\sum_{n'}\frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{j_1,j}\delta_{n',n}\delta_{m',m}\langle\widetilde{\alpha}' j_1 n'|\widetilde{\psi}_{j_1 n}(\widetilde{\alpha})\rangle \\
= & \sum_n \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{j_1,j}\delta_{m',m}\langle\widetilde{\alpha}' j_1 n|\widetilde{\psi}_{j_1 n}(\widetilde{\alpha})\rangle.
\end{aligned} \tag{190}$$

现在，我们再考虑方程 (189) 的右边。

$$8\pi^2\langle\widetilde{\alpha}', j_1 m'|\widetilde{\psi}_{jm}(\widetilde{\alpha})\rangle = 8\pi^2\sum_q\langle j_2 q, j_3(m-q)|jm\rangle\langle\widetilde{\alpha}', j_1 m'|\hat{T}^{j_2}_q|\widetilde{\alpha}, j_3(m-q)\rangle. \tag{191}$$

因此，我们有

$$\begin{aligned}
& \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{j_1,j}\delta_{m',m}\sum_n\langle\widetilde{\alpha}', j_1 n|\widetilde{\psi}_{j_1 n}(\widetilde{\alpha})\rangle \\
= & \; 8\pi^2\sum_q\langle j_2 q, j_3(m-q)|jm\rangle\langle\widetilde{\alpha}', j_1 m'|\hat{T}^{j_2}_q|\widetilde{\alpha}, j_3(m-q)\rangle.
\end{aligned} \tag{192}$$

我们要从此方程中解出 $\langle\widetilde{\alpha}', j_1 m'|\hat{T}^{j_2}_q|\widetilde{\alpha}, j_3\widetilde{m}\rangle$ 来。它由下式给出

$$\langle\widetilde{\alpha}', j_1 m'|\hat{T}^{j_2}_q|\widetilde{\alpha}, j_3\widetilde{m}\rangle = \langle j_2 q,\ j_3\widetilde{m}|j_1 m'\rangle\left(\frac{1}{2j_1+1}\sum_n\langle\widetilde{\alpha}', j_1 n|\widetilde{\psi}_{j_1 n}(\widetilde{\alpha})\rangle\right). \tag{193}$$

实际上，将它代入上面的方程后我们得到

$$8\pi^2\sum_q\langle j_2 q, j_3(m-q)|jm\rangle\langle\widetilde{\alpha}', j_1 m'|\hat{T}^{j_2}_q|\widetilde{\alpha}, j_3(m-q)\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= 8\pi^2 \sum_q \langle j_2 q, j_3(m-q)|jm\rangle\langle j_2 q,\ j_3(m-q)|j_1 m'\rangle \left[\frac{1}{2j_1+1}\sum_n \langle\widetilde{\alpha}', j_1 n|\widetilde{\psi}_{j_1 n}(\widetilde{\alpha})\rangle\right] \\
&= \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\sum_q \langle j_2 q, j_3(m-q)|jm\rangle\langle j_2 q, j_3(m-q)|j_1 m'\rangle \sum_n \langle\widetilde{\alpha}', j_1 n|\widetilde{\psi}_{j_1 n}(\widetilde{\alpha})\rangle \\
&= \frac{8\pi^2}{2j_1+1}\delta_{j,j_1}\delta_{m,m'}\sum_n \langle\widetilde{\alpha}', j_1 n|\widetilde{\psi}_{j_1 n}(\widetilde{\alpha})\rangle. \qquad (194)
\end{aligned}
$$

这与方程 (192) 的左边完全一致。接下来，我们在公式 (193) 中令

$$
\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}\sum_n \langle\widetilde{\alpha}' j_1 n|\widetilde{\psi}_{j_1 n}(\widetilde{\alpha})\rangle \equiv \langle\widetilde{\alpha}' j_1\|\hat{T}^{j_2}\|\widetilde{\alpha} j_3\rangle, \qquad (195)
$$

则 Wigner-Eckart 定理得证。

做为一个特例，我们在练习 5 中要求证明 $\langle j'|\hat{J}|j\rangle = \delta_{j',j}\sqrt{j(j+1)(2j+1)}$ 。证明的过程中，需用一些关于 C.-G. 系数的知识。有关的信息可以在曾谨言著 “量子力学 I” 的 350 页上的表 10.1(b) 中找到。

Wigner-Eckart 定理的用途有二：一是用来证明其他有用的定理；二是用来计算一些矩阵元的比值。下面，让我们来看一下它在第一方面的一些应用。

3.3.2-1 **一阶张量的投影定理，矢量模型**

在一些问题中，我们已有两个角动量，例如 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\mathbf{S}}$ ，耦合在一起。此时，$\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{L}^2$ 和 $\hat{S}^2$ 是一组好量子数，但 $\hat{L}_z$ 与 $\hat{S}_z$ 都不再是守恒量。然而在一些问题中，我们恰恰需要计算形如 $\langle JJ_zLS|\hat{S}_z|JJ_zLS\rangle$ 这样的矩阵元。此时，下面的投影公式就十分有用。

$$
\delta_{J',J}\delta_{M',(M+\mu)}\langle J'M'|\hat{T}^1_\mu|JM\rangle = \frac{\langle JM'|\hat{J}_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle}{J(J+1)}. \qquad (196)
$$

证：先考虑 $\langle J'M'|\hat{J}_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle$ 。

$$
\begin{aligned}
&\langle J'M'|\hat{J}_\mu(\hat{J}\cdot\hat{T})|JM\rangle = \sum_m (-1)^m \langle J'M'|\hat{J}_\mu \hat{J}_m \hat{T}^1_{-m}|JM\rangle \\
&= \sum_m (-1)^m \langle J'M'|\hat{J}_\mu \hat{T}^1_{-m}\hat{J}_m|JM\rangle + \sum_m (-1)^m \langle J'M'|\hat{J}_\mu\left[\hat{J}_m, \hat{T}^1_{-m}\right]|JM\rangle. \qquad (197)
\end{aligned}
$$

我们要证明这后面一项实际上为零。我们有

$$
\sum_m (-1)^m \langle J'M'|\hat{J}_\mu\left[\hat{J}_m, \hat{T}^1_{-m}\right]|JM\rangle
$$

$$
\begin{aligned}
&= (-1)^1\langle J'M'|\hat{J}_\mu\left[\hat{J}_1,\hat{T}^1_{-1}\right]|JM\rangle + (-1)^0\langle J'M'|\hat{J}_\mu\left[\hat{J}_0,\hat{T}^1_0\right]|JM\rangle \\
&+ (-1)^{(-1)}\left\langle J'M'\left|\hat{J}_\mu\left[\hat{J}_{-1},\hat{T}^1_1\right]\right|JM\right\rangle \\
&= (-1)\left\langle J'M'\left|\hat{J}_\mu\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\left[\hat{J}_+,\hat{T}^1_{-1}\right]\right|JM\right\rangle \\
&+ \langle J'M'|\hat{J}_\mu\left[\hat{J}_z,\hat{T}^1_0\right]|JM\rangle + (-1)\left\langle J'M'\left|\hat{J}_\mu\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\left[\hat{J}_-,\hat{T}^1_1\right]\right|JM\right\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1\times 2-(-1)\times 0}\langle J'M'|\hat{J}_\mu\hat{T}^1_0\,|JM\rangle \\
&+ \langle J'M'|\hat{J}_\mu\,0\,\hat{T}^1_0|JM\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1\times 2-1\times 0}\,\langle J'M'|\hat{J}_\mu\hat{T}^1_0\,|JM\rangle \\
&\equiv 0.
\end{aligned} \tag{198}
$$

因此我们有

$$
\langle J'M'|\hat{J}_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle = \sum_m(-1)^m\langle J'M'|\hat{J}_\mu\hat{T}^1_{-m}\hat{J}_m|JM\rangle. \tag{199}
$$

插入单位算符 $\hat{I}=\sum_{J,\,M}|JM\rangle\langle JM|$ 后有

$$
\begin{aligned}
&\langle J'M'|\hat{J}_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle \\
=\ & \sum_m(-1)^m\sum_{J'',M''}\sum_{J''',M'''}\langle J'M'|\hat{J}_\mu|J''M''\rangle\langle J''M''|\hat{T}^1_{-m}|J'''M'''\rangle\langle J'''M'''|\hat{J}_m|JM\rangle \\
=\ & \sum_{J'',M''}\sum_{J''',M'''}\sum_m(-1)^m\delta_{J',J''}\delta_{J,J'''}\langle J'M'|\hat{J}_\mu|J'M''\rangle\langle J'M''|\hat{T}^1_{-m}|JM'''\rangle\langle JM'''|\hat{J}_m|JM\rangle \\
=\ & \sum_{M''}\sum_{M'''}\sum_m(-1)^m\langle J'M'|\hat{J}_\mu|J'M''\rangle\langle J'M''|\hat{T}^1_{-m}|JM'''\rangle\langle JM'''|\hat{J}_m|JM\rangle \\
=\ & \sum_{M''}\sum_{M'''}\sum_m(-1)^m\delta_{M',(\mu+M'')}\delta_{M''',(m+M)} \\
\times\ & \langle J'M'|\hat{J}_\mu|J'M''\rangle\langle J'M''|\hat{T}^1_{-m}|JM'''\rangle\langle JM'''|\hat{J}_m|JM\rangle \\
=\ & \sum_m(-1)^m\langle J'M'|\hat{J}_\mu|J'(M'-\mu)\rangle\langle J'(M'-\mu)|\hat{T}^1_{-m}|J(M+m)\rangle \\
\times\ & \langle J(M+m)|\hat{J}_m|JM\rangle.
\end{aligned} \tag{200}
$$

对于上式中的每一个矩阵元使用 Wigner-Eckert 定理并利用关系式

$$
\langle J'\|\hat{J}\|J\rangle = \delta_{J,J'}\sqrt{J(J+1)(2J+1)}, \tag{201}
$$

我们得到

$$
\langle J'M'|\hat{J}_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle
$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_m (-1)^m \langle 1\mu, J'(M'-\mu)|J'M'\rangle \sqrt{J'(J'+1)} \\
&\times \frac{1}{\sqrt{2J'+1}} \langle 1(-m), J(M+m)|J'(M'-\mu)\rangle \langle J'\|\hat{T}\|J\rangle \\
&\times \langle 1m, JM|J(M+m)\rangle \sqrt{J(J+1)}.
\end{aligned} \tag{202}
$$

对于第三个 C.-G. 系数使用恒等式

$$
\langle 1m, JM|J(M+m)\rangle = (-1)^m \langle 1(-m), J(M+m)|JM\rangle \tag{203}
$$

(我们下面给出它的证明) 后，我们进一步得到

$$
\begin{aligned}
&\langle J'M'|\hat{J}_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle \\
&= \sum_m \sqrt{\frac{J'(J'+1)J(J+1)}{2J'+1}} \langle 1\mu, J'(M'-\mu)|J'M'\rangle \\
&\times \langle 1(-m), J(M+m)|J'(M'-\mu)\rangle \langle 1(-m), J(M+m)|JM\rangle \langle J'\|\hat{T}\|J\rangle \\
&= \sqrt{\frac{J'(J'+1)J(J+1)}{2J'+1}} \langle 1\mu, J'(M'-\mu)|J'M'\rangle \\
&\times \langle J'\|\hat{T}\|J\rangle \sum_m \langle 1(-m), J(M+m)|J'(M'-\mu)\rangle \langle 1(-m), J(M+m)|JM\rangle \\
&= \frac{J(J+1)}{\sqrt{2J+1}} \langle 1\mu, J(M'-\mu)|JM'\rangle \langle J'\|\hat{T}\|J\rangle \delta_{J',J}\delta_{(M'-\mu),M} \\
&= \frac{J(J+1)}{\sqrt{2J+1}} \langle 1\mu, JM|J(M+\mu)\rangle \langle J'\|\hat{T}\|J\rangle \delta_{J',J}\delta_{M',(M+\mu)}.
\end{aligned} \tag{204}
$$

再一次使用 Wigner-Eckart 定理后，我们得到

$$
\begin{aligned}
&\langle J'M'|\hat{J}_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle = J(J+1)\delta_{J',J}\delta_{M',(M+\mu)} \langle J(M+\mu)|\hat{T}^1_\mu|JM\rangle \\
&= J(J+1)\delta_{J',J}\delta_{M',M+\mu} \langle JM'|\hat{T}^1_\mu|JM\rangle.
\end{aligned} \tag{205}
$$

两边相除 $J(J+1)$ 后，我们即可得到一阶张量算符的投影公式。

附录：我们现在证明公式

$$
\langle 1m, JM|J(M+m)\rangle = (-1)^m \langle 1(-m), J(M+m)|JM\rangle. \tag{206}
$$

根据 Wigner-Eckert 定理，我们有

$$
\langle JM'|J^1_{-m}|JM\rangle = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \langle 1(-m), JM|JM'\rangle \langle J\|\hat{J}\|J\rangle. \tag{207}
$$

上式的左边为一实数，而 C.-G. 系数亦为实数。因此 $\langle J\|\hat{J}\|J\rangle$ 必为实数。现在我们取上式的复共轭后有

$$\begin{aligned} & \langle JM'|J^1_{-m}|JM\rangle = \overline{\langle JM'|J^1_{-m}|JM\rangle} = \langle JM|(J^1_{-m})^\dagger|JM'\rangle \\ = \ & (-1)^m\langle JM|J^1_m|JM'\rangle = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2J+1}}\langle 1m, JM'|JM\rangle\langle J\|\hat{J}\|J\rangle \\ = \ & \frac{1}{\sqrt{2J+1}}\langle 1(-m), JM|JM'\rangle\langle J\|\hat{J}\|J\rangle. \end{aligned} \tag{208}$$

比较两边后，我们即得到公式 (206) 。

3.3.2-2 **因式分解公式**

为了能够有效地利用我们得到的公式，下面的因式分解公式是很有用的。

$$\langle JM'|J_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle = \langle JM'|J_\mu|JM\rangle\langle J\|(\hat{J},\hat{T})\|J\rangle\frac{1}{\sqrt{2J+1}}\delta_{M',M+\mu}. \tag{209}$$

证：插入单位分解后我们有

$$\begin{aligned} & \langle JM'|J_\mu(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle = \sum_{J'}\sum_{M''}\langle JM'|J_\mu|J'M''\rangle\langle J'M''|(\hat{J},\hat{T})|JM\rangle \\ = \ & \sum_{J'}\sum_{M''}\left(\langle JM'|J_\mu|J'M''\rangle\delta_{J,J'}\delta_{M',(M''+\mu)}\right) \\ \times \ & \frac{1}{\sqrt{2J'+1}}\langle 00, JM|J'M''\rangle\langle J'\|(\hat{J},\hat{T})\|J\rangle \\ = \ & \sum_{J'}\sum_{M''}\frac{1}{\sqrt{2J'+1}}\langle JM'|\hat{J}_\mu|JM''\rangle\delta_{J,J'}\delta_{M',(M''+\mu)}\delta_{M,M''}\langle J'\|(\hat{J},\hat{T})\|J\rangle \\ = \ & \frac{1}{\sqrt{2J+1}}\langle JM'|\hat{J}_\mu|JM\rangle\delta_{M',(M+\mu)}\langle J\|(\hat{J},\hat{T})\|J\rangle. \end{aligned} \tag{210}$$

这就是我们要证明的公式。将它代入 $\langle JM'|\hat{T}^1_\mu|JM\rangle$ 的表达式后，我们最后得到

$$\delta_{J',J}\delta_{M',(M+\mu)}\langle JM'|\hat{T}^1_\mu|JM\rangle = \frac{\langle J\|(\hat{J},\hat{T})\|J\rangle}{J(J+1)\sqrt{2J+1}}\langle JM'|\hat{J}_\mu|JM\rangle\delta_{M',M+\mu}. \tag{211}$$

例 3.3.2: 在一个原子中，设诸电子自旋之和为 $\hat{S}$，轨道角动量之和为 $\hat{L}$，则其总角动量为 $\hat{J}=\hat{L}+\hat{S}$ 。我们知道，一组好的量子数是 $(\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2)$ 。但在许多

问题中,我们需要计算此原子的磁矩 μ。它被定义为 $\mu = \langle JJLS|\hat{\mu}_z|JJLS\rangle \equiv g_J J$.
这里

$$\hat{\mu}_z = \frac{e\hbar}{2mc}(\hat{L}_z + \hat{\sigma}_z) = \frac{e\hbar}{2mc}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) = \mu_0(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z). \tag{212}$$

为了计算 μ, 我们使用上面证明的投影公式

$$\begin{aligned}\mu &= \langle JJLS|\hat{\mu}_z|JJLS\rangle = \frac{\langle JLS\|(\hat{J},\hat{\mu})\|JLS\rangle}{J(J+1)\sqrt{2J+1}}\langle JJLS|\hat{J}_z|JJLS\rangle \\ &= \frac{\langle JLS\|(\hat{J},\hat{\mu})\|JLS\rangle}{(J+1)\sqrt{2J+1}}.\end{aligned} \tag{213}$$

另一方面，我们有

$$\begin{aligned}\langle JLS\|(\hat{J},\hat{\mu})\|JLS\rangle &= \sqrt{2J+1}\frac{1}{\langle 00,JJ|JJ\rangle}\langle JJLS|(\hat{J},\hat{\mu})|JJLS\rangle \\ &= \sqrt{2J+1}\langle JJLS|(\hat{J},\hat{\mu})|JJLS\rangle \\ &= \sqrt{2J+1}\,\mu_0\langle JJLS|\hat{J}\cdot\hat{L}+2\hat{J}\cdot\hat{S}|JJLS\rangle \\ &= \sqrt{2J+1}\,\mu_0\langle JJLS|\hat{J}\cdot\hat{J}+\hat{J}\cdot\hat{S}|JJLS\rangle.\end{aligned} \tag{214}$$

由于 $\langle JJLS|\hat{J}^2|JJLS\rangle = J(J+1)$ 以及 $\hat{J}\cdot\hat{S} = \hat{L}\cdot\hat{S} + \hat{S}^2$, 代入后我们有

$$\begin{aligned}&\langle JLS\|(\hat{J},\hat{\mu})\|JLS\rangle = \sqrt{2J+1}\,\mu_0\left[J(J+1)+S(S+1)+\langle JJ|\hat{L}\cdot\hat{S}|JJ\rangle\right] \\ &= \sqrt{2J+1}\,\mu_0\left[J(J+1)+S(S+1)+\frac{1}{2}\langle JJLS|(\hat{L}+\hat{S})^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2|JJLS\rangle\right] \\ &= \sqrt{2J+1}\,\mu_0\left[J(J+1)+S(S+1)+\frac{1}{2}J(J+1)-\frac{1}{2}L(L+1)-\frac{1}{2}S(S+1)\right] \\ &= \sqrt{2J+1}\,\mu_0\left[\frac{3}{2}J(J+1)-\frac{1}{2}L(L+1)+\frac{1}{2}S(S+1)\right].\end{aligned} \tag{215}$$

代入 μ 的表达式，我们最后得到

$$\mu = \frac{\mu_0}{J+1}\left[\frac{3}{2}J(J+1)-\frac{1}{2}L(L+1)+\frac{1}{2}S(S+1)\right]. \tag{216}$$

练习一:

习题集： 6.53， 6.55， 6.56， 6.59， 6.65 。

练习二：

教科书：教科书 255 页至 259 页上练习 3， 5， 7 。

习题集： 6.63， 6.64 。