高等量子力学

孙昌璞

中物院研究生院/北京计算科学研究中心

Beijing Computational Science Research Center (CSRC)

第五章

对称性与角动量理论

第5章：对称性和角动量理论

5.1 量子力学中的对称性

5.2 时间反演对称性

5.3 转动对称性

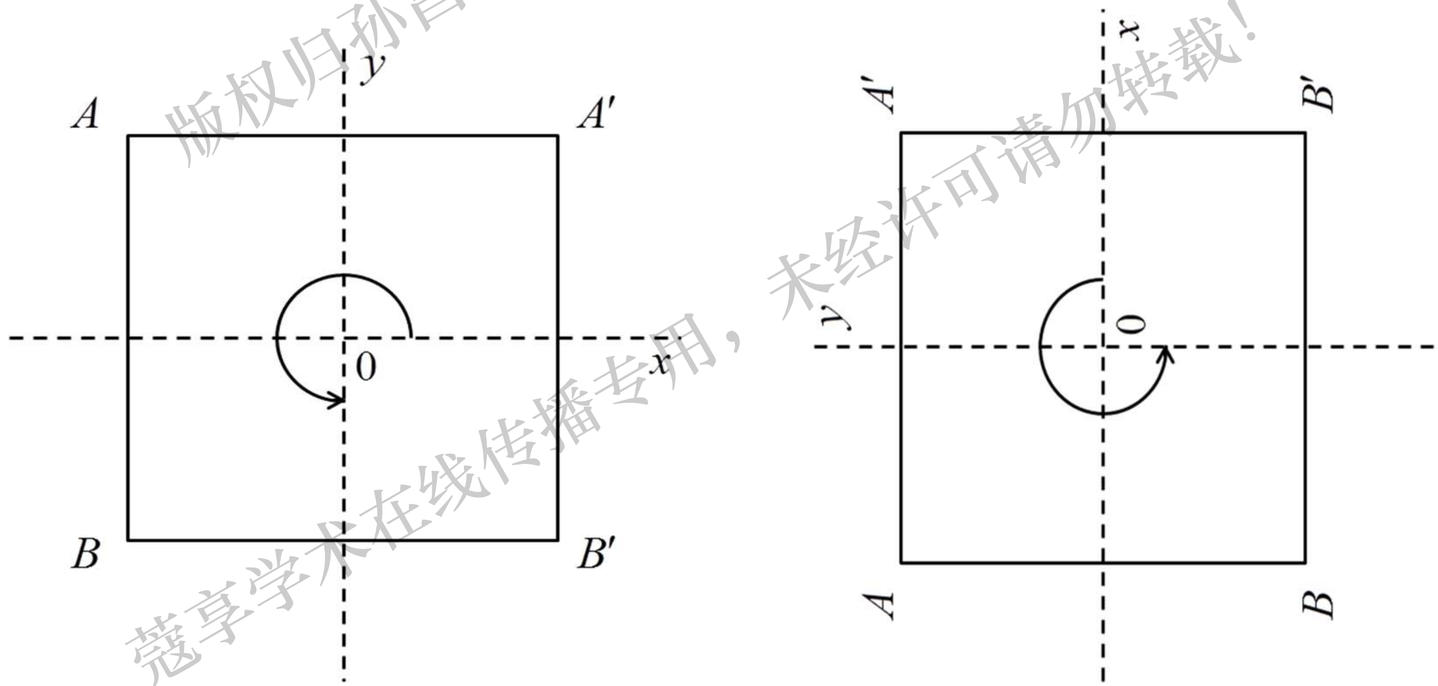
5.4 单粒子的角动量理论

5.5 角动量耦合

5.6 不可约张量与Wigner-Eckart定理

5.1 量子力学中的对称性

对称性的观念起源于自然界或人工系统的几何对称性，如人体，植物的叶子，古今的建筑。数学上，几何对称性被定义为某种变换下的不变性—与原来图形重合。



5.1 量子力学中的对称性

对称性定义为运动方程和其解在某种变换下的不变性。在量子力学中，对称性表现为薛定谔方程解在某种变换下的不变性。

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \\ |\psi(t=0)\rangle = |\psi(0)\rangle \end{cases}$$

5.1 量子力学中的对称性

当波函数经历一般时变表象变换

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = W(t)|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'\rangle = \mathrm{i}\hbar\dot{W}|\psi\rangle + W\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle$$

$$= \mathrm{i}\hbar\dot{W}W^{-1}|\psi'\rangle + WH|\psi\rangle$$

$$= \left(\mathrm{i}\hbar\dot{W}W^{-1} + WHW^{-1}\right)|\psi'\rangle$$

有效运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'\rangle = H'(t)|\psi\rangle$$

有效哈密顿量

$$\boxed{H' = WHW^{-1} + \mathrm{i}\hbar\dot{W}W^{-1}}$$

5.1 量子力学中的对称性

讨论

若变换W含时，即

$$H' = WHW^{-1} + \mathrm{i}\hbar\dot{W}W^{-1}$$

W需要满足什么条件才能构成体系的对称性群？

5.1 量子力学中的对称性

当变换W不含时间

$$H' = WHW^{-1}$$

若量子体系在W变换下是不变的，则有 $H = H'$

或

$$[H, W] = 0,$$

称 W 为 H 的对称变换。

可以证明，所有 H 的对称性变换 $W, W', W'', \cdots$ 构成一个群 **G**, 称为体系的对称性群。

5.1量子力学中的对称性

例子1：平移对称性与动量守恒

经典力学：当外势 $V(x)$ 是平移不变的

$$V(x) \to V(x+a) = V(x)$$

则对于无穷小变换

$$\left.\frac{dV}{dx}\right|_{a\to 0} = \frac{V(x+a)-V(x)}{a} = 0$$

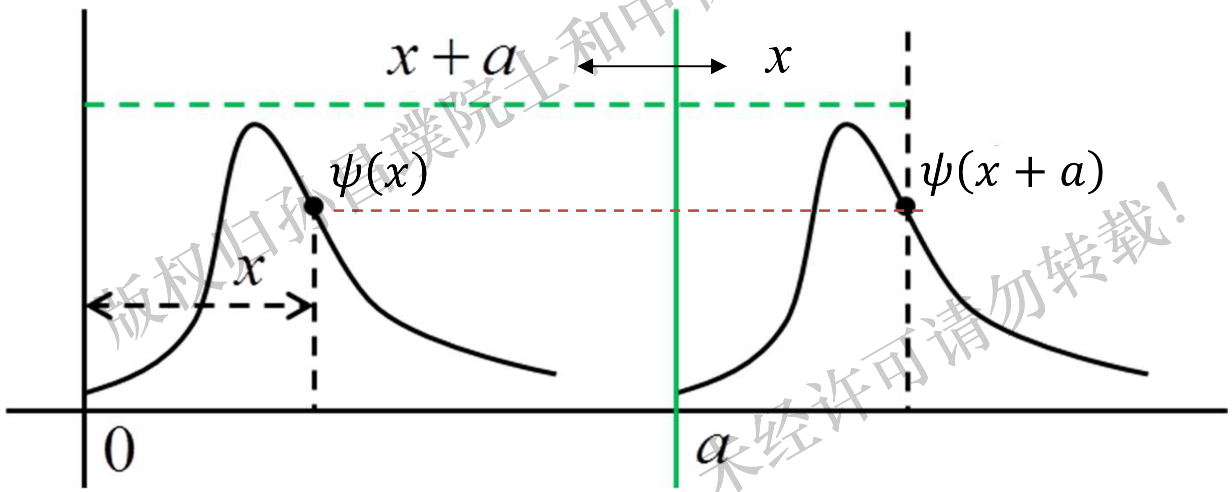
故外势为常数

$$\dot{P} = \partial_x V(x) = 0$$

平移不变的系统，动量是守恒的。

5.1 量子力学中的对称性

量子力学：波函数 $\psi(x)$ 从零点整体平移到a可理解为坐标原点的反向移动。



平移后的波函数 $\psi'(x) = W\psi(x)$

$$\psi'(x+a) = \psi(x)$$

$$\psi'(x) = \psi(x-a) = W(a)\psi(x)$$

5.1 量子力学中的对称性

对于一个无穷小平移 $W(a=\varepsilon)$

$$W(\varepsilon)\psi(x) = \psi(x-\varepsilon) = \left[1 - \varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi(x)$$

$$= \left[1 + \frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}P_x\right]\psi(x)$$

对于有限的平移 $a = N\varepsilon$

$$W(a)\psi(x) = W\left(\frac{a}{N}\right)W\left(\frac{a}{N}\right)\cdots W\left(\frac{a}{N}\right)\psi(x)$$

$$= \left[1 + \frac{\varepsilon}{\mathrm{i}\hbar}P_x\right]^N \psi(x) = \left[1 + \frac{a}{\mathrm{i}\hbar N}P_x\right]^N \psi(x)$$

5.1 量子力学中的对称性

平移算子

$$\boxed{W(a)=\lim_{N\to\infty}\left[1+\frac{aP_x}{\mathrm{i}\hbar N}\right]^N=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}P_x a}{\hbar}}}$$

如果一个体系是平移不变的，则其哈密顿量满足（$\forall a\in R$）

$$[H,W(a)]=0$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}[H,W(a)]_{a\to 0}=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H,P_x]=0$$

$$[P_x,H]=0$$

平移矩阵的无穷小生成元 P_x 是一个守恒量。

5.1 量子力学中的对称性

一般说来，对称变换$W(g)$是一组参量$g=(g_1 g_2 \cdots g_N)$的函数。

$$[H, W(g)] = 0$$

意味着$W(g)$的生成元

$$L_j = i \frac{\partial}{\partial g_j} W(g) \Big|_{g=0}$$

是厄米的。因此是系统的守恒力学量。

5.1 量子力学中的对称性

例子2：空间反演对称性

空间平移对称性是一种连续对称性；

空间反演则是最简单的离散对称性。

空间反演操作 P：

$$P\psi(\vec{r},t) = \psi(-\vec{r},t)$$

$$P^2\psi(\vec{r},t) = P\psi(-\vec{r},t) = \psi(\vec{r},t)$$

空间反演变换的性质：

a） P 是幺正的，即 $P^\dagger = P$;

b） P的本征值仅为 ± 1（相应的本征函数分别称为偶、奇宇称态）

5.1 量子力学中的对称性

证明

$$\langle\vec{r}|P^\dagger|\psi\rangle \triangleq \langle P\vec{r}|\psi\rangle = \langle-\vec{r}|\psi\rangle;$$

$$\langle\vec{r}|P|\psi\rangle = \int d\vec{r}\langle\vec{r}|P|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\psi\rangle = \langle-\vec{r}|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow P^\dagger = P$$

设

$$P|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

$$P^2|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

则

$$\lambda = \pm 1.$$

5.1 量子力学中的对称性

对称变换的全体构成一个群

将三维欧氏空间 $R^3 = \{\vec{r}(x, y, z)\}$ 上的变换

$$\vec{r} \to \vec{r}' = g\vec{r}$$

作用到波函数上：

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \Gamma(g)|\psi\rangle,$$

$$\Gamma(g)\Gamma^{\dagger}(g) = \Gamma^{\dagger}(g)\Gamma(g) = I$$

5.1 量子力学中的对称性

其坐标表示

$$\langle\vec{r}|\psi\rangle \rightarrow \langle\vec{r}|\psi'\rangle = \langle\vec{r}|\Gamma(g)\psi\rangle$$

$$= \langle\Gamma^{-1}(g)\vec{r}|\Gamma^{-1}(g)\Gamma(g)\psi\rangle = \langle g^{-1}\vec{r}|\psi\rangle$$

$$= \psi(g^{-1}\vec{r})$$

即

$$\boxed{\Gamma(g)\psi(r) = \psi(g^{-1}\vec{r})}$$

（平移变换性质的一个推广，适用于一般的群变换）

5.1 量子力学中的对称性

在R^3上，如果g和h均为旋转变换，那么gh也是一个旋转变换；记

$$gh \in \{g, h, e, g', h', \cdots\} \equiv G,$$

其中存在一个单位元$e = R(\theta = 0)$；对$g = R(\theta)$存在一个逆元素$g^{-1} = R(-\theta)$使

$$gg^{-1} = g^{-1}g = e;$$

另外 $g, f, h \in G$ 满足结合律

$$g(f \cdot h) = (gf) \cdot h。$$

这种乘法下$\{g, h, \cdots, e\}$构成群。$\Gamma(g)$称为变换g在波函数空间上的一个表示。

5.1 量子力学中的对称性

问题

如果$g = R(\theta)$是一个旋转变换，能否定义

$$\Gamma(g)\psi(\vec{r}) = \psi(g\vec{r})$$

证明

$\Gamma(g)$ 满足群的一切性质，如：

$$\Gamma(g)\Gamma(h) = \Gamma(gh)$$

$$\Gamma(g)\Gamma(h)\psi(\vec{r}) = \Gamma(g)\psi(h^{-1}\vec{r}) = \psi\left(h^{-1}(g^{-1}\vec{r})\right)$$

$$= \psi\left((gh)^{-1}\vec{r}\right) = \Gamma(gh)\psi(\vec{r})$$

5.1 量子力学中的对称性

取基矢$\{|\psi_n\rangle = |n\rangle|_{n=1,2,\cdots,d}\}$，群元 g 作用在这些基矢上

$$\Gamma(g)|n\rangle = \sum_{m=1}^{d} \Gamma(g)_{mn}|m\rangle, \qquad \forall g \in G$$

那么

$$\Gamma(g)_{mn} = \langle m|\Gamma(g)|n\rangle$$

定义的矩阵 $\Gamma(g)$ 是群G的一个d维表示。

5.1 量子力学中的对称性

如果 V 存在一个 d_S 维的不变的子空间 $V_S \subset V$，$\forall|\xi\rangle \in V_S$,

$\Gamma(g)|\xi\rangle \in V_S$, 则称 $\Gamma(g)$ 是 G 的一个可约表示。

取 V_S 基矢$\{|S_1\rangle, |S_2\rangle, \cdots, |S_{d_S}\rangle, |S_{d_S+1}\rangle, \cdots, |S_d\rangle\}$, 则 $\Gamma(g)$ 可表示为

$$\Gamma(g) = \begin{pmatrix} \Gamma^{(S)}(g) & 0 \\ 0 & \bar{\Gamma}^{(S)}(g) \end{pmatrix},$$

其中$\Gamma^{(S)}(g)$为G在V_S上的表示。

若找不到这样的不变子空间，则称$\Gamma(g)$为不可约表示。

5.1 量子力学中的对称性

Wigner定理：设G是哈密顿量H的对称性群，$\Gamma^{(d)}$是群G的一个d维不可约表示，则H存在d维简并，简并的本征函数张成了群G的不可约表示空间V。

证明

设 $|\lambda\rangle$ 是 H 的本征函数:

$$H|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

则

$$|\lambda(g)\rangle = \Gamma(g)|\lambda\rangle$$

也是H的本征函数，且具有相同本征值。

5.1 量子力学中的对称性

若能级λ有d度简并，记简并的本征函数为$|\lambda_\alpha\rangle$：

$$H|\lambda_\alpha\rangle = \lambda|\lambda_\alpha\rangle, \qquad \alpha = 1,2,\cdots,d$$

$\Gamma(g)|\lambda_\alpha\rangle$也是$H$具有相同本征值的本征函数：

$$\Gamma(g)|\lambda_\alpha\rangle = \sum_{\beta=1}^{d} \Gamma(g)_{\beta\alpha}|\lambda_\beta\rangle, \qquad \forall g \in G$$

即H对于本征值λ的全体简并本征矢张成G的表示空间V_λ

进一步证明V_λ是不可约的。

先假设它是可约的，则存在一个不变子空间$S \subset V_\lambda$，使得

$$G|\lambda_S\rangle \in S, \qquad \forall|\lambda_S\rangle \in S$$

5.1 量子力学中的对称性

记

$$g = |\lambda_S\rangle\langle\lambda| + |\lambda\rangle\langle\lambda_S|,$$

可证对于$|\lambda\rangle \notin S$，g也是一个对称变换。

证明

$$\begin{cases} H|\lambda_S\rangle = \lambda|\lambda_S\rangle \\ H|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \end{cases},$$

则

$$\begin{aligned}[H, g] &= Hg - gH \\ &= H(|\lambda_S\rangle\langle\lambda| + |\lambda\rangle\langle\lambda_S|) - (|\lambda_S\rangle\langle\lambda| + |\lambda\rangle\langle\lambda_S|)H \\ &= 0\end{aligned}$$

因此，$g \in G$ 且G会把S中矢量变到S以外，即S不是V_λ的不变子空间，与“不可约”假设矛盾。

5.1 量子力学中的对称性

简单的例子

自由粒子的哈密顿量

$$H = \frac{P_x^2}{2m}$$

具有空间反演对称性，$[P, H] = 0$，而H对应于本征值

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

的简并本征态

$$\psi_{\pm k}(x) = \langle x|\psi(\pm k)\rangle = \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$$

5.1 量子力学中的对称性

它们可以组成奇偶宇称态

$$\psi_-(x) = \frac{1}{2}\left(\psi_{+k}(x) - \psi_{-k}(x)\right) = \sin kx$$

$$\psi_+(x) = \frac{1}{2}\left(\psi_{+k}(x) + \psi_{-k}(x)\right) = \cos kx$$

显然

$$P\psi_\pm(x) = \pm\psi(x).$$

$\psi_\pm(x)$构成了空间反演群G_2群的恒等表示，$\psi_-(x)$构成了G_2群的非恒等表示。

5.1 量子力学中的对称性

任意守恒量$\hat{L}$具有性质：

(1) 期望值不随时间改变：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle = 0$$

(2) 若$|\psi(0)\rangle$是$\hat{L}$的本征态，$|\psi(t)\rangle$也是$\hat{L}$的本征态

(3) 在任意态中测量$\hat{L}$，测得$\hat{L}$的各种本征值几率不变

证明

(1)

$$\frac{d}{dt}\hat{L} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{L}, H]$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|[\hat{L}, H]|\psi\rangle = 0$$

5.1 量子力学中的对称性

(2)

设$|\psi(0)\rangle$满足

$$\hat{L}|\psi(0)\rangle = \lambda|\psi(0)\rangle$$

那么对于

$$|\psi'(t)\rangle = \left(\hat{L} - \lambda\right)|\psi(t)\rangle,$$

有

$$\begin{cases} |\psi'(0)\rangle = 0 \\ \mathrm{i}\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle = H|\psi'(t)\rangle \end{cases}$$

5.1 量子力学中的对称性

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi'(t)|\psi'(t)\rangle = 0 \Rightarrow \text{系统粒子数守恒}$$

$$\langle\psi'(t)|\psi'(t)\rangle = \langle\psi'(0)|\psi'(0)\rangle = 0$$

因此

$$|\psi'(t)\rangle = 0,$$

$$\hat{L}|\psi(t)\rangle = \lambda|\psi(t)\rangle, \qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

(3) 假设 H 是非简并的:

$$\hat{L}|n(0)\rangle = \lambda_n|n(0)\rangle,$$

5. 1 量子力学中的对称性

则根据（2）中结论，有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle = H|n(t)\rangle,$$

$$\hat{L}|n(t)\rangle = \lambda_n|n(t)\rangle$$

对于任意态

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n C_n(0)|n\rangle,$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(0)|n(t)\rangle,$$

测量$\hat{L}$得到本征值λ_n的几率

$$P_n(t) = |\langle n(t)|\psi(t)\rangle| = |C_n(0)|^2 = P_n(0)$$

5.2 时间反演对称性

在经典牛顿力学中，牛顿方程为

$$m\frac{d^2r}{dt^2}=F(t,r),\frac{dr}{dt}=v;$$

令$t\to -t'$，则牛顿方程变为

$$m\frac{d^2r}{d(-t')^2}=m\frac{d^2r}{dt'^2}=F(-t',r)$$

速度变为

$$v=\frac{dr}{d(-t')}=-\frac{dr}{dt'}=-v'$$

5.2 时间反演对称性

因此

（1）$F(-t',r)=F(t',r)$，则运动方程是不变的。

（2）若$F(-t',r)$形式改变，则体系的动力学就不再是时间反演不变的了。

在经典力学中，几个主要的物理量在时间反演下按如下规律变换：

$$r\rightarrow r,p\rightarrow -p,L\rightarrow -L$$

5.2 时间反演对称性

无自旋粒子在实的势场中的运动

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$$ （不显含时间）

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(r,t);$$

$t \rightarrow -t'$:

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{(-\partial t')}\psi(r,-t') &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(r,-t') \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi^*(r,-t') &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi^*(r,-t') \end{aligned}}$$

$\psi^*(r,-t')$ 称为 $\psi(r,t)$ 的时间反演态。

5.2 时间反演对称性

对于一般的势场

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(r,-t')=\widehat{H}^*\psi(r,-t'),$$

我们现在去找一个幺正算符 $\widehat{U}$, 使得$\widehat{H}^*=\widehat{U}^\dagger\widehat{H}\widehat{U}$（或是 $\widehat{H}=\widehat{U}\widehat{H}^*\widehat{U}^\dagger$），于是

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi^*(r,-t')=\widehat{U}^\dagger\widehat{H}\widehat{U}\psi^*(r,-t')$$

或

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\left(\widehat{U}\psi^*(r,-t')\right)=\widehat{H}\left(\widehat{U}\psi^*(r,-t')\right)$$

5. 2 时间反演对称性

如下定义的时间反演态

$$\psi'(r,t') = \hat{U}\psi^*(r,-t') = \hat{U}\hat{K}\psi(r,-t')$$

是一个该量子体系的容许态。此时，称该量子力学体系具有时间反演不变性。

在这里，$\hat{K}$代表复共轭算符，即

$$\hat{K}\psi(r,t) = \psi^*(r,t)$$

显然，这样定义的算符$\hat{K}$为反线性算符，即

$$\hat{K}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha^*\hat{K}\psi_1 + \beta^*\hat{K}\psi_2$$

5.2 时间反演对称性

习题

对于具有二分量的自旋系统

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)+B(x)\sigma_z$$

波函数

$$\hat{U}\begin{pmatrix}\psi_1^*(r,-t')\\ \psi_2^*(r,-t')\end{pmatrix}\text{和}\begin{pmatrix}\psi_1(r,t)\\ \psi_2(r,t)\end{pmatrix}$$

在什么情况下满足相同的薛定谔方程？即该体系具有时间反演不变性。

5.2 时间反演对称性

练习

对于一个一般的角动量为 J 的粒子，在仔细地规定了相因子之后，我们有

$$\hat{T}\psi_{JM} = (-1)^{J-M}\psi_{J,-M}$$

因此，若 J 为整数，则$c = 1$；若 J 为半整数，则$c = -1$。

更一般的讲，对于玻色子组成的多体体系， $c = 1$ 总是成立的。而对于一个费米子组成的多体体系，我们有$c = (-1)^N$.这里，N为体系中的费米子数。

5.2 时间反演对称性

Kramer简并

现在看看时间反演不变性带来的物理结果。首先，考察 $\hat{T}_\varphi$ 和 $\hat{T}_\psi$ 的内积。按照定义，我们有

$$\left(\hat{T}_\varphi,\hat{T}_\psi\right)=\left(\hat{U}\hat{K}_\varphi,\hat{U}\hat{K}_\psi\right)=\left(\hat{U}\varphi^*,\hat{U}\psi^*\right)=\left(\varphi^*,\hat{U}^\dagger\hat{U}\psi^*\right)$$
$$=(\varphi^*,\psi^*)=\overline{(\varphi,\psi)}=(\psi,\varphi);$$

令 $\psi=\hat{T}\varphi$,

有

$$\left(\hat{T}\varphi,\hat{T}^2\varphi\right)=\left(\hat{T}\varphi,\varphi\right).$$

5.2 时间反演对称性

当讨论玻色子体系或具有偶数个费米子多体体系时，有$\hat{T} = c\hat{I} = \hat{I}$。因此上式变为

$$(\hat{T}\varphi, \varphi) = (\hat{T}\varphi, \varphi)$$

这是一个恒等式，得不出任何结论。

但是，当体系有奇数个费米子时，$\hat{T}^2 = c\hat{I} = -\hat{I}.$

此时，我们得到

$$-(\hat{T}\varphi, \varphi) = (\hat{T}\varphi, \varphi),$$

因此 $(\hat{T}\varphi, \varphi) = 0.$

φ与它的时间反演态$\hat{T}\varphi$是相互正交的

5.2 时间反演对称性

另外，对于时间反演不变的哈密顿量，任取一个态ψ

$$\hat{T}(\hat{H}\psi)=\hat{U}\hat{K}(\hat{H}\psi)=\hat{U}(\hat{H}^*\psi^*)$$
$$=(\hat{U}\hat{H}^*\hat{U}^\dagger)(\hat{U}\psi^*)=\hat{H}(\hat{U}\hat{K}\psi)$$
$$=\hat{H}\hat{T}\psi$$

即

$$[\hat{H},\hat{T}]=0.$$

由此得出结论，若 φ 是 $\hat{H}$ 的一个本征态，则 $\hat{T}\varphi$ 也是 $\hat{H}$ 的一个本征态，并且具有相同的能量。又由于它们是正交的，因此要求这一能级至少是二重简并的。这一定理称为Kramer定理。

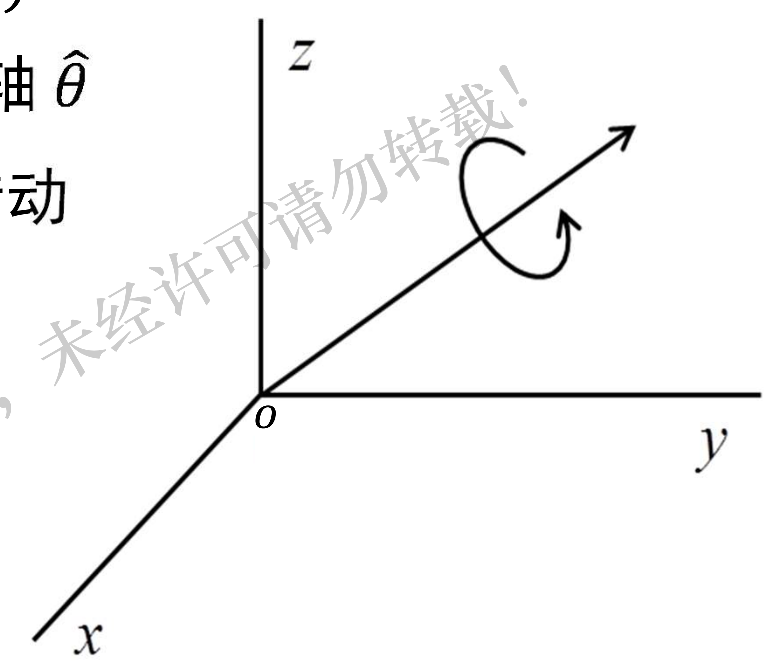
5.3 转动对称性

三维空间中的旋转群SO3

刚体绕固定点 o 的转动用$R(\vec{\theta})$表示

-矢量 $\vec{\theta} = (\theta_x, \theta_y, \theta_z)$： 转动轴 $\hat{\theta}$

右手法则：对于 $\theta = \|\vec{\theta}\|$的转动



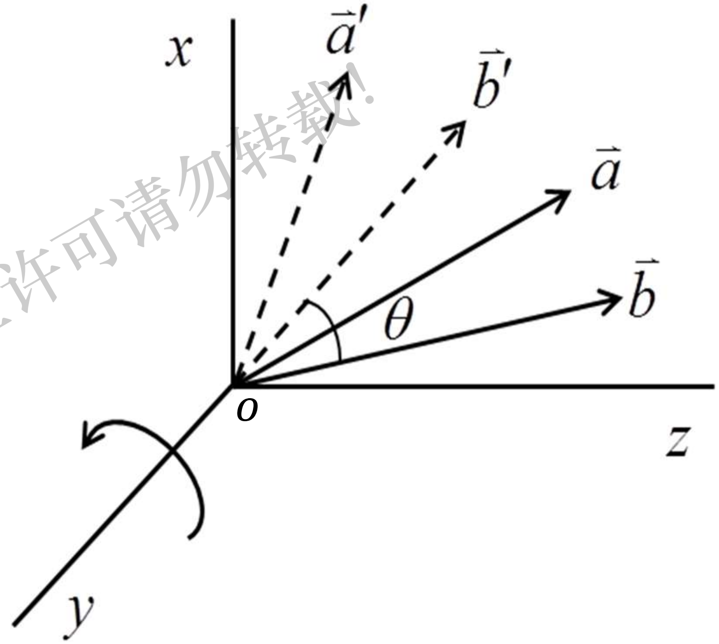
5.3 转动对称性

三维空间中的旋转群SO3

$R(\vec{\theta})$保内积，保矢量积：

$$(R(\vec{\theta})\vec{a})\cdot(R(\vec{\theta})\vec{b})=\vec{a}\cdot\vec{b}$$

$$(R(\vec{\theta})\vec{a})\times(R(\vec{\theta})\vec{b})=R(\vec{\theta})[\vec{a}\times\vec{b}]$$



5. 3 转动对称性

$(\overrightarrow{e_1}, \overrightarrow{e_2}, \overrightarrow{e_3})$是$R^3$上的基矢

$$R(\vec{\theta})e_\alpha = \sum_\beta R(\vec{\theta})_{\beta\alpha} e_\beta$$

由保内积的性质

$$\overrightarrow{e_\alpha} \cdot \overrightarrow{e_\beta} = \left(R(\vec{\theta})\overrightarrow{e_\alpha}\right) \cdot \left(R(\vec{\theta})\overrightarrow{e_\beta}\right) = \delta_{\alpha\beta}$$

$$\sum_\alpha R_{\alpha\beta} R_{\alpha\delta} = \delta_{\beta\delta} \Rightarrow R^T R = I$$

5.3 转动对称性

$$\vec{a}\cdot\left(\vec{b}\times\vec{c}\right)=\begin{vmatrix}a_1 & a_2 & a_3\\ b_1 & b_2 & b_3\\ c_1 & c_2 & c_3\end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}1 &= \overrightarrow{e_1}\cdot(\overrightarrow{e_2}\times\overrightarrow{e_3})\\ &= \left(R(\vec{\theta})\overrightarrow{e_1}\right)\cdot\left[\left(R(\vec{\theta})\overrightarrow{e_2}\right)\times\left(R(\vec{\theta})\overrightarrow{e_3}\right)\right]\\ &= \det(R)\end{aligned}$$

$SO(3)$转动推广到任意维的实正交空间：

$$RR^T=R^TR=I,\qquad \det(R)=1$$

5. 3 转动对称性

基本的$SO(3)$操作：

$$R_1(\theta_x) = R(\theta_x, 0,0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{\boxed{R(\theta_x)}}} \\ 0 & & \end{bmatrix}$$

$$R_2(\theta_y) = R(0, \theta_y, 0) = \begin{bmatrix} \cos\theta_y & 0 & \sin\theta_y \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta_y & 0 & \cos\theta_y \end{bmatrix}$$

$$R_3(\theta_z) = R(0,0,\theta_z) = \begin{bmatrix} \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{\boxed{R(\theta_z)}}} & 0 \\ & & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

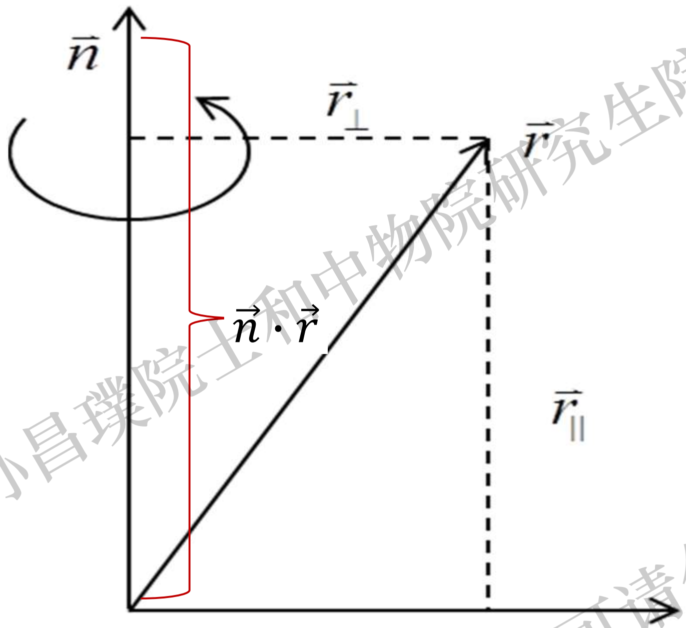
5.3 转动对称性

对于任意的$SO(3)$转动$R(\vec{\theta})$

记 $\vec{\theta} = \vec{n}\theta \;\; (|\vec{n}| = 1)$:

$$R(\vec{\theta})\vec{r} = \vec{r}\cos\theta + \vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{r})(1-\cos\theta) + (\vec{n}\times\vec{r})\sin\theta$$

5.3 转动对称性



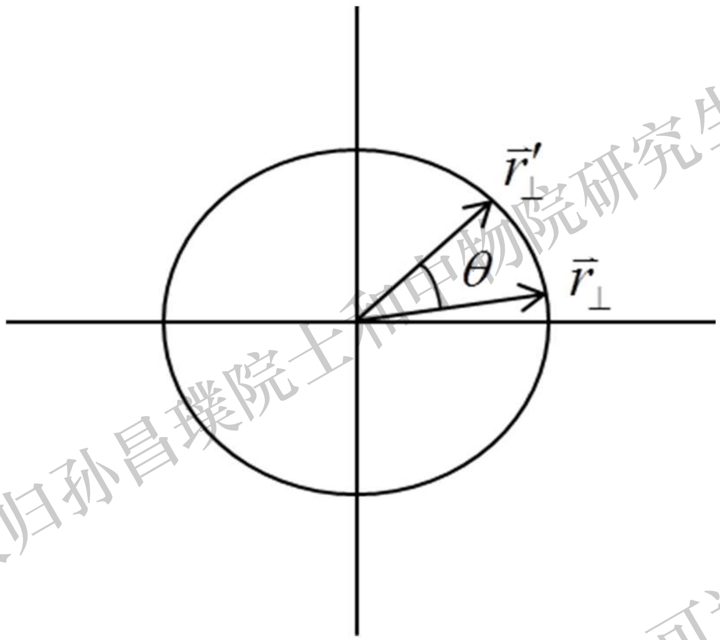
把$\vec{r} \in R^3$分解为平行部分 $\vec{r}_\parallel$ 和垂直部分$\vec{r}_\perp$

$$\vec{r} = \vec{r}_\parallel + \vec{r}_\perp$$

其中

$$\vec{r}_\parallel = \vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{r}), \qquad \vec{r}_\perp = \vec{r} - \vec{r}_\parallel$$

5.3 转动对称性



绕 $\vec{n}$ 转 θ 角时， $\vec{r}_\parallel$ 不变， $\vec{r}_\perp$ 变为

$$\vec{r}'_\perp = \vec{r}_\perp \cos\theta + \vec{n}\times\vec{r}_\perp \sin\theta$$

$$= (\vec{r} - \vec{r}_\parallel)\cos\theta + \vec{n}\times(\vec{r} - \vec{r}_\parallel)\sin\theta$$

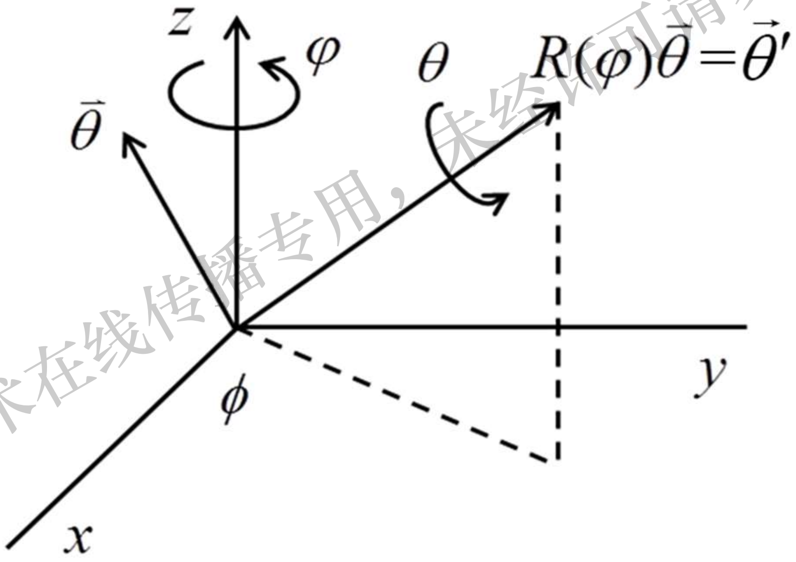
$$= \vec{r}\cos\theta - \vec{n}(\vec{n}\cdot\vec{r})\cos\theta + \vec{n}\times\vec{r}\sin\theta$$

5.3 转动对称性

$SO(3)$群的一个重要性质：欧拉转动

$$R(\vec{\varphi})\cdot R(\vec{\theta})R(-\vec{\varphi})=R[R(\vec{\varphi})\,\vec{\theta}]$$

亦即，先绕 $\vec{\varphi}$ 转 $-\varphi$，后绕 $\vec{\theta}$ 转 θ，再绕 $\vec{\varphi}$ 转 φ，相当于绕 $R(\vec{\varphi})\,\vec{\theta}$ 转 θ 角。



5.3 转动对称性

证明

不失一般性取 $\vec{\varphi}$ 为子方向 $\vec{\varphi}=\varphi e_z$，

选 $\vec{\theta}$ 在 xz 平面。然后，利用公式

$$R(\vec{\theta})\,\vec{r}=\vec{r}\cos\theta+\vec{n}\,(\vec{n}\cdot\vec{r})(1-\cos\theta)+(\vec{n}\times\vec{r})\sin\theta$$

计算

$$R_z(\varphi)R(\vec{\theta})R_z(-\varphi)\,\vec{r}=?$$

$$R_z(\varphi)\,\vec{\theta}=\vec{\theta}'=?$$

$$R(\vec{\theta}')\,\vec{r}=?$$

5.3 转动对称性

利用$SO(3)$群这一性质可以生成任意的转动

$$R(\theta,\varphi)=R_z(\varphi)R_y(\theta)R_z(-\varphi)$$

欧拉转动定理：刚体的任意转动，可以由三次转动来完成

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)$$

证明　　任意一个转动

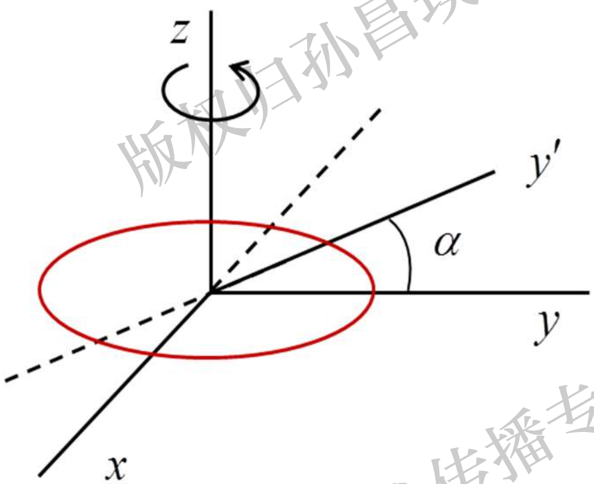
$$R=\underset{③}{R_{z'}(\gamma)}\,\underset{②}{R_{y'}(\beta)}\,\underset{①}{R_z(\alpha)}$$

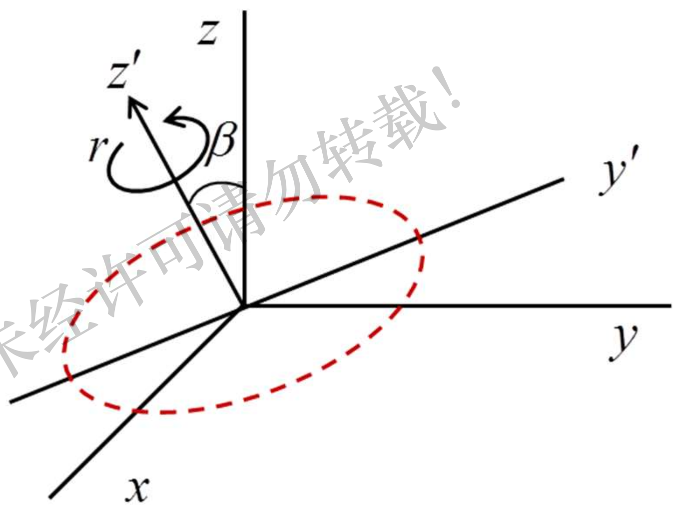
5.3 转动对称性

①先用$R_z(\alpha)$把 y 轴转到 y'；

②再绕 y'轴转 β 角，这时 z 变成 z'；

③然后再绕 z'轴转 γ 角。





$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(-\alpha)$$
$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}(-\beta)$$

$$R = \left(R_{y'}(\beta)\right) R_z(\gamma)R_{y'}(-\beta)R_y(\beta)R_z(\alpha)$$
$$= R_z(\gamma)R_y(\beta)R_z(-\gamma)R_z(\gamma)R_z(\alpha)$$

5.3 转动对称性

$SO(3)$群的生成元

$SO(3)$基本操作 $R_\alpha(\theta)$ $(\alpha=1,2,3)$：写下$SO(3)$的生成元

$$I_\alpha = \frac{\partial R(\theta_1,\theta_2,\theta_3)}{\partial \theta_\alpha}\Big|_{\theta_1,\theta_2,\theta_3=0}$$

$$I_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad I_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad I_3 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

5.3 转动对称性

$SO3$群的生成元

$SO(3)$李代数的基本表示满足角动量基本关系

$$\boxed{[I_\alpha, I_\beta] = \sum \epsilon_{\alpha\beta\gamma} I_\gamma^R}$$

其中$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$称为Civita符号，$\epsilon_{123} = 1$，重复指标为0。

转动操作对坐标波函数的作用——转动群的坐标表示

$$\varphi(\vec{r}) \to \varphi'(r) = D(\vec{\theta})\varphi(r) \equiv \varphi\left(R^{-1}(\vec{\theta})\,\vec{r}\right)$$

有生成元

$$I_\alpha \equiv \partial_{\theta_\alpha} D(\vec{\theta})|_{\vec{\theta}=0}$$

5.3 转动对称性

例1：由于

$$I_x \varphi(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial \theta_x} \varphi\left(R_x^{-1}(\vec{\theta})(\vec{r})\right)|_{\theta_x=0}$$

注意到

$$\varphi(R^{-1}(\vec{\theta}_x)\vec{r}) = \varphi(x, \cos\theta_x y + \sin\theta_x z, -\sin\theta_x y + \cos\theta_x z)$$
$$\equiv \varphi(\vec{r}\,') \equiv \varphi(x', y', z')$$

$$\left.\frac{\partial}{\partial \theta_x} \varphi(\vec{r}\,')\right|_{\theta_x=0} = \left.\frac{\partial y'}{\partial \theta_x} \frac{\partial \varphi}{\partial y'}\right|_{\theta_x=0} + \left.\frac{\partial z'}{\partial \theta_x} \frac{\partial \varphi}{\partial z'}\right|_{\theta_x=0}$$

$$= z \frac{\partial}{\partial y} \varphi(x,y,z) - y \frac{\partial}{\partial z} \varphi(x,y,z)$$

5.3 转动对称性

角动量算符——旋转群生成元的坐标表示

$$I_x = -y\frac{\partial}{\partial z} + z\frac{\partial}{\partial y} \equiv -\mathrm{i}J_x \equiv -\mathrm{i}J_1$$

$$I_y = -z\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial z} \equiv -\mathrm{i}J_y \equiv -\mathrm{i}J_2$$

$$I_z = -x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x} \equiv -\mathrm{i}J_z \equiv -\mathrm{i}J_3$$

J_x, J_y, J_z 是角动量算符，满足

$$[J_\alpha, J_\beta] = \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma$$

5.3 转动对称性

用生成元表达$SO(3)$群的元素：

单参数子群

$$D_z(\theta) = D(0,0,\theta)$$

满足方程

$$I_3 D_z(\theta) = \frac{d}{d\theta} D_z(\theta)$$

则

$$D_z(\theta) = \exp(I_3\theta) = \exp(-\mathrm{i}J_3\theta)$$

5.3 转动对称性

利用$SO(3)$的生成元和角动量算符，群元一般地表达为

$$D(\theta_1,\theta_2,\theta_3)=\exp\left[-\mathrm{i}\sum_{\alpha=1}^{3}J_\alpha\,\theta_\alpha\right]$$

也可以表达为欧拉转动

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)$$

自旋1/2系统

$$L_1=\frac{1}{2}\sigma_1\equiv\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},L_2=\frac{1}{2}\sigma_2\equiv\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},$$

$$L_3=\frac{1}{2}\sigma_3\equiv\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

5.3 转动对称性

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=\begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}\alpha} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\alpha} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}\gamma} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\gamma} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\frac{\beta}{2}, & -e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\frac{\beta}{2}, & e^{\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

5. 4 单粒子的角动量理论

由角动量算子$J_\alpha(\alpha = 1,2,3)$，定义总角动量算子

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$$

和阶梯算子

$$J_\pm = J_1 \pm iJ_2$$

有下列关系

$$[J^2, J_\alpha] = 0 \quad [J_z, J_\pm] = \pm J_\pm$$

$J_\pm, J_3$张成了旋转群$SO(3)$的李代数

以下讨论它的n维矩阵表示$SO(3) \to \mathbb{C}^n$

5.4 单粒子的角动量理论

Pauli矩阵给出了$SO(3)$的一个基本表示

$$J_\alpha \Rightarrow \frac{1}{2}\sigma_\alpha$$

$$\Gamma(J_3) = \begin{pmatrix} +1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

$$\Gamma(J_+) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Gamma(J_-) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

5.4 单粒子的角动量理论

通过二次量子化，由基本表示构造Jordan-Schwinger表示：

用 a_1 和 a_2 表示两个Boson的消灭算子，

则角动量的二次量子化为

$$J_+ = a_1^+ a_2,\ J_- = a_2^+ a_1,\ J_3 = \frac{1}{2}(a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2)$$

Fock空间为

$$\left\{ |n_1 n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!}} a_1^{+n_1} a_2^{+n_2} |0\rangle \middle| n_1, n_2 = 0,1,2\,\ldots \right\}$$

5.4 单粒子的角动量理论

$J_\pm$和J_3不改变总粒子数$n_1 + n_2$，即

$$N = a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2$$

是一个守恒量：

$$[N, J_\alpha] = 0$$

$$J^2 = J_3^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) = \frac{N}{2}\left(\frac{N}{2} + 1\right)$$

5.4 单粒子的角动量理论

$SO(3)$的Fock空间表示为

$$J_+|n_1n_2\rangle = \sqrt{n_2(n_1+1)}|n_1+1, n_2-1\rangle$$

$$J_-|n_1n_2\rangle = \sqrt{n_1(n_2+1)}|n_1-1, n_2+1\rangle$$

$$J_3|n_1n_2\rangle = \frac{1}{2}(n_1-n_2)|n_1, n_2\rangle$$

5.4 单粒子的角动量理论

角动量本征态

$$|j,m\rangle \equiv |j+m,j-m\rangle, \qquad m=-j,-j+1,\ldots j-1,j$$

满足

$$N=(j-m)+(j+m)=2j,$$

有标准角动量表示

于是

$$\begin{cases} J_{\pm}|j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|j,m\pm 1\rangle \\ J_3|j,m\rangle = m|j,m\rangle \\ J^2|j,m\rangle = j(j+1)|j,m\rangle \end{cases}$$

5.4 单粒子的角动量理论

$|j,m\rangle$构成了$SO(3)$的一个$2j+1$维的不可约表示，$D(j)$在整个希尔伯特空间上，总粒子数 N 变化时整个表示 D 分解为不可约表示，不可约表示的直和

$$D=\sum_{j=1/2}^{j=\infty}\oplus D(j)$$

5.4 单粒子的角动量理论

由Jordan-Schwinger表示计算$SO(3)$群的$D(\alpha,\beta,\gamma)$表示：

$$D(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle = \sum_{m}|j,m'\rangle\langle j,m'|D|j,m\rangle$$

其中矩阵元

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) \equiv \langle j,m'|D|j,m\rangle$$

$$= \langle j,m'|e^{-iJ_z\alpha}e^{-iJ_y\beta}e^{-iJ_z\gamma}|j,m\rangle$$

$$\equiv e^{-i(m'\alpha+m\gamma)}d^{(j)}_{m'm}(\beta)$$

5.4 单粒子的角动量理论

d矩阵

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \langle j, m' | e^{-iJ_y\beta} | j, m\rangle \equiv \langle j, m' | R_y(\beta) | j, m\rangle$$

$R_y(\beta)$作用在标准的角动量态上

$$R_y(\beta)|j,m\rangle = \frac{(Ra_1^{\dagger}R^{-1})^{j+m}(Ra_2^{\dagger}R^{-1})^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}R|0\rangle$$

$$\boxed{\text{其中简记}R \equiv R_y(\beta)}$$

5.4 单粒子的角动量理论

$$\left.\begin{aligned} R a_1^{+} R^{-1} &= a_1^{+}\cos\frac{\beta}{2} + a_2^{+}\sin\frac{\beta}{2} \\ R a_2^{+} R^{-1} &= a_2^{+}\cos\frac{\beta}{2} - a_1^{+}\sin\frac{\beta}{2} \end{aligned}\right\} *$$

记 $c = \cos\frac{\beta}{2},\ s = \sin\frac{\beta}{2}$

$$R|j,m\rangle = \sum d_{lm}^{(j)} |j,m\rangle$$

$$= \sum_{kl} \frac{(j+m)!\,(j-m)!}{\sqrt{(j+m-k)!\,k!\,(j-m-l)!\,l!}} \frac{(ca_1^{+})^{j+m-k}(a_2^{+}s)^{k}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}} \times [-sa_1^{+}]^{j-m-l}(a_2^{+}c)^{l}|0\rangle$$

5.4 单粒子的角动量理论

比较$d^{j}_{m'm}(\beta)$的定义：

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!}}{(j+m-k)!\,k!\,(j-m'-k)!\,(k+m'-m)!} \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \left(sin\frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'}$$

练习

证明

$$\left.\begin{aligned} R a_1^{\dagger} R^{-1} &= a_1^{\dagger}\cos\frac{\beta}{2} + a_2^{\dagger}\sin\frac{\beta}{2} \\ R a_2^{\dagger} R^{-1} &= a_2^{\dagger}\cos\frac{\beta}{2} - a_1^{\dagger}\sin\frac{\beta}{2} \end{aligned}\right\} *$$

利用公式

$$e^{iB}Ae^{-iB} = A + i[B,A] + \cdots + \frac{(i)^2}{2!}[B,[B,A]] + \left(\frac{i^n}{n!}\right)\overbrace{[B,[B,\cdots[B,A]]]}^{n\text{个}} + \cdots$$

可计算

$$[J_y, a_1^{\dagger}] = \frac{1}{2\mathrm{i}}a_2^{\dagger}$$

$$[J_y,[J_y,a^{\dagger}]] = \frac{1}{4}a_1^{\dagger}$$

5.4 角动量理论应用

任意自旋在磁场中的进动：

哈密顿量

$$\hat{H}(t) = \nu \vec{B}(t) \cdot \vec{J}$$

设

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iJ_z\omega t}|\varphi(t)\rangle$$

是

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$

的解

5.4 角动量理论应用

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = \{\underbrace{e^{iJ_z\omega t}\hat{H}(t)e^{-iJ_z\omega t} - \hbar\omega J_z}_{H'(t)}\}|\varphi(t)\rangle$$

利用角动量的算子性质

$$e^{iJ_z\omega t}J_x e^{-iJ_z\omega t} = J_x\cos\omega t - J_y\sin\omega t$$

$$e^{iJ_z\omega t}J_y e^{-iJ_z\omega t} = J_y\cos\omega t + J_x\sin\omega t$$

5.4 角动量理论应用

有效哈密顿量

$$H'(t) = \nu B_0 \hbar(\sin\theta J_x + (\cos\theta - \lambda)J_z)$$
$$= \hbar\omega_0(\sin\alpha J_x + \cos\alpha J_z)$$

$$\boxed{\lambda = \frac{\omega}{\nu B_0}}$$

$$\omega_0 = \nu B_0[1 + \lambda^2 - 2\cos\theta\lambda]^{1/2}$$
$$\sin\alpha = \frac{\sin\theta}{\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\cos\theta\lambda}}$$
$$\cos\alpha = \frac{\cos\theta - \lambda}{\sqrt{1 + \lambda^2 - 2\cos\theta\lambda}}$$

5.4 角动量理论应用

$$H' = \hbar\omega_0 e^{-iJ_y\alpha} J_z e^{iJ_y\alpha}$$

H'不含时间，其本征值为$E_m = m\hbar\omega_0$，对应的本征函数

$$|jm(\alpha)\rangle = e^{-iJ_y\alpha}|jm\rangle = \sum_{mm'} d^j_{m'm}(\alpha)|jm'\rangle$$

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_{m=-j}^{j} C_m\, e^{-i\omega_0 tm}|j, m(\alpha)\rangle$$

$$= \sum_{mm'=-j}^{j} C_m\, d^j_{m'm}(\alpha) e^{-im\omega_0 t}|j, m'\rangle$$

5.4 角动量理论应用

因此

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{mm'=-j}^{j} C_m\, d^j_{m'm}(\alpha) e^{-i(m\omega_0+m'\omega)t}|j,m'\rangle$$

其中

$$C_m = \langle j, m(\alpha)|\varphi(0)\rangle$$

$$= \sum_n \langle j, m| e^{iJ_y\alpha}|j,n\rangle\langle j,n|\varphi(0)\rangle$$

$$= \sum_n d^j_{mn}(-\alpha)\langle j,n|\varphi(0)\rangle$$

5.4 角动量理论应用

绝热极限下

$$\omega_0 \xrightarrow{\lambda\to 0} \nu B_0\left(1-\frac{\omega}{\nu B_0}\cos\theta\right)=\nu B_0-\omega\cos\theta$$

初值条件

$$|\psi(0)\rangle=|j,m(\alpha)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle=\underbrace{e^{-i\nu B_0 t}}\,\underbrace{e^{-im\omega t(1-\cos\theta)}}\,|j,m(\alpha,\beta)\rangle$$

明显包含了动力学相位和几何相位

5.5 角动量的耦合

两个子系统组成的复合体系：

$\{\varphi_\alpha(r_1)\}$ 和 $\{x_\beta(r_2)\}$张成希尔伯特空间 V_1 和 V_2 的基矢，

$$\{\varphi_2(r_1) \otimes x_\beta(r_2) | \alpha = 1,2, \ldots d_1, \beta = 1,2, \ldots d_2\}$$

张成了整个希尔伯特空间 $V = V_1 \otimes V_2$的基矢。

对

$$\forall \Phi(r_1) \equiv \psi(r_1, r_2) \in V$$

先固定 r_2，按V_1完备基展开

5.5 角动量的耦合

$$\psi(r_1, r_2) = \sum_{\alpha} C_\alpha(r_2)\psi_\alpha(r_1)$$

再把依赖于 r_2 的展开系数按 $x_\beta(r_2)$ 展开

$$C_\alpha(r_2) = \sum_{\beta} C_{\alpha\beta}\, x_\beta(r_2)$$

则有

$$\psi(r_1, r_2) = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}\, \psi_\alpha(r_1) x'_\beta$$

表 明

$\{\varphi_\alpha(r_1)\}, \{x_\beta(r_2)\}$是$V = V_1 \otimes V_2$ 的完备基

5.5 角动量的耦合

变换 D 同时作用于 V_1 和 V_2 上

$$D(g)\psi(r_1,r_2) = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}\, D^{(1)}(g)\psi_\alpha(r_1)D^{(2)}(g)x_\alpha(r_2)$$

不依赖于坐标的表示可写下

$$D(g)|\psi_\alpha\rangle \otimes |x_\beta\rangle = D^{(1)}(g)|\psi_\alpha\rangle \otimes D^{(2)}(g)|x_\beta\rangle$$

5.5 角动量的耦合

相应的无穷小生成元

$$I_k = \left. \frac{\partial D(g)}{\partial g_k} \right|_{g=0}$$

作用直积空间

$$I_k |\psi_\alpha\rangle \otimes |x_\beta\rangle = \frac{\partial}{\partial g_k} \left(D(g) |\psi_\alpha\rangle \otimes |x_\beta\rangle \right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial g_k} \left(D^{(1)}(g) |\psi_\alpha\rangle \otimes D^{(2)}(g) |x_\beta\rangle \right)$$

$$= I_k^{(1)} |\psi_\alpha\rangle \otimes |x_\beta\rangle + |\psi_\alpha\rangle \otimes I_k^{(2)} |x_\beta\rangle$$

有复合系统无穷小生成元的表达式

$$I_k = I_k^{(1)} \otimes I + I \otimes I_k^{(2)}$$

5.5 角动量的耦合

对于旋转群$SO(3)$，直积变换

$$R(g) = R^{(1)}(g) \otimes R^{(2)}(g)$$

的无穷小变换

$$J_\alpha = J_\alpha^{(1)} \otimes I + I \otimes J_\alpha^{(2)} = J_\alpha^{(1)} + J_\alpha^{(2)}$$

是单体变换的相加，非耦合基矢

$$\{|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle\}$$

构成总角动量的一个表示。

5.5 角动量的耦合

表示是可约的：

$$D^{[j_1]} \otimes D^{[j_2]} = \sum_{j=j_{\min}}^{j=j_{\max}} \oplus D^{[j]}$$

因为

$$J_z = J_z(1) + J_z(2), \qquad J_z|j,m;j_2,m_2\rangle = (m_1 + m_2)|\cdots\rangle$$

基最大取值为

$$J_{\max} = j_1 + j_2$$

最小取值为

$$j_{\min} = |j_1 - j_2|$$

即两个表示$D^{[j_\alpha]}(\alpha = 1.2)$约化成不可约表示的直和

5.5 角动量的耦合

$$\underset{(j_1>j_2)}{D^{[j_1]}\otimes D^{[j_2]}} = \begin{pmatrix} \underbrace{D^{[j_1-j_2]}}_{2(j_1-j_2)+1\text{维}} & & \\ & \underbrace{D^{[j_1-j_2+1]}}_{2(j_1-j_2)+3\text{维}} & \\ & & \underbrace{D^{[j_1+j_2]}}_{2(j_1+j_2)+1\text{维}} \end{pmatrix}$$

每一个表示在约化中只出现一次

5. 5 角动量的耦合

证明

预先假设 $D^{[j]}$ 出现的次数是 r_j，再证明 $r_j = 1.$

$$D = \sum \oplus\, r_j\, D^{[j]}$$

其中每一个 j 大于和等于 $|m|$ 表示

$$D^{[m]}, D^{[m+1]}, D^{[m+2]} \ldots$$

中都会出现一次 J_z 的本征值为 m，

则在 D 中 m 取的简并度为

$$d[m] = \sum_{j=|m|,|m|+1,\ldots} r_j$$

5. 5 角动量的耦合

$$r_j = d[j] - d[j+1]$$

非耦合基矢（假设$j_1 > j_2$）

$$J_z|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = (m_1 + m_2)|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$$

$$\boxed{d[m] = \begin{cases} 0, \ |m| \geq j_1 + j_2 \\ 2j_2 + 1, \ |m| \leq |j_1 - j_2| \\ j_1 + j_2 - |m| + 1, others \end{cases}}$$

5.5 角动量的耦合

①总角动量分量最大为$j_1 + j_2$

②$m < j_1 - j_2$时，有以下 $2j_2 + 1$ 个态是简并的

$$|j_1, m, j_2, 0\rangle, |j_1, m-1, j_2, 1\rangle, \ldots |j_1, m-j_2, j_2, j_2\rangle,$$

$$|j_2, -(m-1), j_2, -1\rangle, \ldots |j_2, -(m-j_2), j_2, -j_2\rangle$$

5.5 角动量的耦合

③当$m = j_1 + j_2 - 1$，有二度简并态

$$|j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle, |j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle$$

当$m = j_1 + j_2 - 2$，有三度简并态

$$|j_1, j_2 - 2\rangle, |j_1 - 2, j_2\rangle, |j_1 - 1, j_2 - 1\rangle$$

以此类推

$$\boxed{\begin{aligned} r_j &= d[j \mp 1] - d[j] \\ &= [(j_1 + j_2) + |m + 1| + 1] - [(j_1 + j_2) + |m| + 1] \\ &= |m + 1| - |m| \begin{cases} = 1, & |j_1 - j_2| \le m < |j_1 + j_2| \\ & = 0 \end{cases} \end{aligned}}$$

5.5 角动量的耦合

由$SO(3)$群直积约化中$D^{[j]}$的耦合基矢

$$|j,m\rangle \equiv |(j_1j_2)jm\rangle = \sum C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2} |j_1m_1;j_2m_2\rangle \quad *$$

其中CG系数

$$C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2} = \langle j_1m_1j_2m_2|j,m\rangle$$

由递推公式求得。

5.5 角动量的耦合

$J_+ = J_+(1) + J_+(2)$作用于两边：

$$J_+|jm\rangle = \sum C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}[J_+(1)|j_1,m_1\rangle \otimes |j_2,m_2\rangle + |j_1,m_1\rangle \otimes J_+(2)|j_2,m_2\rangle]$$

$$= \sum \sqrt{(j-m)(j+m-1)}C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}|j_1m_1j_2m_2\rangle$$

$$= \sum C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}\sqrt{(j_1-m_1)(j_1+m_1-1)}|j_1m_1+1\rangle \otimes |j_2m_2\rangle + (1 \leftrightarrow 2)$$

用$J_- = J_-(1) + J_-(2)$作用，有类似关系。

5.5 角动量的耦合

C-G系数还必须满足一些正交关系：

$$\langle j'm'|jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

$$\sum_{m_1 m_2} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} C^{j'm'}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = \delta_{m_1 m'}\delta_{jj'}$$

5.5 角动量的耦合

递推关系

5.5 角动量的耦合

自旋轨道耦合例子：计算$H = g\,\vec{L}\cdot\vec{s}$的本征值和本征函数

取$j_1 = l, j_2 = 1/2,$

记

$$|l,m\rangle \equiv |m\rangle, |j = 1/2, m_s\rangle = |m_s\rangle (m_s = \pm 1/2)$$

而非耦合基

$$|l,m,1/2,m_s\rangle \equiv |m,m_s\rangle$$

耦合后总角动量$j = l \pm 1/2$

$$|j,m\rangle = \sum_{m',m_s} C^{jm}_{l,m',1/2,m_s} |m',m'_s\rangle$$

用$J_- = J_-(1) + J_-(2)$作用式子两边

5.5 角动量的耦合

$$\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}+m+1)(l+\frac{1}{2}-m\right)}\,C^{l+\frac{1}{2},m}_{l,m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\sqrt{\left(l+m+\frac{1}{2})(l-m+\frac{1}{2}\right)}\,C^{l+\frac{1}{2},m+1}_{l,m+\frac{1}{2},m+1}$$

$$C^{l+\frac{1}{2},m}_{l,m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\,C^{l+\frac{1}{2},m+1}_{l,m+\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$$

重复利用该公式

$$C^{l+\frac{1}{2},m}_{l,m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}}\,C^{l+\frac{1}{2},m+2}_{l,m+\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$$

$$=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{5}{2}}{l+m+\frac{7}{2}}}\,C^{l+\frac{1}{2},m+3}_{l,m+\frac{5}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\cdots$$

$$=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,C^{l+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}}_{l,l,\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$$

5.5 角动量的耦合

约定

$$C^{l+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}}_{l,l,\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=1,$$

则

$$|l+\frac{1}{2},m\rangle=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle+\xi\,|m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$$

$$|l-\frac{1}{2},m\rangle=\eta\,|m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle+\sigma\,|m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$$

利用正交关系得到

$$\xi=\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}},\eta=-\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}},\sigma=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$$

5.5 角动量的耦合

坐标表象下

$$\langle \vec{r}\,|l,m\rangle = Y_l^m(\theta\varphi)$$

$$\langle s|\frac{1}{2},m_s\rangle = x_{ms} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} or \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

5.5 角动量的耦合

于是得到 $H = g\vec{L}\cdot\vec{s}$ 本征函数为

$$y(j = l \pm \frac{1}{2}, m) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix} \pm\sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} & Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} & Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}$$

相应的本征值为

$$E_{lm} = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] = \frac{1}{2}l\hbar^2\sigma r - \frac{1}{2}(l+1)\hbar^2$$

5.5 角动量的耦合

引入3-j符号

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} = (-1)^{j_1-j_2+m}\sqrt{(2j+1)}C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}$$

5.5 角动量的耦合

（1）偶数次交换3-j符号值不变

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}$$

（2） $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}$

（3） $\sum_{j_3 m_3} (2j_3+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}$

（4） $\sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j'_3 \\ m_1 & m_2 & m'_3 \end{pmatrix} = (2j_3+1) \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3}$

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

矢量算子

位置矢量$r = (x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z)$的旋转

$$R(\theta)x_j = \sum_l R_{jl}(\theta)x_l$$

$R_{jl}(\theta)$定义了旋转群$SO(3)$的矢量表示$R^{(1)}$

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

矢量算子

任何一个三维矢量

$$v = (v_1, v_2, v_3)$$

在$SO(3)$作用下变换形式如上一样

$$R(\theta)v_j = \sum_l R_{jl}(\theta)v_l$$

对算符组，$\vec{A} = (A_1, A_2, A_3)$若在旋转变化下

$$\hat{A} - \hat{A}': R^{+}(\theta)A_j R(\theta) = \sum_l R_{jl} A_l$$

则称其为矢量算子

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

无穷小变换：$\theta \sim 0$时，一般转动算子

$$R(\theta) = e^{-i\theta \vec{L}\cdot\vec{n}}$$

变为

$$R(\theta) \sim 1 - i\theta\, \vec{L} \cdot \vec{n}$$

$$(1 + i\theta\, \vec{L} \cdot \vec{n})A_j(1 - i\theta\, \vec{L} \cdot \vec{n}) = \sum R_{jl}\, A_l$$

于是有

$$A_j + \frac{\theta}{i}[A_j, \vec{L} \cdot \vec{n}] = \sum_l R_{jl}\, A_j$$

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

取n为z方向，则

$$R(\theta)=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\simeq\begin{bmatrix}1 & -\theta & 0\\ +\theta & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

取$j=1$，

$$A_x+\frac{\theta}{i}[A_x,L_z]=A_x-\theta A_y$$

于是

$$[A_x,L_z]=-iA_y$$

同样代入各个分量，则

$$[A_l,L_j]=i\epsilon_{ljk}A_k \quad *$$

上式可用来判断一组算符$\{Al\}$是否是矢量算子

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

张量算子

$$L \pm |j,m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|j,m \pm 1\rangle$$

$$L_z|j,m\rangle = m|j,m\rangle$$

当$j = 1$，$m = 0, \pm 1$, 角动量态$|1,0\rangle, |1,\pm 1\rangle$的坐标表示为

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$$

$$Y_1^{\pm} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x \pm iy}{\sqrt{2}r}$$

$|1,0\rangle, |1,\pm 1\rangle$的变换方式与$x, y, z$一样（重新组合一下）

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

对应$|j,m\rangle$的$2j+1$个算符，

$$\left\{T_m^{[l]}|m=-l,-l+1,l-1,l\right\}$$

如果满足对易关系

$$[L_z,T_m^{[l]}]=mT_m^{[l]}$$

$$[L_\pm,T_m^{[l]}]=\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}T_{m\pm 1}^{[l]}$$

则称，$T_m^{[l]}(m=-l,\ldots l)$构成$SO(3)$群的l阶不可约张量算子

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

作业：证明两张量算子可以耦合出更高阶张量算子

$$T_k^{[j]} = \sum_{m,n} C_{l,m;s,n}^{jk} T_m^{[l]} T_n^{[s]}$$

$$j = l + s, l + s - 1, \dots l - s$$

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

Wigner-Eckart定理

设$|\alpha; j, m\rangle$代表角动量量子态，α代表其它量子数。则张量算子$T_q^{[k]}$的矩阵元

$$\langle \alpha'; j', m' | T_q^{[k]} | \alpha; j, m\rangle = C_{j,m,kq}^{j'm'} \frac{\langle \alpha', j' \| T^{[k]} \| \alpha, j\rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

其中$\langle \alpha', j' \| T^{[k]} \| \alpha, j\rangle$是与$m, m'$和 q 无关的数，称为约化矩阵元

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

Wigner-Eckart定理

$$\langle\alpha';j',m'|[L\pm,T_q^k]|\varepsilon;j,m\rangle$$

$$=\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\langle\alpha';j',m'|T_q^{[k]}|\alpha;j,m\rangle$$

$$=\sqrt{(j'\pm m')(j'\mp m'+1)}\langle\alpha';j',m'\mp 1|T_q^k|\alpha;j,m\rangle$$

$$-\sqrt{(j\pm m)(j\mp m+1)}\langle\alpha';j',m'|T_q^k|\alpha;j,m\pm 1\rangle$$

比较CG系数的递推关系

$$\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}C_{j',m',kq\pm 1}^{j'm'}=$$

$$\sqrt{(j'\pm m')(j'\mp m'+1)}C_{kq,jm}^{jm\mp 1}-\sqrt{(j\pm m)(j\mp m+1)}C_{kq,jm\pm 1}^{j'm'}$$

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

则有解

$$\langle \alpha'; j', m' | T_q^{[k]} | \alpha; j, m \rangle \propto C_{kq,j,m}^{j'm'}$$

由于

$$\sum m' C_{kq,jm}^{j'm'} |kq\rangle \otimes |jm\rangle = J_z |(kj)j'm'\rangle$$

$$= \sum (k+q) C_{kqjm}^{j'm'} |kq\rangle \otimes |jm\rangle$$

$$= 0$$

若$m' \neq k + q, \quad C_{kqjm}^{j'm'} = 0$

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

根据W-E定理有选择定则：

①仅当$m' = m + q$时，$\langle\alpha'; j', m'|T_q^{[k]}|\alpha; j, m\rangle$才不为零。
②仅当$j' = k + j, \ldots |k - j|$时，矩阵元才不为零。

$$\boxed{\begin{aligned}&\langle\alpha'; j', m'|[L_z, T_q^{[k]}] - qT_q^{[k]}|\alpha; j, m\rangle = 0\\&= [(m' - m) - q]\langle\alpha'; j', m'|T_q^{[k]}|\alpha; j, m\rangle\end{aligned}}$$

于是有选择定则(I)。
选择定则(I)由群的直积分解给出。

$$D^{[j]} \otimes D^{[k]} = \sum_{s=|j-k|}^{j+k} D^{[S]}$$

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

例：选择定则的一个重要应用是估算跃迁的强度。

$$H = H_0 + \xi T_k^{[q]}$$

从$|\alpha, l, m\rangle$到$|\alpha, l, m'\rangle$和$|\alpha, l, m''\rangle$的两个跃迁的强度之比只由对称性决定。

5.6 不可约张量算符与Wigner-Eckart定理

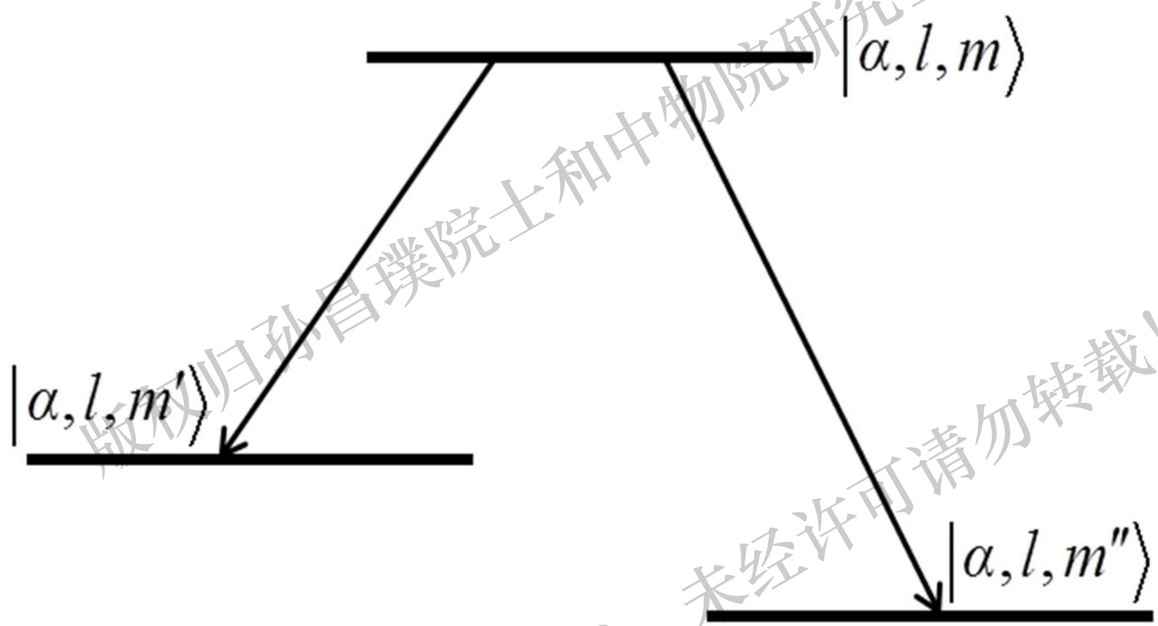
$$\left|\langle\alpha;j,m|T_q^{[k]}|\alpha;j,m'\rangle\right|^2=\left|\frac{\langle\alpha,j\|T^{[k]}\|\alpha,j\rangle}{\sqrt{2j+1}}C_{kq,jm'}^{jm}\right|^2\equiv F(m\to m')$$

$$\left|\langle\alpha;j,m|T_q^{[k]}|\alpha;j,m''\rangle\right|^2=\left|\frac{\langle\alpha,j\|T^{[k]}\|\alpha,j\rangle}{\sqrt{2j+1}}C_{kq,jm''}^{jm}\right|^2\equiv F(m\to m'')$$

于是，我们得到跃迁几率的比值

$$\frac{F(m\to m')}{F(m\to m'')}=\left|\frac{C_{kq,jm'}^{jm}}{C_{kq,jm''}^{jm}}\right|^2$$ 这里C-G系数完全决定于$SO(3)$的对称性

W-E定理：跃迁矩阵和分支比



根据W-E定理，在相互作用形式未知情况下，对称性分析可以做出跃迁选择和跃迁强度的分支比

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

根据Wigner定理，如果氢原子具有表观的对称性$SO(3)$，则能级简并度是其不可约表示$D^{[l]}$的维数$2l+1$。然而，氢原子能级简并度为

$$f_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$$

这意味着氢原子可能具有更大的对称性。

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

对于三维氢原子，当年泡利发现了新的守恒量—Runge-Lenz(RL) 矢量，以精妙的手法给出了能级的精确解。定义RL矢量为下列厄米算子：

$$R = \frac{1}{2\mu k}(p \times L - L \times p) - e_r$$

其中$e_r = \vec{r}/_r$为径向单位矢量。

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

利用

$$p \times L + L \times p = 2i\hbar p$$

R可重新表达为

$$R = \frac{1}{\mu k}(p \times L - i\hbar p) - e_r$$

当$\hbar \to 0$时，R将回到经典R-L矢量。可以证明

$$[L, H] = 0,\ [R, H] = 0$$

即除了轨道角动量L之外，还有R也是守恒量。

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

L的三个分量满足下列对易关系式

$$\left[L_\alpha, L_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma, \ \alpha, \beta, \gamma = x, y, z$$

即L_x, L_y, L_z构成三维转动群$SO(3)$的李代数。

根据R的定义，可以证明

$$\left[L_\alpha, R_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}R_\gamma$$

$$[R_\alpha, R_\beta] = -\frac{2i\hbar}{\mu k^2}H\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma$$

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

上述对易关系中出现了额外的算子H，6个算子L_x, L_y, L_z, R_x, R_y, R_z彼此之间的对易式是不封闭的。

然而，我们的讨论如果局限于$E<0$的某一能级的诸简并态所张开的子空间，则H可以代之为常数$E<0$, 于是

$$A=\sqrt{-\frac{\mu k^2}{2E}}R,\ (E<0)$$

则上式改为

$$[L_\alpha, A_\beta]=i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma,\qquad [A_\alpha, A_\beta]=i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma$$

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

从上式看出，L和A的诸分量构成一个封闭的李代数。令

$$\left(L_x,\ L_y, L_z\right) \equiv (L_{23},\ L_{31}, L_{12}) = -\left(L_{32},\ L_{13}, L_{21}\right)$$
$$\left(A_x,\ A_y, A_z\right) \equiv (L_{14}, L_{24}, L_{34}) = -\left(L_{41},\ L_{42}, L_{43}\right)$$

可概括为

$$[L_{ij}, L_{kl}] = i(\delta_{jk} L_{li} + \delta_{il} L_{kj})$$

这6个反对称算子$L_{ij} = -L_{ji}$ $(i,\ j = 1,2,3,4)$ 正好张成$SO(4)$群的李代数。即三维氢原子具有动力学对称性$SO(4)$.

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

动力学对称性：

对于哈密顿量为

$$H = p^2/2m + V(\mathbf{r})$$

的系统，可能存在一种变换W，如果$[W, V(\mathbf{r})] = 0$，则称为系统具有几何对称性W，也可能存在一种更为一般的情况-动力学对称性

$$[W, V(\mathbf{r})] = \xi \neq 0 \qquad [W, \frac{p^2}{2m}] = -\xi \neq 0$$

$$[W, \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})] = 0$$

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

利用氢原子$SO(4)$对称性求解氢原子的能谱。为此，我们证明

$$R^2 = \frac{2H}{\mu k^2}(L^2 + \hbar^2) + 1$$

结合

$$\mathbf{A} = \sqrt{-\frac{\mu k^2}{2E}}\mathbf{R},\ (E<0)$$

得

$$A^2 = -(L^2 + \hbar^2) - \frac{\mu k^2}{2E}$$

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

考虑到$\mathbf{R}\cdot\mathbf{L}=\mathbf{A}\cdot\mathbf{L}=0$，上式可改为

$$(\mathbf{A}+\mathbf{L})^2+\hbar^2=-\frac{\mu k^2}{2E}$$

令

$$\mathbf{I}=\frac{1}{2}(\mathbf{L}+\mathbf{A}),\ \mathbf{K}=\frac{1}{2}(\mathbf{L}-\mathbf{A})$$

其逆表示式为$\mathbf{L}=\mathbf{I}+\mathbf{K},\ \mathbf{A}=\mathbf{I}-\mathbf{K}$

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

容易证明$I^2 = K^2$

$$[I_\alpha, K_\beta] = 0$$

$$[I_\alpha, I_\beta] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}I_\gamma$$

$$[K_\alpha, K_\beta] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}K_\gamma$$

即$\mathbf{I}$与$\mathbf{K}$对易，$\mathbf{I}, \mathbf{K}$的分量各自构成一个$SO(3)$群的无穷小算子。

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

$I^2 = K^2$的本征值是

$$I^2 \to I(I+1)\hbar^2,\ K^2 \to K(K+1)\hbar^2$$

其中

$$I,K = \begin{cases} 0,1,2\ldots \\ 1/2,3/2,5/2\ldots \end{cases}$$

因此

$$(A+L)^2 = 4I^2 \to 4I(I+1)\hbar^2$$

代入

$$(A+L)^2 + \hbar^2 = -\mu k^2/2E\,,$$

得

$$-\mu k^2/2E = (2I+1)^2\hbar^2$$

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

由此我们得到

$$E=-\frac{\mu k^2}{2\hbar^2 n^2}=-\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2},\ n=(2I+1)=1,2,3,\ldots$$

这就是著名的Bohr氢原子束缚态能级公式。

现在我们以代数方式重新得到了这个结果。

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

能级简并度可由如下方式求出：

按$L = I + K,\ A = I - K$式，L可看成大小相等的两个角动量I和K的相加，因此

$$
\begin{aligned}
L &= |I-K|, |I-K|+1, \ldots, (I+K) \\
&= 0,1,2, \ldots, 2I \\
&= 0,1,2, \ldots, (n-1)
\end{aligned}
$$

由此得到能级E_n的简并度

$$f_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2L+1) = n^2$$

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

属于同一能级E_n的诸简并态，可能是偶宇称态，也可能是奇宇称态。这与体系含有两类守恒量有密切关系，即L为轴矢量(空间反射下不变)，而R为极矢量(空间反射下改变正负号)。

以上例子表明，如果把氢原子简单理解成仅具有表观的$SO(3)$对称性，实际中却发现了更多的简并，很容易误解这种简并是偶然发生的，与对称性无关，当然Wigner定理不成立。

而氢原子例子表明，$SO(3)$不是它的完全对称性群，把更多的对称性群包含进来，形成更大对称性群，Wigner定理就起作用了。

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

关于“偶然简并”，不少教科书中常常把参数交叉出现的简并叫偶然简并，并指出这种简并与对称性无关，其实这种简并意味着更高的对称性。为理解这个问题，我们考虑塞曼效应——随外磁场变化导致的能级交叉。

5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

体系的哈密顿量

$$H = \Omega L^2 + BL_z$$

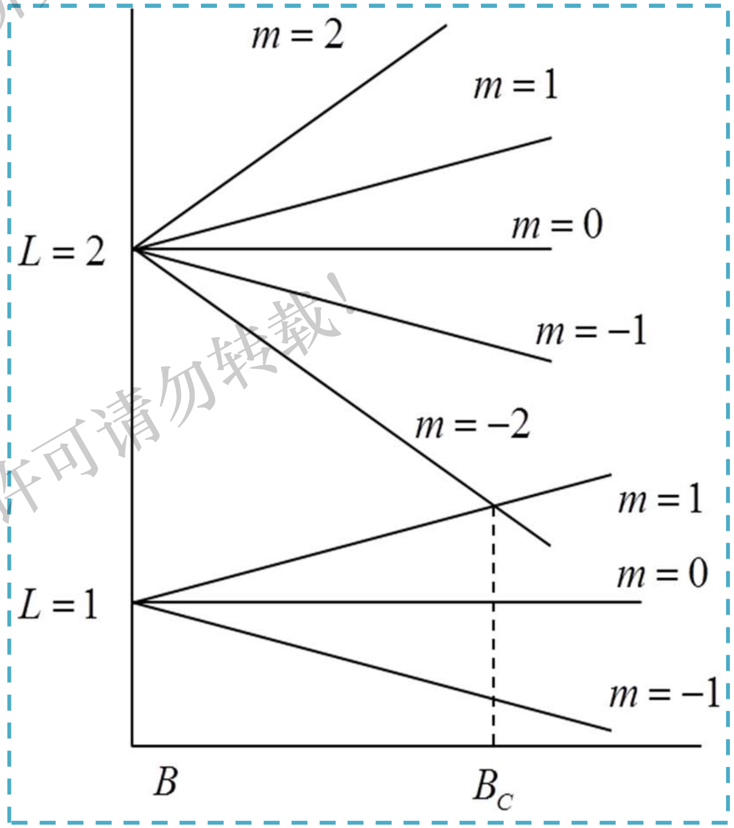
显然角动量态 $|L,m\rangle$ 是 H 的本征态，

相应的本征值

$$E_{lm} = \Omega L(L+1) + Bm$$

其中

$$m = -L, -L+1, \ldots L-1, L$$



5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

为了简单起见，我们考虑$L = 1, 2$

当$B = B_C$，$E_{2-2} = 6\Omega - 2B_C$和$E_{11} = 2\Omega_C + B_C$简并，

显然$B_C = \frac{4}{3}\Omega$, $B \neq B_C$，系统的对称

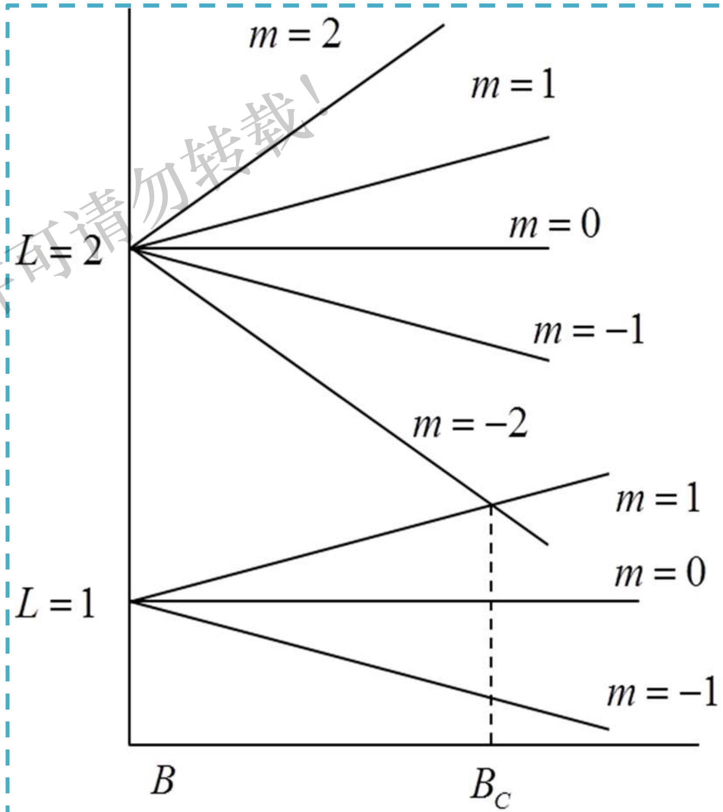
性为$SO(2)$，而“偶然简并”出现时，

系统的对称性不再是$SO(2)$， 这是

因为算符

$$A = |2,-2\rangle\langle 1,1| + |1,1\rangle\langle 2,-2|$$

在$B = B_C$时，与H可对易



5.7 氢原子的SO(4)对称性和偶然简并

$$HA = E_{2-2}|2,-2\rangle\langle 1,1| + E_{11}|1,1\rangle\langle 2,-2| = AH$$

因$B = B_C$出现更大的对称性变换A。

事实上，子空间$\{|1,1\rangle, |2,-2\rangle\}$在$B = B_C$时变成简并的不变子空间，其上的任何幺正变换$u \in SU(2)$在$B = B_C$是$H$的一个对称性群。

因此，我们的结论是：

任何简并的出现都不是偶然，它们一定与潜在的对称性相联系。