15-1

2023年12月17日 16:07

CH 15 角动量耦合

§15.1 自旋-轨道耦合

- 上一章中我们通过氢原子在磁场中的行为得到了描述自旋的理论框架.
- 在磁场中，氢原子电子的哈密顿量为

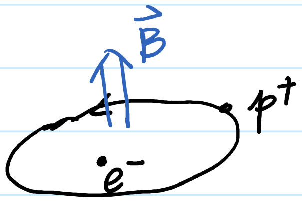
$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} - \frac{g}{2M}\vec{B}\cdot\hat{\vec{L}} - \frac{g}{M}\vec{B}\cdot\hat{\vec{S}}$$

其中第三项是自旋和外磁场的相互作用

- 实际上，在没有外磁场时，电子也能感受到一个磁场，来自于电子和质子的相对运动.

在电子的静止系中

经典轨道:



运动的质子产生电流，进而在电子所在位置产生感应磁场

在量子力学中，质子的运动用波函数描述，但结论不变.

由于该磁场来自于电子和质子的相对转动，所以在质心系中该磁场应正比于电子的轨道角动量 $\hat{\vec{L}}$.

从实验上可得

$$\hat{H}_{so} = (g-1)\frac{e^2}{2M^2c^2}\frac{\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}}{|\hat{\vec{x}}|^3}$$

称为自旋-轨道耦合项

spin (自旋) orbit (轨道)

因为Dirac方程可得 $g=2$，所以 Dirac方程推导出该项为

$$\hat{H}_{so} = \frac{e^2}{2M^2c^2}\frac{\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}}{|\hat{\vec{x}}|^3}$$

15-2

2023年12月17日 16:41

没有外磁场时

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(|\hat{x}|)$$

在没有引入 H_{so} 前，氢原子电子的本征态为 $\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{S}^2, \hat{S}_3$ 的共同本征态

引入 $\hat{H}_{so}$ 后，我们首先需检验 Ex 15.1

Ex 15.1 验证 $\hat{H}_0+\hat{H}_{so}$ 与 $\hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{S}^2, \hat{S}_3$ 是否仍对易

解：只需验证 $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}} = \hat{L}_i \hat{S}_i$

$$[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{L}^2] = \hat{S}_i[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$$
$$[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{S}^2] = \hat{L}_i[\hat{S}_i, \hat{S}^2] = 0$$
$$[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{L}_3] = \hat{S}_i[\hat{L}_i, \hat{L}_3] \neq 0 \quad (除了 i=3)$$
$$[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{S}_3] = \hat{L}_i[\hat{S}_i, \hat{S}_3] \neq 0 \quad (除了 i=3)$$ //

考虑到经典情况，角动量为矢量，2个角动量相加仍为矢量。

def 总角动量 $\vec{J} = \vec{L}+\vec{S}$

现在将其升级成算符 $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}}$

Ex 15.2 证明 $\hat{J}^2$，$\hat{J}_3$，$\hat{H}_0+\hat{H}_{so}$ 两两对易

证明：
$$[\hat{J}^2, \hat{J}_3] = [\hat{L}^2+\hat{S}^2+2\hat{L}_i\hat{S}_i, \hat{L}_3+\hat{S}_3]$$
$$= 2[\hat{L}_i\hat{S}_i, \hat{L}_3+\hat{S}_3]$$
$$= 2\hat{L}_i[\hat{S}_i, \hat{L}_3+\hat{S}_3] + 2[\hat{L}_i, \hat{L}_3+\hat{S}_3]\hat{S}_i$$
$$= 2\hat{L}_i\, i\hbar\,\varepsilon_{i3k}\hat{S}_k + 2i\hbar\,\varepsilon_{i3k}\hat{L}_k\hat{S}_i$$
$$= 2i\hbar\,\varepsilon_{i3k}(\hat{L}_i\hat{S}_k + \hat{L}_k\hat{S}_i) = 0$$

$$\hat{H}_{SO} = (g-1)\frac{e^2}{2M^2c^2}\frac{1}{|\vec{x}|^3}\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}$$

$$[\hat{J}_i, \hat{H}_0+\hat{H}_{SO}] = [\hat{L}_i+\hat{S}_i, \hat{H}_0] + [\hat{L}_i+\hat{S}_i, \hat{H}_{SO}]$$

$$= (g-1)\frac{e^2}{2M^2c^2}\left\{\underbrace{\left[\hat{L}_i+\hat{S}_i, \frac{1}{|\vec{x}|^3}\right]}_{=0}\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}} + \frac{1}{|\vec{x}|^3}[\hat{L}_i+\hat{S}_i, \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}]\right\}$$

=0，见 Ex 12.4

- $[\hat{L}_i+\hat{S}_i, \hat{L}_j\hat{S}_j] = [\hat{L}_i, \hat{L}_j]\hat{S}_j + \hat{L}_j[\hat{S}_i, \hat{S}_j]$

$$= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{S}_j + \hat{L}_j i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$$

$$= i\hbar\varepsilon_{ijk}(\hat{L}_k\hat{S}_j + \hat{L}_j\hat{S}_k)$$

$$= 0$$

$$\Downarrow$$

$$= 0$$

$$\Rightarrow [\hat{J}_3, \hat{H}_0+\hat{H}_{SO}] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{H}_0+\hat{H}_{SO}] = [\hat{J}_i\hat{J}_i, \hat{H}_0+\hat{H}_{SO}] = 0 \quad //$$

所以我们可以取 $\hat{H}_0+\hat{H}_{SO}$，$\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_3$ 的共同本征态

首先研究 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_3$ 的本征态

Ex 15.3 证明 $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$

证明: $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = [\hat{L}_i+\hat{S}_i, \hat{L}_j+\hat{S}_j] = [\hat{L}_i, \hat{L}_j] + [\hat{S}_i, \hat{S}_j]$

$$= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k + i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$$

$$= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k \quad //$$

15-4

2023年12月17日 18:44

因为 $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$ 为总角动量，所以其满足角动量的对易关系、一点也不奇怪.

因为 $\hat{J}_i$ 满足角动量对易关系，所以其本征态为 $|j,m_j>$，
其中 $j=\frac{k}{2}$ $(k=0,1,2\ldots)$，$m_j=-j\ldots j$

$$\hat{J}^2|j,m_j> = j(j+1)\hbar^2|j,m_j>$$

$$\hat{J}_3|j,m_j> = m_j\hbar|j,m_j>$$

def. $\hat{J}_\pm=\hat{J}_1\pm i\hat{J}_2$

$$\hat{J}_+|j,m_j> = \sqrt{j(j+1)-m_j(m_j+1)}\,\hbar\,|j,m_j+1>$$

$$\hat{J}_-|j,m_j> = \sqrt{j(j+1)-m_j(m_j-1)}\,\hbar\,|j,m_j-1>$$

接下来的问题是 $|j,m_j>$ 和 $|l,m_l>$，$|s,m_s>$ 什么关系.

15-5

2023年12月18日 6:58

§15.2 自旋-自旋耦合

由于$\hat{L}$有求导属性，分析起来较复杂，我们先考虑两个自旋空间的耦合，从中理解角动量耦合的方式

Ex 15.4 先考虑一个简单的问题，只考虑两个电子的自旋空间 $V_{S,a}\otimes V_{S,b}$

两个电子的自旋态分别为 $|s_a,m_a\rangle$ 和 $|s_b,m_b\rangle$

定义 $\hat{S}_c=\hat{S}_a+\hat{S}_b$，$\hat{S}_c$的本征态为 $|s_c m_c\rangle$

求 $|s_c,m_c\rangle$ 和 $|s_a,m_a\rangle\otimes|s_b,m_b\rangle$ 的关系

解：定义4个自旋直积空间的态为

$$|++\rangle=|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$|+-\rangle=|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a\otimes|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$|-+\rangle=|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$|--\rangle=|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a\otimes|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$\hat{S}_{c,3}\equiv\hat{S}_{1,3}+\hat{S}_{2,3}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_{c,3}|++\rangle&=(\hat{S}_{a,3}+\hat{S}_{b3})|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2\\&=(\hat{S}_{a,3}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1)\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2+|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1\otimes(\hat{S}_{b3}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2)\\&=\frac{\hbar}{2}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2+\frac{\hbar}{2}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2\\&=\hbar|++\rangle\end{aligned}$$

$$\hat{S}_{c3}|+,-\rangle=0|+,-\rangle$$

$$\hat{S}_{c3}|-,+\rangle=0|-+\rangle$$

$$\hat{S}_{c3}|-,-\rangle=-\hbar|-,-\rangle$$

所以这4个态仍为$\hat{S}_{c3}$的本征态，其中$|+-\rangle$和$|-+\rangle$简并

下面验证 $\hat{S}_c^2 = \hat{S}_a^2 + 2\hat{S}_a\cdot\hat{S}_b + \hat{S}_b^2$

$$= \hat{S}_a^2 + \hat{S}_b^2 + 2(\hat{S}_{a1}\hat{S}_{b1} + \hat{S}_{a2}\hat{S}_{b2} + \hat{S}_{a3}\hat{S}_{b3})$$

$$= \hat{S}_a^2 + \hat{S}_b^2 + 2\hat{S}_{a3}\hat{S}_{b3} + \hat{S}_{a+}\hat{S}_{b-} + \hat{S}_{a-}\hat{S}_{b+}$$

$$\hat{S}_c^2|++\rangle = (\hat{S}_a^2 + \hat{S}_b^2 + 2\hat{S}_{a3}\hat{S}_{b3} + \cancel{\hat{S}_{a+}\hat{S}_{b-}} + \cancel{\hat{S}_{a-}\hat{S}_{b+}})|++\rangle$$

因为 $\hat{S}_{a+}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a = 0$

$$= [\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\hbar^2 + \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\hbar^2 + 2*\tfrac{\hbar}{2}\tfrac{\hbar}{2}]|++\rangle$$

$$= \underbrace{2}_{=1(1+1)}\hbar^2|++\rangle$$

$$\hat{S}_c^2|--\rangle = (\hat{S}_a^2 + \hat{S}_b^2 + 2\hat{S}_{a3}\hat{S}_{b3} + \cancel{\hat{S}_{a+}\hat{S}_{b-}} + \cancel{\hat{S}_{a-}\hat{S}_{b+}})|--\rangle$$

$$= [\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\hbar^2 + \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\hbar^2 + 2(-\tfrac{\hbar}{2})(-\tfrac{\hbar}{2})]|--\rangle$$

$$= 2\hbar^2|--\rangle$$

$$\hat{S}_c^2|+-\rangle = (\hat{S}_a^2 + \hat{S}_b^2 + 2\hat{S}_{a3}\hat{S}_{b3} + \cancel{\hat{S}_{a+}\hat{S}_{b-}} + \hat{S}_{a-}\hat{S}_{b+})|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a \otimes |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$= (\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}\hbar^2 + \tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}\hbar^2 + 2\cdot\tfrac{1}{2}(-\tfrac{1}{2})\hbar^2)|+-\rangle$$

$$+ (S_{a-}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a) \otimes (\hat{S}_{b+}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b)$$

- $S_{a-}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)}\,\hbar\,|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a$

  $= \hbar|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a$
- $S_{b+}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_b = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}\,\hbar\,|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_b$

  $= \hbar|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_b$

$$= \hbar^2|+-\rangle + \hbar^2|-+\rangle$$

15-7

2023年12月17日 20:31

$$\hat{S}_c^2|-+\rangle=(\hat{S}_a^2+\hat{S}_b^2+2\hat{S}_{a3}\hat{S}_{b3}+\hat{S}_{a+}\hat{S}_{b-}+\cancel{\hat{S}_{a-}\hat{S}_{b+}})|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$=\left(\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}\hbar^2+\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}\hbar^2+2(-\tfrac{\hbar}{2})(\tfrac{\hbar}{2})\right)|-+\rangle$$

$$+\hbar^2|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a\otimes|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$=\hbar^2|-+\rangle+\hbar^2|+-\rangle$$

所以 $|++\rangle$ 和 $|--\rangle$ 为 $\hat{S}_c^2$ 的本征值为 $2\hbar^2$ 的本征态

$|+-\rangle$ 和 $|-+\rangle$ 不是 $\hat{S}_c^2$ 的本征态

因为 $|+-\rangle$ 和 $|-+\rangle$ 为 $\hat{S}_{c3}$ 的简并本征态，所以

$$\hat{S}_{c3}(d_1|+-\rangle+d_2|-+\rangle)=0$$

- 是否可以取 d_1 和 d_2，使 $d_1|+-\rangle+d_2|-+\rangle$ 同时为 $\hat{S}_c^2$ 的本征态？

$$\hat{S}_c^2(d_1|+-\rangle+d_2|-+\rangle)$$

$$=d_1\hbar^2(|+-\rangle+|-+\rangle)+d_2\hbar^2(|+-\rangle+|-+\rangle)$$

$$=(d_1+d_2)\hbar^2(|+-\rangle+|-+\rangle)$$

(1) 当 $d_1=d_2$ 时

$$\hat{S}_c^2 d_1(|+-\rangle+|-+\rangle)=2d_1\hbar^2(|+-\rangle+|-+\rangle)$$

$1\cdot(1+1)$ 总角动量为 1

考虑到归一化：$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle+|-+\rangle)$

(2) 当 $d_1=-d_1$ 时

$$\hat{S}_c^2 d_1(|+-\rangle-|-+\rangle)=0$$ 总角动量为 0

考虑到归一化：$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle-|-+\rangle)$

15-8

2023年12月18日 7:14

综上，对于4维 $V_{sa}\otimes V_{sb}$ 空间，我们可以重新取基，使新的基为 $\hat{S}_c^2=(\hat{S}_a+\hat{S}_b)^2$ 和 $\hat{S}_{c3}$ 的本征态。

$$|S_c=1,m_c=1;S_a=\tfrac{1}{2},m_a=\tfrac{1}{2};S_b=\tfrac{1}{2},m_b=\tfrac{1}{2}\rangle=|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a\otimes|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

多余指标，因为 $m_c=m_a+m_b$

稍后可看到 m_a 也为多余指标

由 S_c, m_c, S_a 和 S_b 即可得到右手边的态

$$\rightarrow |S_c=1,m_c=1;S_a=\tfrac{1}{2},S_b=\tfrac{1}{2}\rangle=|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

忽略直积符号

$$|S_c=1,m_c=0;S_a=\tfrac{1}{2},S_b=\tfrac{1}{2}\rangle=\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b+|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b\right)$$

$$|S_c=1,m_c=-1;S_a=\tfrac{1}{2},S_b=\tfrac{1}{2}\rangle=|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$|S_c=0,m_c=0;S_a=\tfrac{1}{2},S_b=\tfrac{1}{2}\rangle=\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b-|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b\right)$$

//

讨论：

(1) 可见两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的空间直积等于一个总自旋为1的空间和一个总自旋为0的空间的直和，记为

$$\tfrac{1}{2}\otimes\tfrac{1}{2}=1\oplus 0$$

$$\text{dim.}\quad 2\times 2=3+1$$

给定 S，则 $m_S=-S\cdots S$，有 $(2S+1)$ 种可能，所以维数为 $(2S+1)$

(2) 可以调整 $S_c=1$ 的3个态的归一化相位使其可以用 $\hat{S}_{c+}$ 和 $\hat{S}_{c-}$ 联系，其中 $\hat{S}_{c\pm}=\hat{S}_{a\pm}+\hat{S}_{b\pm}$

e.g. $\hat{S}_{c-}|S_c=1,m_c=1;S_a=\tfrac{1}{2},S_b=\tfrac{1}{2}\rangle$

$$=\sqrt{1\cdot(1+1)-1\cdot(1-1)}\,\hbar\,|S_c=1,m_c=0;S_a=\tfrac{1}{2},S_b=\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$=\sqrt{2}\hbar\,|S_c=1,m_c=0;S_a=\tfrac{1}{2},S_b=\tfrac{1}{2}\rangle$$

15-9

2023年12月18日 8:36

另一方面

$\hat{S}_{c-}|S_c=1, m_c=1; S_a=\frac{1}{2}, S_b=\frac{1}{2}\rangle$

$=(\hat{S}_{a-}+\hat{S}_{b-})|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_b$

$\hat{S}_{a-}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a=\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)-\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)}\,\hbar|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a$

$=\hbar|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a$

$=\hbar|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_b+\hbar|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_b$

$=\hbar(|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_b+|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_b)$

$\Rightarrow |S_c=1, m_c=0; S_a=\frac{1}{2}, S_b=\frac{1}{2}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_b+|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_b)$ —— (*)

↑归一化自动保证

同理可得 $|S_c=1, m_c=-1; S_a=\frac{1}{2}, S_b=\frac{1}{2}\rangle$

对于 $S_c=0$ 的态，无法用 $\hat{S}_{c\pm}$ 与 $S_c=1$ 的态相联系

但可以利用正交关系得到！由于 $S_{cz}=S_{az}+S_{bz}$

所以 $|S_c=0, m_c=0; S_a=\frac{1}{2}, S_b=\frac{1}{2}\rangle$ 一定是 $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_b$ 和 $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_b$ 的线性组合，并且该组合必与上面(*)式的线性组合正交

$\Rightarrow |S_c=0, m_c=0; S_a=\frac{1}{2}, S_b=\frac{1}{2}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_b-|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_a|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_b)$

如此利用正交关系得到的归一化遵守如下约定

① 系数 $\in\mathbb{R}$

② (第一个因子空间中取 $m=s$ 的态的项)的系数 >0

(3) 注意 $S_c=1$ 的3个态均为对称态，$S_c=0$ 的态为反对称态

对于He原子的两个电子，若其 $V_x\otimes V_y\otimes V_z$ 空间态矢均为 $|1,0,0\rangle$

则总波函数必为 $|1,0,0\rangle_a|1,0,0\rangle_b|S_c=0, m_c=0; S_a=\frac{1}{2}, S_b=\frac{1}{2}\rangle$

(忽略轨道-自旋耦合)

§15.3 角动量耦合的一般情况

考虑 $\hat{J}_a$ 和 $\hat{J}_b$ 的本征态 $|j_a,m_a\rangle$, $|j_b,m_b\rangle$ 发生耦合

给定 j_a 和 j_b，则 $V_a\otimes V_b$ 空间维数为 $(2j_a+1)(2j_b+1)$ 维

下面我们将 $V_a\otimes V_b$ 分解成直和空间，每个直和空间均为

$\hat{J}_c=\hat{J}_a+\hat{J}_b$ 和 $\hat{J}_{c3}$ 的本征态

Ex 15.5 验证 $|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$ 为 $\hat{J}_c^2$ 和 J_{c3} 的本征态，并求相应的 j_c 和 m_c

解: 由于

$$\hat{J}_{c3}|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle=(\hat{J}_{a3}+\hat{J}_{b3})|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$$
$$=(j_a+j_b)\hbar|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$$

$$\hat{J}_c^2|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle=(\hat{J}_a^2+\hat{J}_b^2+2\hat{J}_{a3}\hat{J}_{b3}+\hat{J}_{a+}\hat{J}_{b-}+\hat{J}_{a-}\hat{J}_{b+})$$
$$*|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$$
$$=[j_a(j_a+1)\hbar^2+j_b(j_b+1)\hbar^2+2j_aj_b\hbar^2]$$
$$*|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$$

$=(j_a^2+j_b^2+2j_aj_b+j_a+j_b)\hbar^2$

$=(j_a+j_a)(j_a+j_b+1)\hbar^2$

$$=(j_a+j_b)(j_a+j_b+1)\hbar^2|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$$

所以 $|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$ 为 $j_c=j_a+j_b$, $m_c=j_a+j_b$ 的态，记为

$$|j_c=j_a+j_b,m_c=j_a+j_b;j_a,j_b\rangle$$

简记为 $|\underbrace{j_a+j_b}_{j_c},\underbrace{j_a+j_b}_{m_c};j_a,j_b\rangle$

15-11

2023年12月18日 9:20

Ex 15.6 由 $|j_c=j_a+j_b, m_c=j_a+j_b; j_a,j_b\rangle$ 出发，用 $\hat{J}_{c-}$ 求出

$|j_c=j_a+j_b, m_c=j_a+j_b-1; j_a,j_b\rangle$

和 $|j_c=j_a+j_b, m_c=j_a+j_b-2; j_a,j_b\rangle$

解: $\hat{J}_{c-}=\hat{J}_{a-}+\hat{J}_{b-}$

$$\hat{J}_{c-}|j_a+j_b, j_a+j_b; j_a,j_b\rangle=\hbar\sqrt{(j_a+j_b)(j_a+j_b+1)-(j_a+j_b)(j_a+j_b-1)}$$
$$*|j_a+j_b, j_a+j_b-1; j_a,j_b\rangle$$
$$=\hbar\sqrt{2(j_a+j_b)}\,|j_a+j_b, j_a+j_b-1; j_a,j_b\rangle \qquad (*1)$$

另一方面

$$LHS=(\hat{J}_{a-}+\hat{J}_{b-})|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$$
$$=\sqrt{j_a(j_a+1)-j_a(j_a-1)}\,\hbar\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle$$
$$+\sqrt{j_b(j_b+1)-j_b(j_b-1)}\,\hbar\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle$$
$$=\hbar\left[\sqrt{2j_a}\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle+\sqrt{2j_b}\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle\right]$$

代入(*1)，即得

$$\boxed{|j_a+j_b, j_a+j_b-1; j_a,j_b\rangle=\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle+\sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle} \qquad (*2)$$

归一化自然成立.

再次应用 $\hat{J}_{c-}$

$$[(j_a+j_b)^2+(j_a+j_b)-(j_a+j_b)^2+3(j_a+j_b)-2]^{1/2}$$
$$=[4(j_a+j_b)-2]^{1/2}$$

$$\hat{J}_{c-}|j_a+j_b, j_a+j_b-1; j_a,j_b\rangle=\hbar\sqrt{\underline{(j_a+j_b)(j_a+j_b+1)-(j_a+j_b-1)(j_a+j_b-2)}}$$
$$*|j_a+j_b, j_a+j_b-2; j_a,j_b\rangle$$
$$=\hbar[4(j_a+j_b)-2]^{1/2}\,|j_a+j_b, j_a+j_b-2; j_a,j_b\rangle \qquad (*3)$$

15-12

2023年12月18日 9:35

另一方面，应用(*2)计算 LHS

$$LHS = (\hat{J}_{a-} + \hat{J}_{b-})\left[\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}\,|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b\rangle + \sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}\,|j_a, j_a\rangle|j_b, j_b-1\rangle\right]$$

$$\hat{J}_{a-}|j_a, j_a-1\rangle = \hbar\sqrt{j_a(j_a+1)-(j_a-1)(j_a-2)}\,|j_a, j_a-2\rangle$$

$$= \hbar\sqrt{4j_a-2}\,|j_a, j_a-2\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}\left[\hbar\sqrt{4j_a-2}\,|j_a, j_a-2\rangle|j_b, j_b\rangle + \hbar\sqrt{2j_b}\,|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b-1\rangle\right]$$

$$+ \sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}\left[\hbar\sqrt{2j_a}\,|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b-1\rangle + \hbar\sqrt{4j_b-2}\,|j_a, j_a\rangle|j_b, j_b-2\rangle\right]$$

$$= \hbar\left\{\sqrt{\frac{2j_a(2j_a-1)}{j_a+j_b}}\,|j_a, j_a-2\rangle|j_b, j_b\rangle + \sqrt{\frac{2j_b(2j_b-1)}{j_a+j_b}}\,|j_a, j_a\rangle|j_b, j_b-2\rangle + 2\sqrt{\frac{2j_aj_b}{j_a+j_b}}\,|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b-1\rangle\right\}$$

代入(*3)，可得

$$|j_a+j_b, j_a+j_b-2; j_a, j_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{[2(j_a+j_b)-1](j_a+j_b)}}\left\{\sqrt{j_a(2j_a-1)}\,|j_a, j_a-2\rangle|j_b, j_b\rangle + \sqrt{j_b(2j_b-1)}\,|j_a, j_a\rangle|j_b, j_b-2\rangle + 2\sqrt{j_aj_b}\,|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b-1\rangle\right\}$$

check 归一化

$$\frac{1}{[2(j_a+j_b)-1](j_a+j_b)} * \{j_a(2j_a-1) + j_b(2j_b-1) + 4j_aj_b\}$$

$$= 2j_a^2 + 2j_b^2 - j_a - j_b + 4j_aj_b$$

$$= 2(j_a+j_b)^2 - (j_a+j_b)$$

$$= [2(j_a+j_b)-1](j_a+j_b).$$

2023年12月18日 21:22

Ex 15.7 利用正交关系求出

$|j_c = j_a + j_b - 1, m_c = j_a + j_b - 1; j_a, j_b\rangle$

并用 $\hat{J}_{c-}$ 求 $|j_c = j_a + j_b - 1, m_c = j_a + j_b - 2; j_a, j_b\rangle$

解: 由 Ex 15.6

$$|j_a+j_b, j_a+j_b-1; j_a, j_b\rangle = \sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b\rangle + \sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}|j_a, j_a\rangle|j_b, j_b-1\rangle \quad \text{——}(*1)$$

因为 $\hat{J}_{c3}|j_a+j_b-1, j_a+j_b-1; j_a, j_b\rangle$

$= (j_a+j_b-1)\hbar|j_a+j_b-1, j_a+j_b-1; j_a, j_b\rangle$

且在直积空间中

$\hat{J}_{c3}|\psi\rangle = (j_a+j_b-1)\hbar|\psi\rangle$ 的子空间为2维，基为

$$\{|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b\rangle, \quad |j_a, j_a\rangle|j_b, j_b-1\rangle\}$$

我们寻找该2维子空间中与(*1)垂直的另一矢量.

$$|\psi\rangle = d_1|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b\rangle + d_2|j_a, j_a\rangle|j_b, j_b-1\rangle$$

且 $\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}d_1 + \sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}d_2 = 0$

$\Rightarrow d_1 = -\sqrt{\frac{j_b}{j_a}}d_2$

由归一化 $|d_1|^2 + |d_2|^2 = 1 \Rightarrow \frac{j_a+j_b}{j_a}|d_2|^2 = 1$

约定取第一个因子空间 $|j_a, j_a\rangle$ 项前面的系数(d_2)为正数

$\Rightarrow d_2 = \sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}, \quad d_1 = -\sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}$

所以 $|j_a+j_b-1, j_a+j_b-1; j_a, j_b\rangle = \sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}|j_a, j_a\rangle|j_b, j_b-1\rangle$

$- \sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}|j_a, j_a-1\rangle|j_b, j_b\rangle$

15-14

2023年12月19日 19:08

下面用 J_{c-} 计算 $|j_a+j_b-1, j_a+j_b-2; j_a, j_b\rangle$

$$\hat{J}_{c-}|j_a+j_b-1, j_a+j_b-1; j_a, j_b\rangle$$
$$=\hbar\sqrt{(j_a+j_b-1)(j_a+j_b)-(j_a+j_b-1)(j_a+j_b-2)}\,|j_a+j_b-1, j_a+j_b-2; j_a, j_b\rangle$$
$$=\hbar\sqrt{2(j_a+j_b-1)}\,|j_a+j_b-1, j_a+j_b-2; j_a, j_b\rangle$$

另一方面

$$LHS=(\hat{J}_{a-}+\hat{J}_{b-})\left[\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle-\sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle\right]$$
$$=\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}\left[\hbar\sqrt{2j_a}\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b-1\rangle+\hbar\sqrt{2(2j_b-1)}\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-2\rangle\right]$$
$$-\sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}\left[\hbar\sqrt{2(2j_a-1)}\,|j_a,j_a-2\rangle|j_b,j_b\rangle+\hbar\sqrt{2j_b}\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b-1\rangle\right]$$
$$=+\sqrt{\frac{2j_a(2j_b-1)}{j_a+j_b}}\hbar\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-2\rangle-\sqrt{\frac{2j_b(2j_a-1)}{j_a+j_b}}\hbar\,|j_a,j_a-2\rangle|j_b,j_b\rangle$$
$$+\frac{\sqrt{2}\hbar}{\sqrt{j_a+j_b}}(j_a-j_b)\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b-1\rangle$$

所以 $|j_a+j_b-1, j_a+j_b-2; j_a, j_b\rangle$

$$=\frac{1}{\sqrt{(j_a+j_b)(j_a+j_b-1)}}*\Big\{\sqrt{j_a(2j_b-1)}\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-2\rangle-\sqrt{j_b(2j_a-1)}\,|j_a,j_a-2\rangle|j_b,j_b\rangle$$
$$+(j_a-j_b)\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b-1\rangle\Big\}$$

Check. 归一化.

$$j_a(2j_b-1)+j_b(2j_a-1)+(j_a-j_b)^2=4j_aj_b-j_a-j_b+(j_a-j_b)^2$$
$$=(j_a+j_b)^2-(j_a+j_b)$$
$$=(j_a+j_b)(j_a+j_b-1)$$

Check 正交性

$$\langle j_a+j_b, j_a+j_b-2; j_a, j_b|j_a+j_b-1, j_a+j_b-2; j_a, j_a\rangle$$
$$\propto-\sqrt{j_b(2j_a-1)}\sqrt{j_a(2j_a-1)}+\sqrt{j_a(2j_b-1)}\sqrt{j_b(2j_b-1)}+2\sqrt{j_aj_b}\,(j_a-j_b)$$
$$=\sqrt{j_aj_b}\,(2j_b-1-2j_a+1)+2\sqrt{j_aj_b}\,(j_a-j_b)=0$$

//

15-15

2023年12月21日 22:07

Ex 15.8 在 Ex 15.7 中，我们利用该关系构造的态矢量然为 $\hat{J}_{c3}$ 的本征态，本征值为 j_a+j_b-1，但要想将其写成 $|j_a+j_b-1, j_a+j_b-1; j_a, j_b\rangle$ 的形式，仍需证明该态矢为 $\hat{J}_c^2$ 的本征态，本征值为 $(j_a+j_b-1)(j_a+j_b)\hbar^2$

证明：因为 $\hat{J}_c^2=\hat{J}_a^2+\hat{J}_b^2+2\hat{J}_{a3}\hat{J}_{b3}+\hat{J}_{a+}\hat{J}_{b-}+\hat{J}_{a-}\hat{J}_{b+}$

态矢为（见 Ex 15.7）

$$|\psi\rangle\equiv\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle-\sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle$$

$$J_+|j,j-1\rangle=\sqrt{j(j+1)-(j-1)j}\,\hbar\,|j,j\rangle=\sqrt{2j}\,\hbar\,|j,j\rangle$$

$$J_-|j,j\rangle=\sqrt{j(j+1)-j(j-1)}\,\hbar\,|j,j-1\rangle=\sqrt{2j}\,\hbar\,|j,j-1\rangle$$

$$J_-|j,j-1\rangle=\sqrt{j(j+1)-(j-1)(j-2)}\,\hbar\,|j,j-2\rangle=\sqrt{4j-2}\,\hbar\,|j,j-2\rangle$$

所以

$$\begin{aligned}
\hat{J}_c^2|\psi\rangle
&=\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}\left[j_a(j_a+1)\hbar^2+j_b(j_b+1)\hbar^2+2j_a(j_b-1)\hbar^2\right]|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle\\
&\quad+\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}\sqrt{2j_a}\sqrt{2j_b}\,\hbar^2\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle\\
&\quad-\sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}\left[j_a(j_a+1)\hbar^2+j_b(j_b+1)\hbar^2+2(j_a-1)j_b\hbar^2\right]|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle\\
&\quad-\sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}\sqrt{2j_a}\sqrt{2j_b}\,\hbar^2\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle\\
&=\sqrt{\frac{j_a}{j_a+j_b}}\,[\underbrace{j_a^2+j_a+j_b^2+j_b+2j_aj_b-2j_a-2j_b}_{=(j_a+j_b)^2-(j_a+j_b)=(j_a+j_b)(j_a+j_b-1)}]\hbar^2\,|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle\\
&\quad-\sqrt{\frac{j_b}{j_a+j_b}}\,[\underbrace{j_a^2+j_a+j_b^2+j_b+2j_aj_b-2j_b-2j_a}_{=(j_a+j_b)(j_a+j_b-1)}]\hbar^2\,|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle\\
&=(j_a+j_b-1)(j_a+j_b)\hbar^2\,|\psi\rangle
\end{aligned}$$

和 $l(l+1)\hbar^2$ 相比较，可得 $l=j_a+j_b-1$

$\Rightarrow|\psi\rangle$ 可表示为 $|j_a+j_b-1, j_a+j_b-1; j_a, j_b\rangle$ //

思考：这是巧合吗？还是有深层原因？

思考：这是巧合吗？还是有深层原因？

总结：

(1) $|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b\rangle$ 为 $\hat{J}_c^2$ 和 $\hat{J}_{c3}$ 的本征态，本征值分别为 $(j_a+j_b)(j_a+j_b+1)\hbar^2$ 和 $(j_a+j_b)\hbar$

(2) 用 $\hat{J}_{c-}$ 可以得到其他所有 $\hat{J}_c^2$ 本征值相同，但 $\hat{J}_{c3}$ 本征值为 $(j_a+j_b-1)\hbar$ ... $(-j_a-j_b)\hbar$ 的态.

(3) 直积空间中 $\hat{J}_{3c}$ 本征值为 $(j_a+j_b-1)\hbar$ 的态有2个，分别为 $|j_a,j_a\rangle|j_b,j_b-1\rangle$ 和 $|j_a,j_a-1\rangle|j_b,j_b\rangle$、(2)中已得到一个线性组合，可以由正交关系得到另一个线性组合.

(4) 新的线性组合也是 $\hat{J}_c^2$ 和 $\hat{J}_{c3}$ 的共同本征态，本征值分别为 $(j_a+j_b-1)(j_a+j_b)\hbar^2$ 和 $(j_a+j_b-1)\hbar$

(5) 可以用 $\hat{J}_{c-}$ 作用在(4)中的态矢上，得到所有 $\hat{J}_c^2$ 本征值为 $(j_a+j_b-1)(j_a+j_b)\hbar^2$ 但 $\hat{J}_{c3}$ 本征值为 $(j_a+j_b-2)\hbar$ ... $-(j_a+j_b-1)\hbar$ 的态

(6) 同(3)，可得 $|j_a+j_b-2, j_a+j_b-2; j_a, j_b\rangle$

⋮

Ex 15.9 该步骤在何时结束？

解: $V_a\otimes V_b$ 的维数为 $(2j_a+1)(2j_b+1)$ 假设 $j_a\geq j_b$

$\hat{J}_c^2\rightarrow(j_a+j_b)(j_a+j_b+1)\hbar^2$ 的空间 $V_{j_a+j_b}$，共 $2(j_a+j_b)+1$ 维.

$\hat{J}_c^2\rightarrow(j_a+j_b-1)(j_a+j_b)\hbar^2$ .... $V_{j_a+j_b-1}$，共 $2(j_a+j_b-1)+1$ 维

假设一直可以持续到

$\hat{J}_c^2\rightarrow(j_a+j_b-n)(j_a+j_b-n+1)\hbar^2$ .... $V_{j_a+j_b-n}$，共 $2(j_a+j_b-n)+1$ 维

$$\Rightarrow(2j_a+1)(2j_b+1)=\sum_{i=0}^{n}[2(j_a+j_b-i)+1]=(n+1)[2(j_a+j_b)+1]-2\sum_{i=0}^{n}i$$

$$=(n+1)[2(j_a+j_b)+1]-n(n+1)$$

$\Rightarrow n=j_a-j_b$

15-17

2023年12月22日 9:30

因为我们前面假设了 $j_a \geq j_b$，所以 $n \geq 0$

一般情况下，有 $n = |j_a - j_b|$ //

结论：$V_a \otimes V_b = V_{j_a+j_b} \otimes V_{j_a+j_b-1} \otimes \cdots \otimes V_{|j_a-j_b|}$

- 所有信息都在线性组合的系数中

(a) 系数可表示为 $(\langle j_a, m_a | \langle j_b\ m_b |)| j_c, m_c ; j_a, j_b \rangle$

从前面的构造方法可知，该系数为实数，所以也可写成

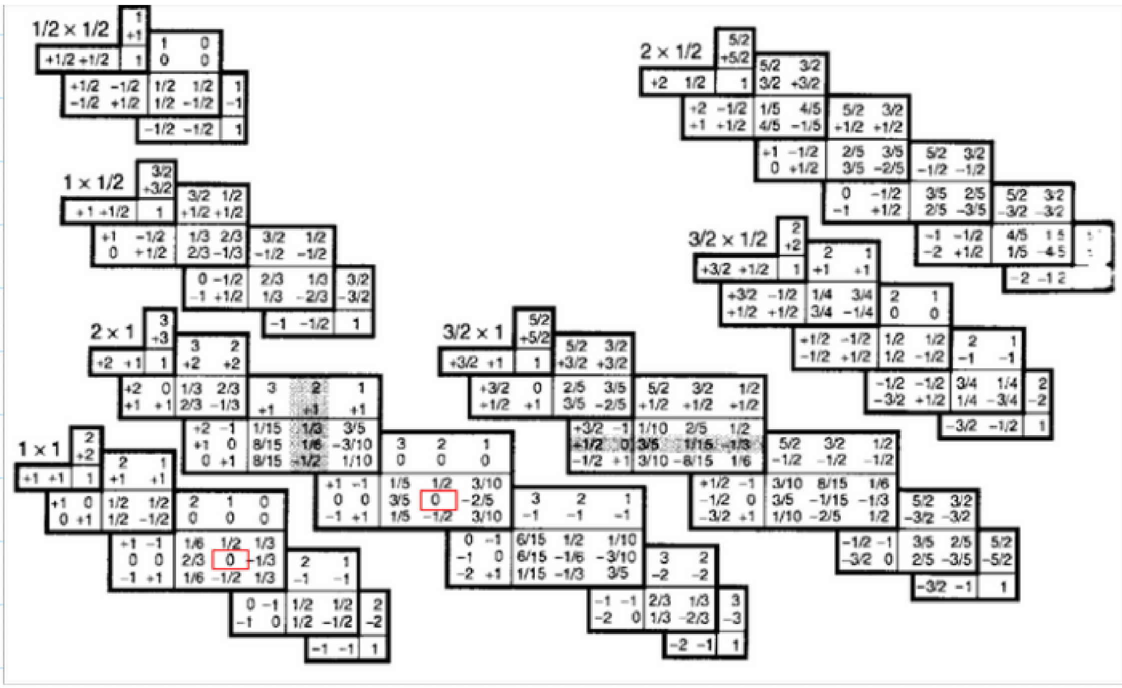
$\langle j_c, m_c ; j_a, j_b | (| j_a, m_a \rangle | j_b, m_b \rangle)$

(b) 由前面计算可知 $|j_a - j_b| \leq j_c \leq j_a + j_b$

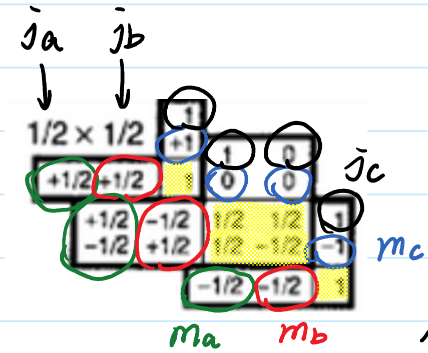
$m_c = m_a + m_b$

(c) 这些系数被称为 Clebsch-Gordan 系数，简称 C-G 系数。

已被制备成表格供查阅



Ex 15.9 利用 C-G 系数表分解 $V_{\frac{1}{2}}\otimes V_{\frac{1}{2}}$



令 x = 黄色底的数字，则 C-G系数 $= \mathrm{sgn}(x)\sqrt{|x|}$

解

$$|1,1;\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a\,|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$|1,0;\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle_a\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b + \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a\,|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$|1,-1;\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

$$|0,0;\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_a\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_b - \sqrt{\tfrac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_a\,|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_b$$

Ex 15.10 将 $V_{a=1}\otimes V_{b=1}$ 写成直和形式，并用 C-G 系数表将直和空间中的基矢用直积空间中的基矢表示.