《高等量子力学》第 10 讲

3. 角动量的本征值和矩阵

角动量 $\hat{\vec{J}}$ 的定义由其对易关系给出：

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k \,,$$

满足该定义的力学量称为角动量。显然，轨道角动量 $\hat{\vec{L}}$ 和自旋角动量 $\hat{\vec{S}}$ 都是这个定义的特例。由于 $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ 互不对易，不可能同时有确定值。

定义角动量平方

$$\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_x^{\ 2} + \hat{J}_y^{\ 2} + \hat{J}_z^{\ 2}$$

描述角动量的大小。由于

$$\begin{aligned}\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_j\right] &= \hat{J}_i\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] + \left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right]\hat{J}_i \\ &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_i\hat{J}_k + i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k\hat{J}_i = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_i\hat{J}_k + i\hbar\varepsilon_{kji}\hat{J}_i\hat{J}_k \\ &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_i\hat{J}_k - i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_i\hat{J}_k = 0\end{aligned}$$

（此处用到了反对称性质 $\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{jik}$），$\hat{\vec{J}}^2$ 与任意 $\hat{J}_i$ 可以同时有确定值。以下用类似于求解谐振子本征值的代数方法来求解 $\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_z$ 的本征值。

考虑到 $\hat{\vec{J}}^2$ 不仅仅依赖于 $\hat{J}_z$，共同本征态至少应由两个相关联的量子数描述，记为 $|\lambda, m\rangle$。又因为量子数一般无量纲，考虑到 $\vec{J}^2 \sim \hbar^2$ 和 $J_z \sim \hbar$，设

$$\hat{\vec{J}}^2|\lambda, m\rangle = \lambda\hbar^2|\lambda, m\rangle \,,$$

$$\hat{J}_z|\lambda, m\rangle = m\hbar|\lambda, m\rangle 。$$

问题：$\lambda = ?, m = ?$

1）构造新的算符组

$$\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z, \hat{J}^2 \quad \rightarrow \quad \hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y = \hat{J}_+^+,$$

$$\hat{J}_z, \quad \hat{J}^2 = \hat{J}_z^2 + \frac{1}{2}\left(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+\right)$$

有对易关系

$$\left[\hat{J}_+,\hat{J}_-\right]=2\hbar\hat{J}_z,\quad \left[\hat{J}_-,\hat{J}_z\right]=\hbar\hat{J}_-,\quad \left[\hat{J}_+,\hat{J}_z\right]=-\hbar\hat{J}_+,$$

$$\left[\hat{\vec{J}}^2,\hat{J}_+\right]=\left[\hat{\vec{J}}^2,\hat{J}_-\right]=\left[\hat{\vec{J}}^2,\hat{J}_z\right]=0。$$

2） $$\langle\lambda,m|\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_z{}^2|\lambda,m\rangle=\frac{1}{2}\langle\lambda,m|\hat{J}_+\hat{J}_-+\hat{J}_-\hat{J}_+|\lambda,m\rangle$$

$$\left(\lambda-m^2\right)\hbar^2\underbrace{\langle\lambda,m|\lambda,m\rangle}_{\geq0}=\frac{1}{2}\underbrace{\langle\lambda,m|\hat{J}_-^+\hat{J}_-|\lambda,m\rangle}_{\geq0}+\frac{1}{2}\underbrace{\langle\lambda,m|\hat{J}_+^+\hat{J}_+|\lambda,m\rangle}_{\geq0},$$

故 $\lambda\geq m^2$。

3） $$\begin{cases}\hat{\vec{J}}^2\left(\hat{J}_+|\lambda,m\rangle\right)=\hat{J}_+\hat{\vec{J}}^2|\lambda,m\rangle=\lambda\hbar^2\left(\hat{J}_+|\lambda,m\rangle\right)\\ \hat{J}_z\left(\hat{J}_+|\lambda,m\rangle\right)=\left(\hbar\hat{J}_++\hat{J}_+\hat{J}_z\right)|\lambda,m\rangle=(m+1)\hbar\left(\hat{J}_+|\lambda,m\rangle\right)\end{cases}$$

$$\begin{cases}\hat{\vec{J}}^2\left(\hat{J}_-|\lambda,m\rangle\right)=\hat{J}_-\hat{\vec{J}}^2|\lambda,m\rangle=\lambda\hbar^2\left(\hat{J}_-|\lambda,m\rangle\right)\\ \hat{J}_z\left(\hat{J}_-|\lambda,m\rangle\right)=\left(-\hbar\hat{J}_-+\hat{J}_-\hat{J}_z\right)|\lambda,m\rangle=(m-1)\hbar\left(\hat{J}_-|\lambda,m\rangle\right)\end{cases}$$

说明：若$|\lambda,m\rangle$是$\hat{\vec{J}}^2$，$\hat{J}_z$的共同本征态，则$\hat{J}_+|\lambda,m\rangle$，$\hat{J}_-|\lambda,m\rangle$也是它们的共同本征态。这些本征值和本征态的关系为：

共同本征态	$\hat{J}_z$本征值	$\hat{\vec{J}}^2$本征值
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\left(\hat{J}_+\right)^2|\lambda,m\rangle$	$(m+2)\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$\hat{J}_+|\lambda,m\rangle$	$(m+1)\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$|\lambda,m\rangle$	$m\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$\hat{J}_-|\lambda,m\rangle$	$(m-1)\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$\left(\hat{J}_-\right)^2|\lambda,m\rangle$	$(m-2)\hbar$	$\lambda\hbar^2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

故称$\hat{J}_-$为下降算符，$\hat{J}_+$为上升算符。结合上面的结论， 有

$\hat{\vec{J}}^2$的本征值为$\lambda\hbar^2$；

$\hat{J}_z$的本征值为$m\hbar$， $m=j',j'+1\cdots,j-1,j$，

$\hat{J}_z$的本征值有最大值与最小值的原因是限制条件$\lambda \geq m^2$。

4） 对于最大值j对应的态 $|\lambda, j\rangle$，必有

$$\hat{J}_+|\lambda, j\rangle = 0,$$

否则$\hat{J}_z\hat{J}_+|\lambda, j\rangle = (j+1)\hbar\hat{J}_+|\lambda, j\rangle$，与$j\hbar$是$\hat{J}_z$最大本征值的假设相矛盾。

故 $$0 = \hat{J}_-\hat{J}_+|\lambda, j\rangle = \left(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z{}^2 - \hbar\hat{J}_z\right)|\lambda, j\rangle = \left(\lambda - j^2 - j\right)\hbar^2|\lambda, j\rangle,$$

即 $$\lambda = j(j+1)。$$

对于最小值j'对应的态 $|\lambda, j'\rangle$，必有

$$\hat{J}_-|\lambda, j'\rangle = 0,$$

否则$\hat{J}_z\hat{J}_-|\lambda, j'\rangle = (j'-1)\hbar\hat{J}_-|\lambda, j'\rangle$，与$j'\hbar$是$\hat{J}_z$最小本征值的假设相矛盾。

故 $$0 = \hat{J}_+\hat{J}_-|\lambda, j'\rangle = \left(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_z{}^2 + \hbar\hat{J}_z\right)|\lambda, j'\rangle = \left(\lambda - j'^2 + j'\right)\hbar^2|\lambda, j'\rangle,$$

即 $$\lambda = j'(j'-1)。$$

由 $$j(j+1) = j'(j'-1),$$

有 $$j' = \begin{cases} j+1 \\ -j \end{cases},$$

而$j' = j+1 > j$与j为最大值，j'为最小值的假设不符，故取

$$j' = -j。$$

故$\hat{\vec{J}}^2$的本征值： $\lambda\hbar^2$， $\lambda = j(j+1)$

$\hat{J}_z$的本征值： $m\hbar$， $m = -j,\ -j+1,\ \cdots,\ j-1,\ j$共$2j+1$个值。

共同本征态 $|\lambda, m\rangle \to |j, m\rangle$。

剩下的问题是： $j = ?$

5） 态$|j, j\rangle$用下降算符$\hat{J}_-$作用$2j$次后变为$|j, -j\rangle$，或态$|j, -j\rangle$用上升算符$\hat{J}_+$作

用 $2j$ 次后变为 $|j,j\rangle$，

$2j=0,$ 正整数，

即　j 为零，正整数，和半正整数。

总结： $\hat{\vec{J}}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle$，　j **可为零，正整数，和半正整数，**

$\hat{J}_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle$，　$m=-j,\ -j+1,\ \cdots,j-1,j$。

j 为零和正整数时，$\hat{\vec{J}}$ 可用轨道角动量 $\hat{\vec{L}}$ 来解释，而 j 为半正整数时，$\hat{\vec{J}}$ 的物理意义是什么？这说明由角动量的定义，即对易关系出发，一定还存在一种新的角动量，这就是自旋角动量。

下面求 $\hat{J}_x,\hat{J}_y,\hat{J}_z$ 的矩阵形式。

6） 由于本征值组 $\{j,m\}$ 与本征态 $|j,m\rangle$ 一一对应，无简并，故

$$\hat{J}_+|j,m\rangle = a_{jm}|j,m+1\rangle,\qquad \hat{J}_-|j,m\rangle = b_{jm}|j,m-1\rangle,$$

$$\langle j,m|\hat{J}_- = \langle j,m+1|a_{jm}^*,\qquad \langle j,m|\hat{J}_+ = \langle j,m-1|b_{jm}^*$$

$$\begin{aligned}|a_{jm}|^2\langle j,m+1|j,m+1\rangle &= \langle j,m|\hat{J}_-\hat{J}_+|j,m\rangle\\ &= \langle j,m|\hat{\vec{J}}^2-\hat{J}_z^2-\hbar\hat{J}_z|j,m\rangle\\ &= \big(j(j+1)-m^2-m\big)\hbar^2\langle j,m|j,m\rangle\end{aligned},$$

$$|a_{jm}|^2 = \big(j(j+1)-m(m+1)\big)\hbar^2,$$

取　$a_{jm} = \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\hbar = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar$。

类似，可得　$b_{jm} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar$，

即

$$\begin{cases}\hat{J}_+|j,m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar|j,m+1\rangle\\ \hat{J}_-|j,m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar|j,m-1\rangle\end{cases}。$$

因为

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{J}_+ + \hat{J}_-\right), \qquad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}\left(\hat{J}_+ - \hat{J}_-\right),$$

有

$$\begin{cases} \hat{J}_x \,|\, j,m\rangle = \dfrac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|\, j,m+1\rangle + \dfrac{\hbar}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|\, j,m-1\rangle \\ \hat{J}_y \,|\, j,m\rangle = \dfrac{\hbar}{2i}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|\, j,m+1\rangle - \dfrac{\hbar}{2i}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|\, j,m-1\rangle \end{cases}$$

7）在 $\hat{J}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的共同表象，基矢为 $|\, j,m\rangle$。当 j 确定时，即 $\hat{\vec{J}}^2$ 的本征值确定时，存在一个由 $\hat{J}_z$ 的本征态构成的子空间，维数 $D = 2j+1$。矩阵元

$$\langle j,n|\,\hat{\vec{J}}^2\,|\, j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{nm},$$

$$\langle j,n|\,\hat{J}_z\,|\, j,m\rangle = m\hbar\delta_{nm},$$

$$\langle j,n|\,\hat{J}_x\,|\, j,m\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\delta_{n,m+1} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\delta_{n,m-1}$$

$$\langle j,n|\,\hat{J}_y\,|\, j,m\rangle = \frac{\hbar}{2i}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\delta_{n,m+1} - \frac{\hbar}{2i}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\delta_{n,m-1}$$

这就是在 $\hat{J}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的共同表象中 $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ 的矩阵形式。

例题 1：求费米子自旋角动量的矩阵。

$$j = \frac{1}{2}, \quad \vec{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2, \quad J_z = m\hbar,\ m = -j, \ldots, j = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \quad D = 2。$$

选第一个基矢为 $|\, j,m\rangle = \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$，第二个基矢为 $\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$，有

$$J_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z,$$

$$J_x = \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x,$$

$$J_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y。$$

设J_z的本征态为$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$，有本征方程

$$\begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = m\hbar\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

考虑到归一化条件，得：

$$m=\frac{1}{2}\text{时，本征态为}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad m=-\frac{1}{2}\text{时，本征态为}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\text{。}$$

例题 2：求光子自旋角动量的矩阵。

$j=1$，$\vec{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$，$J_z = m\hbar,\quad m=-j,\ldots,j=-1,0,1$，$D=3$

选第一个基矢为$|j,m\rangle = |1,1\rangle$，第二个基矢为$|1,0\rangle$，第三个基矢为$|1,-1\rangle$，有

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\hat{J}_z$的本征值与本征态为

$$m=1,\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \qquad m=0,\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \qquad m=-1,\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\text{。}$$

8）转动算符在$\vec{J}^2$与J_z的共同表象的矩阵

转动算符

$$\hat{R}_n(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{J}}\cdot\vec{e}_n\varphi}\text{。}$$

由于

$$\left[\hat{\vec{J}}^2,\hat{\vec{J}}\right]=0, \qquad \left[\hat{\vec{J}}^2,\hat{R}_n(\varphi)\right]=0,$$

表明$\hat{R}_n(\varphi)$与$\hat{\vec{J}}^2$有共同本征态，$\hat{R}_n(\varphi)$在$\vec{J}^2$表象中是对角矩阵。又由于

$$\left[\hat{J}_z,\hat{R}_n(\varphi)\right]\neq 0,$$

故在$\vec{J}^2$与J_z的共同表象j固定的子空间，R_n有非对角元。于是，R_n在$\vec{J}^2$与

J_z 的共同表象是一个分块对角的矩阵：

$$R_{mm'}^{jj'} = \langle j,m | \hat{R}_n(\varphi) | j',m' \rangle = \begin{cases} 0, & \text{for } \ j \neq j' \\ R_{mm'}^{jj} & \text{for } \ j = j' \end{cases}$$

$$\begin{aligned} R_{mm'}^{jj} &= \langle j,m | \hat{R}_n(\varphi) | j,m' \rangle \\ &= \langle j,m | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{J}}\cdot\vec{e}_n\varphi} | j,m' \rangle \\ &= \langle j,m | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\gamma} | j,m' \rangle \\ &= e^{-i(m\alpha+m'\gamma)} \langle j,m | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta} | j,m' \rangle \\ &= e^{-i(m\alpha+m'\gamma)} d_{mm'}^{jj}(\beta) \end{aligned}$$

对于 $j=1/2$，在 $\hat{\vec{J}}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的共同表象，前面已经求出

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta} = \cos\frac{\beta}{2} - i\sigma_y \sin\frac{\beta}{2}$$

$$d^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix},$$

对于 $j=1$，在 $\hat{\vec{J}}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的共同表象，可以证明

$$e^{-\frac{i}{\hbar}J_y\beta} = 1 - \frac{i}{\hbar}\sin\beta J_y + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 (1-\cos\beta) J_y^2,$$

$$J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$d^{11}(\beta) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta & 1-\cos\beta \\ \sqrt{2}\sin\beta & 2\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta \\ 1-\cos\beta & \sqrt{2}\sin\beta & 1+\cos\beta \end{pmatrix}。$$