《高等量子力学》第 9 讲

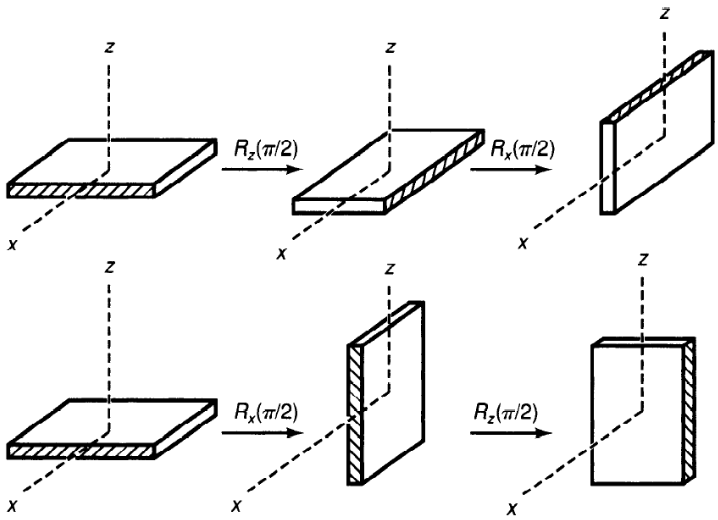
第三章：角动量理论

1. 旋转与角动量

旋转与角动量在量子力学中具有独特的地位。

1）经典转动

绕同一轴的两个转动是对易的。例如绕 Z 轴先转 30 度再转 60 度和先转 60 度再转 30 度是完全相同的。但是，绕不同轴的两个转动是不对易的。如图所示，先绕 Z 轴逆时针转动 90 度再绕 X 轴转动 90 度，与先绕 X 轴转动 90 度再绕 Z 轴转动 90 度的结果不相同。



矢量 $\vec{V}=V_x\vec{e}_x+V_y\vec{e}_y+V_z\vec{e}_z$ 绕轴 $\vec{e}_n$ 转动后变为 $\vec{V}'=V_x'\vec{e}_x+V_y'\vec{e}_y+V_z'\vec{e}_z$，写成矩阵形式为

$$\vec{V}'=R_n(\varphi)\vec{V},$$

$R_n(\varphi)$ 是一个 3X3 的转动矩阵。显然转动前后矢量的模不改变，

$$\left|\vec{V}'\right|=\left|\vec{V}\right|。$$

容易得到绕 Z 轴转动角 φ 的转动矩阵

$$R_z(\varphi)=\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi & 0\\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},$$

对于无限小转动ε，

$$R_z(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0\\ \varepsilon & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},$$

这里已经略去高于ε^2的项。类似有

$$R_x(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon\\ 0 & \varepsilon & 1-\frac{\varepsilon^2}{2}\end{pmatrix},\qquad R_y(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon\\ 0 & 1 & 0\\ -\varepsilon & 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2}\end{pmatrix}。$$

显然，

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon)-R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon)=\begin{pmatrix}0 & -\varepsilon^2 & 0\\ \varepsilon^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}=R_z(\varepsilon^2)-1。$$

上式表明：绕X轴和绕Y轴的转动是不对易的。

2）量子转动

对于无限小空间平移算符，其生成元是动量算符，

$$\hat{T}(d\vec{x})=1-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}},$$

空间平移不变意味动量守恒。对于无限小时间演化算符，生成元是哈密顿算符，

$$\hat{U}(dt)=1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}dt=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}dt},$$

时间平移不变意味能量守恒。

对于任意转动，定义与经典转动相应的量子转动算符为 $\hat{R}_n(\varphi)$，

$$|\alpha\rangle_\varphi=\hat{R}_n(\varphi)|\alpha\rangle,$$

它在某个表象的表示是一个矩阵 $R_n(\varphi)$。

1）由经典力学，转动对应的守恒力学量是角动量 $\vec{J}$，故假设在量子力学中，角动量 $\hat{\vec{J}}$ 是转动算符 $\hat{R}(\varphi)$ 的生产元。对于绕 $\vec{e}_n$ 方向的无限小转动，

$$\hat{R}_n(d\varphi)=1-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{J}}\cdot\vec{e}_n d\varphi=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{J}}\cdot\vec{e}_n d\varphi}。$$

考虑到绕同一轴的转动是可对易的，有限的转动可以看成是很多无限小转动的叠加，故对于有限的转动 φ 有

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

2）经典力学中绕不同轴的转动是不对易的，假设量子转动满足相同的不对易关系，例如

$$\left[\hat{R}_x(\varepsilon),\ \hat{R}_y(\varepsilon)\right]=\hat{R}_z(\varepsilon^2)-1,$$

保留到 ε^2 级，有

$$\left[\left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_x\varepsilon-\frac{\hat{J}_x^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right),\ \left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\varepsilon-\frac{\hat{J}_y^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right)\right]=\left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varepsilon^2\right)-1,$$

即

$$\left[\hat{J}_x,\ \hat{J}_y\right]=i\hbar\hat{J}_z。$$

一般有

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

这就是量子力学中角动量的基本对易关系。

3）角动量平均值的变化

设绕 Z 轴转动φ，态的改变，

$$|\alpha\rangle\to|\alpha\rangle_\varphi=\hat{R}_z(\varphi)|\alpha\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}|\alpha\rangle\,,$$

平均值$\langle\hat{J}_x\rangle$的改变

$$\langle\hat{J}_x\rangle_0=\langle\alpha|\hat{J}_x|\alpha\rangle\to\langle\hat{J}_x\rangle_\varphi={}_\varphi\langle\alpha|\hat{J}_x|\alpha\rangle_\varphi=\langle\alpha|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}\hat{J}_x e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}|\alpha\rangle$$

将$e^{\pm\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}$按级数展开，并利用对易关系

$$\left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_x\right]=i\hbar\hat{J}_y\,,$$

有

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}\hat{J}_x e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}=\hat{J}_x\cos\varphi-\hat{J}_y\sin\varphi\,,$$

故

$$\langle\hat{J}_x\rangle_\varphi=\langle\hat{J}_x\rangle_0\cos\varphi-\langle\hat{J}_y\rangle_0\sin\varphi\,,$$

类似，

$$\langle\hat{J}_y\rangle_\varphi=\langle\hat{J}_y\rangle_0\cos\varphi+\langle\hat{J}_x\rangle_0\sin\varphi,\quad \langle\hat{J}_z\rangle_\varphi=\langle\hat{J}_z\rangle_0\ 。$$

写成矢量形式

$$\langle\hat{\vec{J}}\rangle_\varphi=R_z(\varphi)\langle\hat{\vec{J}}\rangle_0\,,$$

角动量（矢量）平均值的变化与经典力学中矢量的变化关系相同。

2. 自旋角动量

1）转动与时间演化的关系

考虑自旋为 1/2 的粒子在外磁场中，设磁场在 Z 方向。粒子自身坐标系中的哈密顿算符

$$\hat{H} = \omega \hat{s}_z, \qquad \omega = -\frac{eB}{mc},$$

比较时间演化算符

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega \hat{s}_z t}$$

与绕 Z 轴的转动算符

$$\hat{R}_z(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{s}_z \varphi},$$

得到转动算符与时间演化算符的对应关系

$$\varphi \iff \omega t,$$

即 φ 与 t 一一对应。由旋转前后的自旋角动量平均值关系

$$\left\langle \vec{s} \right\rangle_\varphi = R_z(\varphi)\left\langle \vec{s} \right\rangle_0 = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\left\langle \vec{s} \right\rangle_0$$

得到时间演化前后的自旋角动量平均值关系

$$\left\langle \vec{s} \right\rangle_t = R_z(\omega t)\left\langle \vec{s} \right\rangle_0 = \begin{pmatrix} \cos\omega t & -\sin\omega t & 0 \\ \sin\omega t & \cos\omega t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\left\langle \vec{s} \right\rangle_0。$$

当取 $t = 2\pi/\omega$ 时，有

$$\left\langle \vec{s} \right\rangle_t = \left\langle \vec{s} \right\rangle_0,$$

故 $t = 2\pi/\omega$ 为平均值的周期。

将初始态按 $\hat{S}_z$ 的本征态 $\left|s_z^{\pm}\right\rangle$ 进行展开，

$$\left|\alpha\right\rangle=\left|s_z^+\right\rangle\left\langle s_z^+\middle|\alpha\right\rangle+\left|s_z^-\right\rangle\left\langle s_z^-\middle|\alpha\right\rangle,$$

在时间 t，

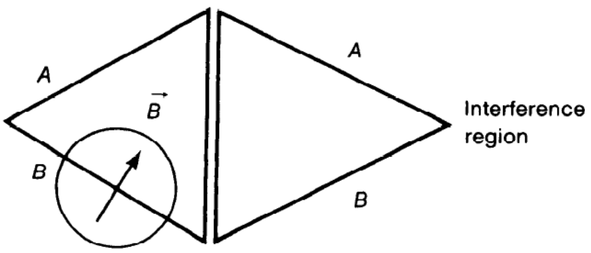
$$\left|\alpha\right\rangle_t=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{s}_z\omega t}\left|\alpha\right\rangle=e^{-\frac{i}{2}\omega t}\left|s_z^+\right\rangle\left\langle s_z^+\middle|\alpha\right\rangle+e^{\frac{i}{2}\omega t}\left|s_z^-\right\rangle\left\langle s_z^-\middle|\alpha\right\rangle,$$

当 $t=2\pi/\omega$，$\left|\alpha\right\rangle_t=-\left|\alpha\right\rangle$，态不能回到原来！只有 $t=4\pi/\omega$ 才能回到原来。

与平均值的时间演化周期 $t=2\pi/\omega$ 不同，态的时间演化周期是 $t=4\pi/\omega$。

2）中子干涉实验（自旋进动的实验验证）

将基态中子分成两束，分别经路径 A，B 到达干涉区域。在 B 束路径上设置一个 Z 方向磁场 B 不等于零的区间，见图。



B 束中子经过磁场 B 产生的附加时间演化算符

$$\hat{U}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{s}_z t},$$

经过磁场后的自旋向上或向下的态会有一个额外的相因子 $e^{\mp\frac{i}{2}\omega T}$，其中 T 是中子经过磁场的时间（$T=l/\mathrm{v}_n=lm_n/p_n=lm_n\lambda/\hbar$）。在干涉区域存在干涉项 $\cos\left(\mp\frac{\omega T}{2}+\delta\right)$，其中 δ 是没有磁场时 A，B 两束中子的相位差。

当调控外磁场 B 的强度使频率 ω 变化时，干涉强度会呈现周期性变化。干涉强度变化一个周期的频率变化是 $\frac{\Delta\omega T}{2}=2\pi$，对应磁场的变化是

$\Delta B = \dfrac{4\pi m_n c}{g_n e T}$。实验上证实了这一磁场变化引起的干涉强度变化。

3）Pauli 矩阵

定义 Pauli 算符 $\hat{\vec{\sigma}}$：$\hat{\vec{s}} = \dfrac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$，

$\hat{\sigma}_i$ 的本征值　　　$\sigma_i = \pm 1$，$\sigma_i^2 = 1$，$\vec{\sigma}^2 = 3$。

由对易关系　　　$\left[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\right] = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$。

有

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = \frac{1}{2i}\left(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\right)\hat{\sigma}_y + \frac{1}{2i}\hat{\sigma}_y\left(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\right)$$

$$= \frac{1}{2i}\left(-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_y^2\hat{\sigma}_z\right) = \frac{1}{2i}\left(-\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z\right) = 0$$

即反对易关系　　　$\left\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\right\} = 2\delta_{ij}$。

在 σ_z 表象　　　$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$，　　$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$，　　$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$。

$\hat{\sigma}_z$ 的本征态　　　$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$，　$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$，

由 σ_z 的完备性条件，任意自旋态

$$\chi = c_+\chi_+ + c_-\chi_-。$$

　　自旋转动变换算符

$$\hat{R}_n(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{s}}\cdot\vec{e}_n\varphi} = e^{-\frac{i}{2}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{e}_n\varphi}$$

的矩阵形式为　　　$R_n(\varphi) = e^{-\frac{i}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{e}_n\varphi}$。

容易证明，对于任意矢量 $\vec{a}$，$\vec{b}$，有

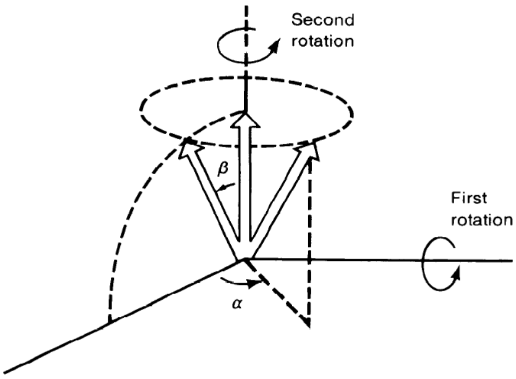
$$\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{a}\right)\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}\right) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{a}\times\vec{b}\right),$$

显然 $(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})^2=\vec{a}^2$。

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{e}_n)^i=\begin{cases}1 & for\ i\ even\\ \vec{\sigma}\cdot\vec{e}_n & for\ i\ odd\end{cases},$$

$$R_n(\varphi)=\cos\frac{\varphi}{2}-i\vec{\sigma}\cdot\vec{e}_n\sin\frac{\varphi}{2}。$$

例题：**任意自旋态可以由 $\hat{s}_z$ 的本征态转动生成**。



设任意自旋态 χ 的方向是 $\vec{e}_n$，$\vec{e}_n$ 的方位角是 α,β，见图。χ 可以看成是 $\hat{s}_z$ 的本征态 χ_+ 先绕 Y 轴转动 β，再绕 Z 轴转动 α 而生成。在 s_z 表象

$$\chi=R_z(\alpha)R_y(\beta)\chi_+=e^{-\frac{i}{2}\sigma_z\alpha}e^{-\frac{i}{2}\sigma_y\beta}\chi_+$$

$$=\left(\cos\frac{\alpha}{2}-i\sigma_z\sin\frac{\alpha}{2}\right)\left(\cos\frac{\beta}{2}-i\sigma_y\sin\frac{\beta}{2}\right)\chi_+$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\frac{\alpha}{2}-i\sin\frac{\alpha}{2} & 0\\ 0 & \cos\frac{\alpha}{2}+i\sin\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2}e^{-i\alpha/2}\\ \sin\frac{\beta}{2}e^{i\alpha/2}\end{pmatrix}=\cos\frac{\beta}{2}e^{-i\alpha/2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\sin\frac{\beta}{2}e^{i\alpha/2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$=\cos\frac{\beta}{2}e^{-i\alpha/2}\chi_++\sin\frac{\beta}{2}e^{i\alpha/2}\chi_-$$

4）Euler 转动

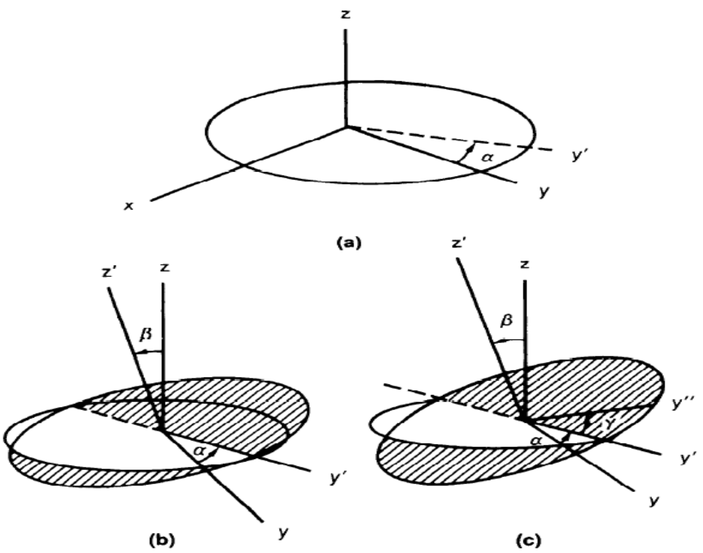
现在讨论**将绕任意轴的转动变化为绕 X，Y，Z 轴的转动的乘积**。

设有一组固定坐标系(X, Y, Z)，一组随矢量运动的坐标系(X’, Y’, Z’)。由分析力学，矢量的任意转动可以分解为绕 X,Y,Z 轴的转动的乘积，即用 3 个 Euler 角来描述。在转动之前，两组坐标系重合。先逆时钟绕 Z 轴转角度α，如图 a。这时 Y’与 Y 不再重合了。然后绕 Y’轴转角度β，如图 b。这时 Z’与 Z 轴也不重合了。最后绕 Z’轴转角度γ，如图 c。这时 Y’轴又改变了方向，变成 Y”。刚体的任意转动可以表示为

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R_{z'}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha)\text{。}$$

这 3 次 Euler 转动中，有两次是绕运动坐标轴 Y’，Z’的。这在转动的计算中很不方便，因为用角动量生成的转动都是在固定坐标系中进行的。因此，必须把绕运动坐标轴的转动改写成绕固定坐标轴的转动。可以证明，上述的 3 次转动等价于在固定坐标系的 3 次转动，

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)\text{。}$$



相应的量子力学转动算符是

$$\hat{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\hat{R}_z(\alpha)\hat{R}_y(\beta)\hat{R}_z(\gamma)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\alpha}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\gamma}\text{。}$$

自旋空间的任意转动算符在 S_z 表象的转动矩阵

$$
\begin{aligned}
R(\alpha,\beta,\gamma) &= e^{-\frac{i}{2}\sigma_z\alpha} e^{-\frac{i}{2}\sigma_y\beta} e^{-\frac{i}{2}\sigma_z\gamma} \\
&= \left(\cos\frac{\alpha}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\alpha}{2}\right)\left(\cos\frac{\beta}{2} - i\sigma_y \sin\frac{\beta}{2}\right)\left(\cos\frac{\gamma}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\gamma}{2}\right) \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\left(\beta/2\right) & -\sin\left(\beta/2\right) \\ \sin\left(\beta/2\right) & \cos\left(\beta/2\right) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\left(\beta/2\right) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\sin\left(\beta/2\right) \\ e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\sin\left(\beta/2\right) & e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos\left(\beta/2\right) \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$