2022 秋易为老师量子力学 B
习题九参考解答

刘丰铨　　宋冰睿

2022 年 11 月 30 日

1　第 1 题

某三维粒子的波函数为：

$$\psi(\boldsymbol{r}) = A(x+y+2z)\,\mathrm{e}^{-\alpha r}$$

其中 A 为归一化常数且有 $\alpha > 0$. 求 $\hat{L}_z$ 及 $\hat{L}_x$ 可能的测量值和相应的概率.

解：考虑到计算复杂度的区别，一般而言，除非特别要求，我们不在直角坐标系下直接讨论角动量相关问题，而将相应的波函数在球坐标系下表达：

$$\psi(\boldsymbol{r}) = A(r\sin\theta\cos\phi + r\sin\theta\sin\phi + 2r\cos\theta)\,\mathrm{e}^{-\alpha r} = Ar\mathrm{e}^{-\alpha r}(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) \tag{1.1}$$

考虑到各角动量算符在坐标表象下作用时的表达式均与 r 无关，我们只需考虑处理波函数中与 θ 和 ϕ 相关的表达式 $(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)$ 即可.

接下来我们先求解 $\hat{L}_z$ 相关的问题. 我们在课程中已经得知，球谐函数是 $\hat{L}_z$ 及 $\hat{L}$ 在坐标表象下的共同本征函数，因此我们利用：

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \tag{1.2}$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\phi} \tag{1.3}$$

将上述表达式重新表达为球谐函数的线性组合，即：

$$\begin{aligned}\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(-Y_1^{+1} + Y_1^{-1}\right) + \frac{\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(Y_1^{+1} + Y_1^{-1}\right) + 2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0 \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-1+\mathrm{i})\,Y_1^{+1} + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1+\mathrm{i})\,Y_1^{-1} + 2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0\end{aligned} \tag{1.4}$$

注意以上表达式是未归一化的，亦即该式在球面上积分结果不为 1. 由于：

$$\hat{L}_z^{POS}Y_l^m(\theta,\phi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\phi) \tag{1.5}$$

其中 $\hat{L}_z^{POS}$ 即为算符 $\hat{L}_z$ 在坐标表象下的表达，我们可以断言：$\hat{L}_z$ 的可能测量值为 $\pm\hbar$ 和 0，对应的概率分别为：

$$P\left(L_z=\hbar\right)=\frac{\left|\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(-1+\mathrm{i}\right)\right|^2}{\left|\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(-1+\mathrm{i}\right)\right|^2+\left|\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(1+\mathrm{i}\right)\right|^2+\left|2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\right|^2}=\frac{1}{6} \tag{1.6}$$

$$P\left(L_z=-\hbar\right)=\frac{\left|\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(1+\mathrm{i}\right)\right|^2}{\left|\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(-1+\mathrm{i}\right)\right|^2+\left|\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(1+\mathrm{i}\right)\right|^2+\left|2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\right|^2}=\frac{1}{6} \tag{1.7}$$

$$P\left(L_z=0\right)=1-P\left(L_z=\hbar\right)-P\left(L_z=-\hbar\right)=\frac{2}{3} \tag{1.8}$$

接下来我们处理 $\hat{L}_x$ 相关问题. 同学们可能已经注意到，本题所考虑的态矢量属于 $l=1$ 的本征子空间，因此也可以考虑仿照第 3 题中的处理，利用表象变换方法求出题给量子态在 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_x\right)$ 确立的表象下的表示，从而得到测量值和对应的概率. 具体地，量子态在 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z\right)$ 确立的表象下的表示为（已做归一化处理，由于本题只关心概率而不关心态的具体表达，实际计算时可省去该程式）：

$$|\psi\rangle\xrightarrow{\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z\right)}\psi^Z=\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{1}{12}}\left(-1+\mathrm{i}\right)\\ \sqrt{\frac{2}{3}}\\ \sqrt{\frac{1}{12}}\left(1+\mathrm{i}\right)\end{pmatrix} \tag{1.9}$$

利用 3e 的结论，我们有：

$$|\psi\rangle\xrightarrow{\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_x\right)}\psi^X=S\psi^Z=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{2}}{2}&\frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}&0&-\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{2}}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{1}{12}}\left(-1+\mathrm{i}\right)\\ \sqrt{\frac{2}{3}}\\ \sqrt{\frac{1}{12}}\left(1+\mathrm{i}\right)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{1}{12}}\left(2+\mathrm{i}\right)\\ -\sqrt{\frac{1}{6}}\\ \sqrt{\frac{1}{12}}\left(-2+\mathrm{i}\right)\end{pmatrix} \tag{1.10}$$

由此，我们可以断言：$\hat{L}_x$ 的可能测量值为 $\pm\hbar$ 和 0，对应的概率分别为：

$$P\left(L_x=\hbar\right)=\frac{\frac{10\pi}{3}}{\frac{10\pi}{3}+\frac{10\pi}{3}+\frac{4\pi}{3}}=\frac{5}{12} \tag{1.11}$$

$$P\left(L_x=-\hbar\right)=\frac{\frac{10\pi}{3}}{\frac{10\pi}{3}+\frac{10\pi}{3}+\frac{4\pi}{3}}=\frac{5}{12} \tag{1.12}$$

$$P\left(L_x=0\right)=1-P\left(L_z=\hbar\right)-P\left(L_z=-\hbar\right)=\frac{1}{6} \tag{1.13}$$

至此问题解决.

注：本题还有另一种可行的处理方法. 由于我们对 $\hat{L}_x$ 的本征态在坐标表象下的表达式并不熟悉，我们不妨对坐标 (x,y,z) 做轮换，转为 (z',x',y')，这样一来我们只需求解 $\hat{L}_{z'}$ 的测量值和对应概率的问题. 事实上，此时的

波函数表达为：

$$\psi(\boldsymbol{r}) = A(z' + x' + 2y')\,\mathrm{e}^{-\alpha r} = Ar\mathrm{e}^{-\alpha r}(\sin\theta\cos\phi + 2\sin\theta\sin\phi + \cos\theta) \tag{1.14}$$

我们根据前述讨论如法炮制，得：

$$\sin\theta\cos\phi + 2\sin\theta\sin\phi + \cos\theta = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-1+2\mathrm{i})\,Y_1^{+1} + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1+2\mathrm{i})\,Y_1^{-1} + \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0 \tag{1.15}$$

所得结论将与前一种解法相同. 细心的同学应当已经注意到，若使用这种方法，虽然测量值和概率的计算结果与前一致，但态的表达与前不一致（这是说不同态之间的相位差与表象变换所得到的结果不同）. 事实上，我们不十分推荐同学们在解决实际问题时应用此方法；在应试过程中，该方法也需谨慎使用. 在附注三中，我们将对此进行更深入的讨论.

2 第 2 题

对于 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态 $|l, m_z\rangle$，计算 $\hat{L}_x^2$ 和 $\hat{L}_y^2$ 的期望值以及 ΔL_x 和 ΔL_y，并验证不确定性关系.

解：仿照我们在前半学期谐振子的学习中和在期中考试中常用的方法，我们将 $\hat{L}_x^2$ 和 $\hat{L}_y^2$ 表达成角动量升降算符的形式，在此基础上问题将更容易解决. 我们有：

$$\hat{L}_x^2 = \left[\frac{1}{2}\left(\hat{L}_+ + \hat{L}_-\right)\right]^2 = \frac{1}{4}\left(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+\right) \tag{2.1}$$

$$\hat{L}_y^2 = \left[\frac{1}{2i}\left(\hat{L}_+ - \hat{L}_-\right)\right]^2 = \frac{1}{4}\left(-\hat{L}_+^2 - \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+\right) \tag{2.2}$$

由升降算符的性质和属于不同本征值的本征态的正交性，我们知道：

$$\left\langle l, m_z \middle| \hat{L}_+^2 \middle| l, m_z \right\rangle = \left\langle l, m_z \middle| \hat{L}_-^2 \middle| l, m_z \right\rangle = 0 \tag{2.3}$$

同时，根据（我们将在附注一对此加以证明）：

$$\hat{L}_\pm |l, m_z\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m_z(m_z \pm 1)}\,|l, m_z \pm 1\rangle \tag{2.4}$$

（注：可以利用 $\hat{L}_+|l, l\rangle = 0$ 和 $\hat{L}_-|l, -l\rangle = 0$ 的性质记忆上式中的正负号选取.）可以得到：

$$\begin{aligned}\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp|l, m_z\rangle &= \hbar^2\sqrt{l(l+1) - m_z(m_z \mp 1)}\hat{L}_\pm|l, m_z \mp 1\rangle \\ &= \hbar^2\sqrt{l(l+1) - m_z(m_z \mp 1)}\sqrt{l(l+1) - (m_z \mp 1)(m_z \mp 1 \pm 1)}\,|l, m_z\rangle \\ &= \hbar^2\left[l(l+1) - m_z(m_z \mp 1)\right]|l, m_z\rangle\end{aligned} \tag{2.5}$$

因此：

$$\begin{aligned}\left\langle l, m_z \middle| \hat{L}_x^2 \middle| l, m_z \right\rangle = \left\langle l, m_z \middle| \hat{L}_y^2 \middle| l, m_z \right\rangle &= \frac{1}{4}\left(\left\langle l, m_z \middle| \hat{L}_+\hat{L}_- \middle| l, m_z \right\rangle + \left\langle l, m_z \middle| \hat{L}_-\hat{L}_+ \middle| l, m_z \right\rangle\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4}\left[l(l+1) - m_z(m_z - 1) + l(l+1) - m_z(m_z + 1)\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1) - m_z^2\right]\end{aligned} \tag{2.6}$$

而：

$$\left\langle l, m_z \,\middle|\, \hat{L}_x \,\middle|\, l, m_z \right\rangle = \frac{1}{2}\left(\left\langle l, m_z \,\middle|\, \hat{L}_+ \,\middle|\, l, m_z \right\rangle + \left\langle l, m_z \,\middle|\, \hat{L}_- \,\middle|\, l, m_z \right\rangle\right) = 0 \tag{2.7}$$

$$\left\langle l, m_z \,\middle|\, \hat{L}_y \,\middle|\, l, m_z \right\rangle = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\left\langle l, m_z \,\middle|\, \hat{L}_+ \,\middle|\, l, m_z \right\rangle - \left\langle l, m_z \,\middle|\, \hat{L}_- \,\middle|\, l, m_z \right\rangle\right) = 0 \tag{2.8}$$

因而：

$$\Delta L_x = \sqrt{\left\langle l, m_z \,\middle|\, \hat{L}_x^2 \,\middle|\, l, m_z \right\rangle - \left\langle l, m_z \,\middle|\, \hat{L}_x \,\middle|\, l, m_z \right\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2}\left[l\,(l+1) - m_z^2\right]} = \Delta L_y \tag{2.9}$$

我们知道，倘若 $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \mathrm{i}\hat{C}$，不确定性关系要求在任意的 $|\psi\rangle$ 下：

$$\Delta A_\psi \Delta B_\psi \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \hat{C} \right\rangle_\psi\right| \tag{2.10}$$

在本题所考虑的情况下，基本对易关系给出：

$$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma \tag{2.11}$$

而：

$$\begin{aligned}\Delta L_x \Delta L_y - \frac{1}{2}\left\langle l, m_z \,\middle|\, \hbar\hat{L}_z \,\middle|\, l, m_z \right\rangle &= \frac{\hbar^2}{2}\left[l\,(l+1) - m_z^2\right] - \frac{1}{2} m_z \hbar^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left[l\,(l+1) - m_z\,(m_z+1)\right] \geq 0\end{aligned} \tag{2.12}$$

在 m_z 允许取值的区间 $[-l, l]$ 上成立，其中等号当且仅当 $m_z = l$ 时成立. 由此，不确定性关系得到验证.

3 第 3 题

考虑以 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态 $|l, m_z\rangle$ 为基的 Hilbert 空间中，$l = 1$ 的子空间.

(a) 写出算符 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{L}_\pm$ 的矩阵表示.

(b) 求算符 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的矩阵表示.

(c) 求算符 $\hat{L}_x^2$ 的矩阵表示及其本征值.

(d) 在 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z\right)$ 确立的表象下求 $\hat{L}_z$ 及 $\hat{L}_x$ 的本征态.

(e) 求由 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z\right)$ 确立的表象到由 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x\right)$ 的变换矩阵 S，并验证 (b) 中关于 $\hat{L}_x$ 的结论.

(f) 在坐标表象下写出 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x\right)$ 的共同本征态波函数.

注：在本题的求解过程中，我们以“戴帽子的” $\hat{A}$ 表示算符、以“不戴帽子的” A 指代矩阵表示，请同学们注意区分 ~

解：依题意，我们考虑的 Hilbert 空间维数为 3，$\{|1, +1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$ 是它的一组正交完备基，前四问中基的排列顺序以此为准.

3.1 3a

不难得到：

$$\left\langle 1, m_z' \,\middle|\, \hat{L}_z \,\middle|\, 1, m_z \right\rangle = m_z \hbar\, \delta_{m_z, m_z'} \tag{3.1}$$

因此，算符 $\hat{L}_z$ 的矩阵表示为：

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.2}$$

而由2.4，有：

$$\left\langle 1, m_z' \,\middle|\, \hat{L}_\pm \,\middle|\, 1, m_z \right\rangle = \hbar \sqrt{l\,(l+1) - m_z\,(m_z \pm 1)}\,\delta_{m_z \pm 1, m_z'} = \hbar \sqrt{2 - m_z\,(m_z \pm 1)}\,\delta_{m_z \pm 1, m_z'} \tag{3.3}$$

因此，算符 $\hat{L}_\pm$ 的矩阵表示分别为：

$$L_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.4}$$

$$L_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.5}$$

3.2 3b

算符的矩阵表示之间的关系和算符之间的关系一致，因此有：

$$L_x = \frac{1}{2}\,(L_+ - L_-) = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.6}$$

$$L_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}\,(L_+ - L_-) = \frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.7}$$

3.3 3c

在上题的基础上，有：

$$L_x^2 = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

由久期方程 $\det\left(L_x^2 - \lambda I\right) = 0$ 得：

$$0 = \left(\hbar^2 - \lambda\right)\left(\frac{\hbar^2}{2} - \lambda\right)^2 - \left(\hbar^2 - \lambda\right)\left(\frac{\hbar^2}{2}\right)^2 = -\left(\hbar^2 - \lambda\right)^2 \lambda \tag{3.9}$$

解得本征值分别为 $\hbar^2$ 和 0，其中前者是二重简并的. 考虑到角动量算符的不同分量性质上没有本质区别，这一结果恰在我们意料之中.

3.4 3d

由 3a，我们知道 L_z 在题给表象下的矩阵表示已经对角化，相应的本征态即为所取正交归一化基，对应的表示为：

$$|1, m_z = +1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, m_z = 0\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, m_z = -1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

而由 3b，利用线性代数方法可以得到 L_x 的本征值分别为 $\hbar, 0, -\hbar$，分别对应本征态：

$$|1, m_x = +1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad |1, m_x = 0\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad |1, m_x = -1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

3.5 3e

我们知道，矩阵 S 应当将 $|1, m_x = -1\rangle$ 在表象下的表示由3.11的形式变换到3.10的形式，亦即：

$$S\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

根据各本征向量的正交归一性，倘若我们将3.11中的第 n 个（$n = 1, 2, 3$）列向量依次取共轭转置并作为矩阵的第 n 行，所得的即为满足要求的 S，即：

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \tag{3.13}$$

在此基础上，我们尝试计算 $\hat{L}_x$ 在正交完备基 $\{|1, m_x = +1\rangle, |1, m_x = 0\rangle, |1, m_x = -1\rangle\}$ 下的矩阵表示 L_x^X. 利用 3b 的结论并令其中 $L_x = L_x^Z$，有：

$$L_x^X = S L_x^Z S^\dagger = \frac{\sqrt{2}\hbar}{8}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.14}$$

在我们的意料之中.

3.6 3f

利用 3d 的求解结果，我们知道：

$$\begin{cases} |1, m_x = +1\rangle = \frac{1}{2}\left(|1, m_z = +1\rangle + \sqrt{2}\,|1, m_x = 0\rangle + |1, m_x = -1\rangle\right) \\ |1, m_x = 0\rangle = \frac{1}{2}\left(\sqrt{2}\,|1, m_z = +1\rangle - \sqrt{2}\,|1, m_x = -1\rangle\right) \\ |1, m_x = -1\rangle = \frac{1}{2}\left(|1, m_z = +1\rangle - \sqrt{2}\,|1, m_x = 0\rangle + |1, m_x = -1\rangle\right) \end{cases} \tag{3.15}$$

由于角量子数和磁量子数仅能确定波函数在球坐标系下角向部分的表达，我们接下来略去径向部分. 而由于：

$$\langle \theta, \phi \mid l, m_z \rangle = Y_l^{m_z}(\theta, \phi) \tag{3.16}$$

有：

$$\begin{cases} \langle \theta, \phi \mid 1, m_x = +1 \rangle = \dfrac{1}{2}\left(Y_1^{+1} + \sqrt{2} Y_1^0 + Y_1^{-1}\right) \\ \langle \theta, \phi \mid 1, m_x = 0 \rangle = \dfrac{1}{2}\left(\sqrt{2} Y_1^{+1} - \sqrt{2} Y_1^{-1}\right) \\ \langle \theta, \phi \mid 1, m_x = -1 \rangle = \dfrac{1}{2}\left(Y_1^{+1} - \sqrt{2} Y_1^0 + Y_1^{-1}\right) \end{cases} \tag{3.17}$$

即为所求.

4 第 4 题

证明：

(a)

$$\hat{J}_\pm \hat{J}_\mp = \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \pm \hbar \hat{J}_z$$

(b)

$$\left\langle j, m \middle| \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp \middle| j, m \right\rangle = j(j+1)\hbar^2 - m(m \mp 1)\hbar^2$$

4.1 4a

我们已经知道：

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm \mathrm{i} \hat{J}_y \tag{4.1}$$

因此，有：

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp &= \left(\hat{J}_x \pm \mathrm{i}\hat{J}_y\right)\left(\hat{J}_x \mp \mathrm{i}\hat{J}_y\right) \\ &= \hat{J}_x^2 \mp \mathrm{i}\hat{J}_x\hat{J}_y \pm \mathrm{i}\hat{J}_y\hat{J}_x + \hat{J}_y^2 \\ &= \left(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2\right) \mp \mathrm{i}\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] \\ &= \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \mathrm{i}\left(\mathrm{i}\hbar\hat{J}_z\right) = \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \pm \hbar\hat{J}_z \end{aligned} \tag{4.2}$$

即为欲证结论. 在第四个等号处，我们利用了角动量算符的基本对易关系.

4.2 4b

在 4a 的基础上，我们利用：

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \tag{4.3}$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle \hbar \tag{4.4}$$

可以得到：

$$
\begin{aligned}
\left\langle j,m\left|\hat{J}_{\pm}\hat{J}_{\mp}\right|j,m\right\rangle &= \left\langle j,m\left|\left(\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{J}_z^2\pm\hbar\hat{J}_z\right)\right|j,m\right\rangle \\
&= \left\langle j,m\left|j(j+1)\hbar^2-m^2\hbar^2\pm\hbar m\hbar\right|j,m\right\rangle \\
&= \hbar^2\left[j(j+1)-m^2\pm m\right]\langle j,m\,|\,j,m\rangle \\
&= j(j+1)\hbar^2-m(m\mp 1)\hbar^2
\end{aligned}
\tag{4.5}
$$

即为欲证结论.

5 附注

5.1 附注一：2.4的证明

利用 4b 的结论，有：

$$
j(j+1)\hbar^2-m(m\mp 1)\hbar^2=\left\langle j,m\left|\hat{J}_{\pm}\hat{J}_{\mp}\right|j,m\right\rangle=\left(\hat{J}_{\mp}|j,m\rangle\right)^{\dagger}\left(\hat{J}_{\mp}|j,m\rangle\right) \tag{5.1}
$$

这告诉我们：

$$
\left|\hat{J}_{\mp}|j,m\rangle\right|=\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\mp 1)} \tag{5.2}
$$

同时我们知道 $\hat{J}_{\mp}|j,m\rangle\sim|j,m-1\rangle$，因此我们总可以选取合适的相位关系，使得：

$$
\hat{J}_{\mp}|j,m\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\mp 1)}\,|j,m-1\rangle \tag{5.3}
$$

这就是2.4的结论.

5.2 附注二：轨道角动量算符和一般角动量算符性质异同

本质上，量子力学中一般的角动量算符 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 由无穷小转动变换定义，它的分量所满足的基本对易关系：

$$
\left[\hat{J}_{\alpha},\hat{J}_{\beta}\right]=i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{J}_{\gamma} \tag{5.4}
$$

在这一定义下自然导出. 以此为出发点，我们可以讨论相应的升降算符 $\hat{J}_{\pm}$ 的性质. 而轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 除了具有上述性质外，还因其定义：

$$
\hat{L}_{\alpha}=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_{\beta}\hat{p}_{\gamma} \tag{5.5}
$$

在坐标表象下的表达满足：

$$
\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2\right)^{POS}Y_l^m(\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2Y_l^m(\theta,\phi) \tag{5.6}
$$

$$
\hat{L}_z^{POS}Y_l^m(\theta,\phi)=m\hbar Y_l^m(\theta,\phi) \tag{5.7}
$$

这一性质对于一般的角动量算符并不成立.

5.3 附注三：第 1 题的进一步讨论

本部分内容已经超出了本课程所要求掌握的范围. 作为开始，我们应当意识到，对坐标 (x,y,z) 做轮换转为 (z',x',y') 的方法更多地出自“直觉”，而缺乏理论的支撑. 因此，本节内容旨在对其合理性进行分析. 首先，我

们知道这一轮换相当于对态矢量 $|\psi\rangle$ 做操作：

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)|\psi\rangle$$

亦即，在固定的坐标架 $Oxyz$ 下，我们要求态矢量 $|\psi\rangle$ 先绕 y 轴顺时针转动 $90°$，再绕 z 轴顺时针转动 $90°$. 现在我们只知道 $|\psi\rangle$ 在 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z\right)$ 确立的表象下的表达式（即1.9）：

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z)} \psi^Z = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+\mathrm{i}) \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(1+\mathrm{i}) \end{pmatrix} \tag{5.8}$$

因此我们也应写出 $\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)$ 和 $\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)$ 在此表象下的表示. 其中，算符 $\hat{L}_z$ 在此表象下已对角化，故利用算符函数的定义：

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right) \xrightarrow{(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z)} \sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{n!}\left[\frac{\mathrm{i}\pi}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\right]^n = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\pi}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\pi}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \tag{5.9}$$

而利用算符 $\hat{L}_y$ 与升降算符 $\hat{L}_\pm$ 的关系，有：

$$\hat{L}_y \xrightarrow{(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z)} \frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} = U\begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}U^\dagger = UL_zU^\dagger \tag{5.10}$$

其中：

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{5.11}$$

利用第 6 次作业 3a 的结论，有：

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right) = \hat{U}\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\hat{U}^\dagger \xrightarrow{(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z)} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} & -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{5.12}$$

其中已利用 5.9. 由此，有：

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)|\psi\rangle \xrightarrow{(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z)} \frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+\mathrm{i}) \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(1+\mathrm{i}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+2\mathrm{i}) \\ \sqrt{\frac{1}{6}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(1+2\mathrm{i}) \end{pmatrix} \tag{5.13}$$

这里的系数与1.15形成了一一对应的关系（注意：我们转动的是矢量而非坐标轴，因此各态的表示始终在 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z\right)$ 确立的表象下）. 然而，到此为止，我们仍然不能确定 $|\psi\rangle$ 应如何表达为 $|1,m_x\rangle$ 的线性叠加，这是因为我们尚

未考察后者在旋转后的表示. 事实上，根据3.11，我们有：

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)|1, m_x = +1\rangle \xrightarrow{(\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z)} \begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5.14}$$

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)|1, m_x = 0\rangle \xrightarrow{(\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z)} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5.15}$$

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)|1, m_x = -1\rangle \xrightarrow{(\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\mathrm{i} \end{pmatrix} \tag{5.16}$$

结合前式，有：

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+2\mathrm{i})\frac{1}{\mathrm{i}}|1, m_x = +1\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}\frac{1}{-1}|1, m_x = 0\rangle + \sqrt{\frac{1}{12}}(1+2\mathrm{i})\frac{1}{-\mathrm{i}}|1, m_x = -1\rangle \\ &= \sqrt{\frac{1}{12}}(2+\mathrm{i})|1, m_x = +1\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}}|1, m_x = 0\rangle + \sqrt{\frac{1}{12}}(-2+\mathrm{i})|1, m_x = -1\rangle \end{aligned} \tag{5.17}$$

此处的系数和直接利用表象变换计算得到1.10的方才相同（倘若读者回顾转动的过程，会发现系数的一致是必然且平庸的）. 这意味着直接对坐标进行轮换后得到的结果1.15至多可以作为计算概率的基础，而绝不能作为态的展开系数，否则将导致相位的弥散. 这也正是我们不推荐使用坐标轮换方法解决实际问题的原因.