第十章、力学量本征值的代数解法

在第一章中，我们曾经提到，矩阵力学方法是先于波动力学方法引入的。然而，后者很快取代了前者成为最常用的解量子力学问题的常规方法。但是，矩阵 (或曰代数) 解法仍然不失为一种有用的方法。特别是在量子场论中，这一方法占有举足轻重的地位。在这一章中，我们将简单介绍如何用此方法求解简谐振子的本征谱以及角动量算符的本征谱。

$ 10.1 一维简谐振子的本征谱的代数求解法

在第二章中，利用求解 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2\psi(x) \tag{1}$$

的方法，我们已经求得了一维简谐振子的本征谱

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad n = 0,\ 1,\ 2,\cdots\cdots \tag{2}$$

和相应的本征函数族

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\ n!\ \sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)H_n(\alpha x). \tag{3}$$

这里 $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$，而 $H_n(\xi)$ 则为 n 阶 Hermite 多项式。

现在，让我们来看如何利用代数解法重新求解这一问题。首先，我们有

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2 = \hbar\omega_0\left(\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega_0} + \frac{m\omega_0}{2\hbar}\hat{x}^2\right)\\ &= \hbar\omega_0\left[\left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} + i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\hat{x}\right)\left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} - i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\hat{x}\right) + \frac{1}{2}\right].\end{aligned} \tag{4}$$

若我们令

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} + i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\hat{x}, \quad \hat{a} \equiv \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} - i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\hat{x}, \tag{5}$$

则此一哈密顿量可以被改写作

$$\hat{H} = \hbar\omega_0\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \tag{6}$$

同时，这样定义的算符满足对易关系

$$\left[\hat{a},\,\hat{a}^\dagger\right]=1. \tag{7}$$

显然，为了求得一维简谐振子的本征谱，我们只需求得 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的本征值和本征态即可。

令 $|n\rangle$ 为 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的一个本征态。则我们有

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle=f(n)|n\rangle. \tag{8}$$

现在，我们将算符 $\hat{a}$ 作用在这一态矢上，从而得到一个新的态

$$|\widetilde{\psi}\rangle\equiv\hat{a}|n\rangle. \tag{9}$$

显然，我们有

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\widetilde{\psi}\rangle=\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\hat{a}\,|n\rangle=\hat{a}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)|n\rangle+\left[\hat{a}^\dagger\hat{a},\,\hat{a}\right]|n\rangle=f(n)\hat{a}|n\rangle+\left[\hat{a}^\dagger\hat{a},\,\hat{a}\right]|n\rangle. \tag{10}$$

另一方面，上式中的对易子可以写作

$$\left[\hat{a}^\dagger\hat{a},\,\hat{a}\right]=\left[\hat{a}^\dagger,\,\hat{a}\right]\hat{a}+\hat{a}^\dagger\left[\hat{a},\,\hat{a}\right]=-\hat{a}. \tag{11}$$

因此，我们有

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\widetilde{\psi}\rangle=\left(f(n)-1\right)\hat{a}\,|n\rangle=\left(f(n)-1\right)|\widetilde{\psi}\rangle. \tag{12}$$

这也就是说，新的态 $|\widetilde{\psi}\rangle$ 也是 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的一个本征态，对应的本征值为 $f(n)-1$ 。实际上，重复上面的过程，我们可以很容易地证明，如下定义的态

$$|\widetilde{\psi}(m)\rangle\equiv(\hat{a})^m\,|n\rangle=\overbrace{\hat{a}\cdot\hat{a}\cdot\cdots\cdots\hat{a}}^{m}\,|n\rangle \tag{13}$$

也是 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的本征态，对应的本征值为 $f(n)-m\equiv g(n,m)$ 。

同时，我们可以证明，算符 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 是半正定的。实际上，对于任何一个态 ψ ，我们都有

$$\langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle=\left(\psi,\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\psi\right)=\left(\hat{a}\psi,\,\hat{a}\psi\right)\geq 0. \tag{14}$$

因此， $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的任何一个本征值 $f(n)-m\equiv g(n,m)$ 都必须是大于或者等于零的。它隐含着，存在着一个正整数 m_0 ，使得 $f(n)-m_0=0$ 成立。也就是说，算符 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 有一个满足条件

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi_0\rangle=0 \tag{15}$$

的本征态 ψ_0 。将此式两边乘以 $\langle\psi_0|$ ，我们进一步得到

$$\langle\psi_0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi_0\rangle=\left(\psi_0,\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\psi_0\right)=(\hat{a}\psi_0,\,\hat{a}\psi_0)=0. \tag{16}$$

因此， $|\psi_0\rangle$ 应该满足条件

$$\hat{a}|\psi_0\rangle=0. \tag{17}$$

在定义了 $|\psi_0\rangle$ 态之后，我们可以将上面的过程倒过来进行，以推导算符 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 所有的本征态。令

$$|\widetilde{\psi}_m\rangle=\left(\hat{a}^\dagger\right)^m|\psi_0\rangle. \tag{18}$$

则我们有

$$\begin{aligned}
&\hat{a}^\dagger\hat{a}|\widetilde{\psi}_m\rangle=\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\left(\hat{a}^\dagger\right)^m|\psi_0\rangle\\
=\;&\left(\hat{a}^\dagger\right)^m\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)|\psi_0\rangle+\left[\hat{a}^\dagger\hat{a},\,\left(\hat{a}^\dagger\right)^m\right]|\psi_0\rangle\\
=\;&\left[\hat{a}^\dagger\hat{a},\,\left(\hat{a}^\dagger\right)^m\right]|\psi_0\rangle=\hat{a}^\dagger\left[\hat{a},\,\left(\hat{a}^\dagger\right)^m\right]|\psi_0\rangle\\
=\;&\hat{a}^\dagger\left[\hat{a},\,\hat{a}^\dagger\right]\left(\hat{a}^\dagger\right)^{m-1}|\psi_0\rangle+\left(\hat{a}^\dagger\right)^2\left[\hat{a},\,\hat{a}^\dagger\right]\left(\hat{a}^\dagger\right)^{m-2}|\psi_0\rangle+\cdots\cdots\\
+\;&\left(\hat{a}^\dagger\right)^k\left[\hat{a},\,\hat{a}^\dagger\right]\left(\hat{a}^\dagger\right)^{m-k}|\psi_0\rangle+\cdots\cdots\left(\hat{a}^\dagger\right)^m\left[\hat{a},\,\hat{a}^\dagger\right]|\psi_0\rangle\\
=\;&m\left(\hat{a}^\dagger\right)^m|\psi_0\rangle=m|\widetilde{\psi}_m\rangle.
\end{aligned} \tag{19}$$

因此， $\widetilde{\psi}_m$ 是算符 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 对应于本征值 m 的本征态，尽管它不是归一化的。为了将之归一化，需要计算其内积。我们有

$$\begin{aligned}
&\langle\widetilde{\psi}_m|\widetilde{\psi}_m\rangle=\left\langle\psi_0\left|(\hat{a})^m\left(\hat{a}^\dagger\right)^m\right|\psi_0\right\rangle\\
=\;&\left\langle\psi_0\left|(\hat{a})^{m-1}\,\hat{a}\hat{a}^\dagger\left(\hat{a}^\dagger\right)^{m-1}\right|\psi_0\right\rangle=\langle\widetilde{\psi}_{m-1}|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\widetilde{\psi}_{m-1}\rangle\\
=\;&\langle\widetilde{\psi}_{m-1}|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\widetilde{\psi}_{m-1}\rangle+\langle\widetilde{\psi}_{m-1}|\left[\hat{a},\,\hat{a}^\dagger\right]|\widetilde{\psi}_{m-1}\rangle\\
=\;&(m-1)\langle\widetilde{\psi}_{m-1}|\widetilde{\psi}_{m-1}\rangle+\langle\widetilde{\psi}_{m-1}|\widetilde{\psi}_{m-1}\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= m\langle\widetilde{\psi}_{m-1}|\widetilde{\psi}_{m-1}\rangle = m(m-1)\langle\widetilde{\psi}_{m-2}|\widetilde{\psi}_{m-2}\rangle \\
&= m(m-1)\cdot\cdots\cdot 2\cdot 1\langle\psi_0|\psi_0\rangle = m!\langle\psi_0|\psi_0\rangle. \qquad (20)
\end{aligned}
$$

令 $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$ ，我们最后得到

$$
\langle\widetilde{\psi}_m|\widetilde{\psi}_m\rangle = m!. \qquad (21)
$$

令

$$
|m\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{m!}}|\widetilde{\psi}_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^m|\psi_0\rangle, \qquad (22)
$$

则不难验证 $|m\rangle$ 是归一的。同时，当 $n \neq m$ 时， $|n\rangle$ 和 $|m\rangle$ 是正交的。因此，我们有

$$
\langle n|m\rangle = \delta_{nm}. \qquad (23)
$$

在做了这些准备之后，我们现在可解得一维谐振子的本征值和本征函数。实际上，将哈密顿量 $\hat{H}$ 作用在 (22) 式中定义的态 $|m\rangle$ 上，我们有

$$
\hat{H}|m\rangle = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0|m\rangle = \left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0|m\rangle. \qquad (24)
$$

也就是说，一维简谐振子的能量本征值为 $E_m = (m+1/2)\hbar\omega_0$ ，而相应的本征态则为 $|m\rangle$ 。

从上面的推导过程中，人们不难看到，为什么 $\hat{a}^\dagger$ 被称为升算符，而 $\hat{a}$ 被称为降算符。事实上，我们有

$$
\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \hat{a}^\dagger\left(\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|\psi_0\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n+1}|\psi_0\rangle \\
&= \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n+1}|\psi_0\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \qquad (25)
\end{aligned}
$$

以及

$$
\begin{aligned}
\hat{a}|n\rangle &= \hat{a}\left(\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|\psi_0\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|\psi_0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n\hat{a}\,|\psi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[\hat{a},\,\left(\hat{a}^\dagger\right)^n\right]|\psi_0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}n\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n-1}|\psi_0\rangle = \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{(n-1)!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n-1}|\psi_0\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle. \qquad (26)
\end{aligned}
$$

最后，我们再来看一下一维简谐振子的本征矢 $|n\rangle$ 在坐标表象中的形式。根据 Dirac 的表象理论，我们有

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \left\langle x \left| \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n \right| \psi_0 \right\rangle = \int dx' \ \left\langle x \left| \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n \right| x' \right\rangle \langle x'|\psi_0\rangle \tag{27}$$

先考察 $\langle x'|\psi_0\rangle$ 。按照定义， ψ_0 满足方程

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0. \tag{28}$$

因此，我们有

$$\begin{aligned}
0 &= \langle x'|\hat{a}|\psi_0\rangle = \int d\tilde{x}\ \langle x'|\hat{a}|\tilde{x}\rangle\langle\tilde{x}|\psi_0\rangle \\
&= \int d\tilde{x}\ \left\langle x' \left| \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} - i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\hat{x} \right| \tilde{x} \right\rangle \psi_0(\tilde{x}) \\
&= \int d\tilde{x}\ \left\langle x' \left| \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} \right| \tilde{x} \right\rangle \psi_0(\tilde{x}) - i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \int d\tilde{x}\ \tilde{x}\delta(x'-\tilde{x})\psi_0(\tilde{x}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \int d\tilde{x}\ \delta(x'-\tilde{x})\psi_0(\tilde{x}) - i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} x'\psi_0(x') \\
&= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'}\psi_0(x') - i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} x'\psi_0(x').
\end{aligned} \tag{29}$$

化简后，我们得到

$$\frac{\partial}{\partial x'}\psi_0(x') + \frac{m\omega_0}{\hbar}\ x'\psi_0(x') = 0. \tag{30}$$

这一方程在 $x' = 0$ 点为有限值的解为

$$\langle x'|\psi_0\rangle = \psi_0(x') = \exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\ x'^2\right). \tag{31}$$

将这一结果代入方程 (27) 后，我们有

$$\begin{aligned}
\psi_n(x) &= \int dx'\ \left\langle x \left| \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n \right| x' \right\rangle \langle x'|\psi_0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}} \int dx'\ \left\langle x \left| \left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} + i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\hat{x} \right)^n \right| x' \right\rangle \psi_0(x') \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{\hbar}{i\sqrt{2m\hbar\omega_0}} \frac{\partial}{\partial x} + i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\ x \right)^n \int dx'\ \delta(x-x')\psi_0(x') \\
&= \frac{(-i)^n}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \frac{\partial}{\partial x} - \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\ x \right)^n \exp\left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\ x^2\right).
\end{aligned} \tag{32}$$

这一结果是与我们在讲义第二章中所得到的一维谐振子的本征函数 $\psi_n(x)$ 是一致的。自然，我们最后还应该将其归一化。

$ 10.2 **角动量算符的本征谱**

作为量子力学代数解法的第二个例子，让我们考虑如何求解角动量算符 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的本征态和本征值问题。

角动量算符满足如下的对易关系

$$\left[\hat{J}_x,\ \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z, \quad \left[\hat{J}_y,\ \hat{J}_z\right] = i\hbar\hat{J}_x, \quad \left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_x\right] = i\hbar\hat{J}_y. \tag{33}$$

对于这样的算符，我们定义其 Casimir 算符

$$\hat{J}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2. \tag{34}$$

称为总角动量算符。同时，我们还定义升和降算符为

$$\hat{J}_+ \equiv \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- \equiv \hat{J}_x - i\hat{J}_y. \tag{35}$$

不难验证，它们满足如下的对易关系

$$\left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_x\right] = \left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_y\right] = \left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_z\right] = 0, \tag{36}$$

以及

$$\left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{J}_\pm. \tag{37}$$

例如，我们有

$$\begin{aligned}\left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_+\right] &= \left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_x + i\hat{J}_y\right] = \left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_x\right] + i\left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_y\right] \\ &= i\hbar\hat{J}_y + i(-i\hbar\hat{J}_x) = i\hbar\hat{J}_y + \hbar\hat{J}_x = \hbar\hat{J}_+.\end{aligned} \tag{38}$$

在建立了对易关系 (37) 之后，也就很容易验证对易关系 (36) 了。事实上，对于 $\hat{J}_z$ ，我们有

$$\left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_z\right] = \left[\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2,\ \hat{J}_z\right] = \left[\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2,\ \hat{J}_z\right]$$

$$
\begin{aligned}
&= \left[\frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+),\ \hat{J}_z\right] = \frac{1}{2}\left[\hat{J}_+\hat{J}_-,\ \hat{J}_z\right] + \frac{1}{2}\left[\hat{J}_-\hat{J}_+,\ \hat{J}_z\right] \\
&= \frac{1}{2}\left[\hat{J}_+,\ \hat{J}_z\right]\hat{J}_- + \frac{1}{2}\hat{J}_+\left[\hat{J}_-,\ \hat{J}_z\right] + \frac{1}{2}\left[\hat{J}_-,\ \hat{J}_z\right]\hat{J}_+ + \frac{1}{2}\hat{J}_-\left[\hat{J}_+,\ \hat{J}_z\right] \\
&= -\frac{1}{2}\hbar\hat{J}_+\hat{J}_- + \frac{1}{2}\hbar\hat{J}_+\hat{J}_- + \frac{1}{2}\hbar\hat{J}_-\hat{J}_+ - \frac{1}{2}\hbar\hat{J}_-\hat{J}_+ \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{39}
$$

又由于在总角动量算符 $\hat{J}^2$ 中， $\hat{J}_z$ 与 $\hat{J}_x$ 和 $\hat{J}_y$ 是对称的，故

$$\left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_x\right] = \left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_y\right] = 0 \tag{40}$$

也必成立。

由于 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 是对易的，它们具有共同的本征态和本征值。即我们可以找到 $\{|\lambda, m\rangle\}$ ，使得

$$\hat{J}^2|\lambda, m\rangle = \lambda\hbar^2|\lambda, m\rangle, \quad \hat{J}_z|\lambda, m\rangle = m\hbar|\lambda, m\rangle \tag{41}$$

同时成立。

为了得到本征值 λ 和 m 的可能取值范围，我们首先考虑恒等式 $\left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_+\right] = 0$ 的矩阵元

$$\left\langle\lambda', m'\left|\left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_+\right]\right|\lambda, m\right\rangle = \langle\lambda', m'|\hat{J}^2\hat{J}_+ - \hat{J}_+\hat{J}^2|\lambda, m\rangle = 0. \tag{42}$$

按照定义，我们有

$$\langle\lambda', m'|\hat{J}^2\hat{J}_+ - \hat{J}_+\hat{J}^2|\lambda, m\rangle = (\lambda' - \lambda)\hbar^2\langle\lambda', m'|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle. \tag{43}$$

因此，当 $\lambda' \neq \lambda$ 时，我们有

$$\langle\lambda', m'|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle = 0. \tag{44}$$

也就是说

$$\langle\lambda', m'|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle = \delta_{\lambda',\lambda}\langle\lambda, m'|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle \tag{45}$$

成立。

又由于

$$
\begin{aligned}
& \langle\lambda, m'|\hbar\hat{J}_+|\lambda, m\rangle = \left\langle\lambda, m'\left|\left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_+\right]\right|\lambda, m\right\rangle \\
= \ & \langle\lambda, m'|\hat{J}_z\hat{J}_+ - \hat{J}_+\hat{J}_z|\lambda, m\rangle = (m'-m)\hbar\langle\lambda, m'|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle,
\end{aligned} \tag{46}
$$

我们得到

$$
(m'-m-1)\langle\lambda, m'|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle = 0. \tag{47}
$$

因此，当 $m' \neq m+1$ 时，等式

$$
\langle\lambda, m'|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle = 0 \tag{48}
$$

成立。故我们有

$$
\langle\lambda, m'|\hat{J}_+|\lambda m\rangle = \delta_{m', m+1}\langle\lambda, m+1|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle. \tag{49}
$$

同理，利用对易关系 $\left[\hat{J}_z,\ \hat{J}_-\right] = -\hbar\hat{J}_-$，我们可得

$$
\langle\lambda, m'|\hat{J}_-|\lambda m\rangle = \delta_{m', m-1}\langle\lambda, m-1|\hat{J}_-|\lambda, m\rangle. \tag{50}
$$

为了求得 $\langle\lambda, m+1|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle$ 和 $\langle\lambda, m-1|\hat{J}_-|\lambda, m\rangle$ 的非零值，我们可以利用恒等式

$$
\frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2. \tag{51}
$$

由此，我们得到

$$
\begin{aligned}
& \frac{1}{2}\langle\lambda, m|\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+|\lambda, m\rangle \\
= \ & \frac{1}{2}\sum_{\lambda'}\sum_{m'}\langle\lambda, m|\hat{J}_+|\lambda', m'\rangle\langle\lambda', m'|\hat{J}_-|\lambda, m\rangle \\
+ \ & \frac{1}{2}\sum_{\lambda'}\sum_{m'}\langle\lambda, m|\hat{J}_-|\lambda', m'\rangle\langle\lambda, m'|\hat{J}_+|\lambda', m\rangle \\
= \ & \frac{1}{2}\langle\lambda, m|\hat{J}_+|\lambda, m-1\rangle\langle\lambda, m-1|\hat{J}_-|\lambda, m\rangle \\
+ \ & \frac{1}{2}\langle\lambda, m|\hat{J}_-|\lambda, m+1\rangle\langle\lambda, m+1|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle \\
= \ & \lambda\hbar^2 - m^2\hbar^2 = (\lambda - m^2)\hbar^2.
\end{aligned} \tag{52}
$$

注意到 $\hat{J}_+ = \left(\hat{J}_-\right)^\dagger$，故我们有

$$\langle \lambda, m-1|\hat{J}_-|\lambda, m\rangle = \overline{\langle \lambda, m|\hat{J}_+|\lambda, m-1\rangle} \tag{53}$$

以及

$$\langle \lambda, m|\hat{J}_-|\lambda, m+1\rangle = \overline{\langle \lambda, m+1|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle}. \tag{54}$$

代入上式后，我们得到

$$\frac{1}{2}\left|\langle \lambda, m|\hat{J}_+|\lambda, m-1\rangle\right|^2 + \frac{1}{2}\left|\langle \lambda, m+1|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle\right|^2 = (\lambda - m^2)\hbar^2. \tag{55}$$

另一方面，我们又有恒等式

$$\frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- - \hat{J}_-\hat{J}_+) = \hbar\hat{J}_z. \tag{56}$$

重复上面的步骤，我们可得另一方程

$$\frac{1}{2}\left|\langle \lambda, m|\hat{J}_+|\lambda, m-1\rangle\right|^2 - \frac{1}{2}\left|\langle \lambda, m+1|\hat{J}_+|\lambda, m\rangle\right|^2 = m\hbar^2. \tag{57}$$

将方程 (55) 与方程 (57) 相加后，我们得到

$$\left|\langle \lambda, m|\hat{J}_+|\lambda, m-1\rangle\right|^2 = (\lambda - m^2 + m)\hbar^2. \tag{58}$$

由于此式的左边恒大于零，故我们有

$$\lambda \geq m^2 - m = m(m-1). \tag{59}$$

这意味着，量子数 m 的取值受到限制，它应有一个上界 $\overline{m}$ 和下界 $\underline{m}$ 。这就要求

$$\left|\langle \lambda, \overline{m}+1|\hat{J}_+|\lambda, \overline{m}\rangle\right|^2 = 0 \tag{60}$$

成立。因此，我们必有

$$\lambda - (\overline{m}+1)^2 + (\overline{m}+1) = \lambda - \overline{m}(\overline{m}+1) = 0. \tag{61}$$

解此方程，我们得到

$$\lambda = \overline{m}(\overline{m}+1). \tag{62}$$

类似地，我们也要求

$$\begin{aligned}\left|\langle\lambda,\underline{m}-1|\hat{J}_-|\lambda,\underline{m}\rangle\right|^2 &= \left|\langle\lambda,\underline{m}|\hat{J}_+|\lambda,\underline{m}-1\rangle\right|^2 \\ = \ (\lambda-\underline{m}^2+\underline{m})\hbar^2 &= (\overline{m}(\overline{m}+1)-\underline{m}^2+\underline{m})\hbar^2 = 0. \qquad (63)\end{aligned}$$

解此方程，我们得到

$$\underline{m}=-\overline{m}, \quad \text{或是} \quad \underline{m}=\overline{m}+1. \qquad (64)$$

按照 $\overline{m}$ 和 $\underline{m}$ 的定义，第二解不合理，故略去。

由于量子数 m 每次改变值为 1，故我们必有

$$\overline{m}-\underline{m}=\text{非负整数}. \qquad (65)$$

代入上面得到的解 $\underline{m}=-\overline{m}$ 之后，我们得到

$$\overline{m}-\underline{m}=2\overline{m}=\text{非负整数}. \qquad (66)$$

令 $j=\overline{m}$，则 j 的可能取值为

$$j=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ 2,\cdots\cdots \qquad (67)$$

由此，我们立刻可得

$$\hat{J}^2|\lambda,m\rangle=\lambda\hbar^2|\lambda,m\rangle=\overline{m}(\overline{m}+1)\hbar^2|\lambda,m\rangle=j(j+1)\hbar^2|\lambda,m\rangle. \qquad (68)$$

并且，量子数 m 的取值满足条件

$$-j=-\overline{m}=\underline{m}\le m\le\overline{m}=j. \qquad (69)$$

今后，我们将用记号 $|j,m\rangle$ 来代替 $|\lambda,m\rangle$。

同时，从方程 (58)，我们还可得到

$$\left|\langle j,m|\hat{J}_+|j,m-1\rangle\right|^2=[j(j+1)-m(m-1)]\hbar^2. \qquad (70)$$

因此，我们有

$$\langle j,m|\hat{J}_+|j,m-1\rangle=e^{i\varphi}\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\hbar, \qquad (71)$$

或是

$$\langle j,m+1|\hat{J}_+|j,m\rangle = e^{i\varphi}\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\hbar. \tag{72}$$

在适当地选取 $|j,m\rangle$ 和 $|j,m+1\rangle$ 之间的相因子差后，我们可以令 $e^{i\varphi}=1$ 。这样，我们最后有

$$\langle j,m+1|\hat{J}_+|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\hbar. \tag{73}$$

类似地，我们可以证明

$$\langle j,m|\hat{J}_-|j,m+1\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\hbar. \tag{74}$$

$ 10.3 两个角动量的耦合及 Clebsch-Gordan 系数的定义

在第七章中，我们曾经讨论过两个电子自旋角动量之间的耦合问题。现在，我们将这一讨论加以推广，研究任意两个角动量算符之间的耦合。

假设我们有两套独立的角动量算符 $\hat{\mathbf{J}}_1=(\hat{J}_{1x},\hat{J}_{1y},\hat{J}_{1z})$ 及 $\hat{\mathbf{J}}_2=(\hat{J}_{2x},\hat{J}_{2y},\hat{J}_{2z})$ 。它们彼此之间是对易的，即我们有

$$\left[\hat{J}_{1\alpha},\ \hat{J}_{2\beta}\right]\equiv 0. \tag{75}$$

现在，我们定义两个角动量之和为

$$\hat{\mathbf{J}}=\hat{\mathbf{J}}_1+\hat{\mathbf{J}}_2. \tag{76}$$

首先，不难验证

$$\left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_1^2\right]=\left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_2^2\right]=0. \tag{77}$$

例如，我们有

$$\begin{aligned}
&\left[\hat{J}^2,\ \hat{J}_1^2\right]=\left[(\hat{\mathbf{J}}_1+\hat{\mathbf{J}}_2)^2,\ \hat{J}_1^2\right]\\
=&\ \left[\hat{J}_1^2+\hat{J}_2^2+2\hat{\mathbf{J}}_1\cdot\hat{\mathbf{J}}_2,\ \hat{J}_1^2\right]=2\left[\hat{\mathbf{J}}_1\cdot\hat{\mathbf{J}}_2,\ \hat{J}_1^2\right]\\
=&\ 2\left[\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2x}+\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2y}+\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z},\ \hat{J}_1^2\right]\\
=&\ 2\left[\hat{J}_{1x},\ \hat{J}_1^2\right]\hat{J}_{2x}+2\left[\hat{J}_{1y},\ \hat{J}_1^2\right]\hat{J}_{2y}+2\left[\hat{J}_{1z},\ \hat{J}_1^2\right]\hat{J}_{2z}=0.
\end{aligned} \tag{78}$$

又由于
$$\left[\hat{J}_x,\ \hat{J}^2\right]=\left[\hat{J}_y,\ \hat{J}^2\right]=\left[\hat{J}_z,\ \hat{J}^2\right]=0, \tag{79}$$
我们可以找到算符组 $\hat{J}^2,\hat{J}_z,\hat{J}_1^2$ 和 $\hat{J}_2^2$ 的一族共同本征态。将它们记作 $\{|j_1,j_2,j,m\rangle\}$ 。则我们有如下的联立本征方程

$$\begin{aligned}
\hat{J}_1^2\,|j_1,j_2,j,m\rangle &= j_1(j_1+1)\hbar^2\,|j_1,j_2,j,m\rangle,\\
\hat{J}_2^2\,|j_1,j_2,j,m\rangle &= j_2(j_2+1)\hbar^2\,|j_1,j_2,j,m\rangle,\\
\hat{J}^2\,|j_1,j_2,j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2\,|j_1,j_2,j,m\rangle,\\
\hat{J}_z\,|j_1,j_2,j,m\rangle &= m\hbar\,|j_1,j_2,j,m\rangle.
\end{aligned} \tag{80}$$

下面，我们要以独立角动量算符 $\hat{\mathbf{J}}_1$ 和 $\hat{\mathbf{J}}_2$ 的本征态矢的直积
$$|j_1,m_1\rangle\otimes|j_2,\ m_2\rangle \tag{81}$$
为基底来构造这一共同本征态族。首先，由于 j_1 和 j_2 是固定的常数，我们可以将 $|j_1,j_2,j,m\rangle$ 简记为 $|j,m\rangle$ ，并将它写作
$$|j,m\rangle=\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}C^{jm}_{j_1m_1,j_2m_2}\,|j_1,m_1\rangle\otimes|j_2,\ m_2\rangle. \tag{82}$$
其中的展开系数 $C^{jm}_{j_1m_1,j_2m_2}$ 被称为 Clebsch-Gordan 系数。文献中常用符号
$$C^{jm}_{j_1m_1,j_2m_2}=\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m\rangle \tag{83}$$
记之。它们中的多数都是零。下面，我们要决定哪些系数可能非零。

首先，我们注意到

$$\begin{aligned}
&\hat{J}_z|j,m\rangle = m\hbar\,|j,m\rangle\\
=\ &\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}m\hbar\,\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m\rangle\,|j_1,m_1\rangle\otimes|j_2,\ m_2\rangle\\
=\ &\left(\hat{J}_{1z}+\hat{J}_{2z}\right)|j,m\rangle\\
=\ &\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}(m_1+m_2)\hbar\,\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m\rangle\,|j_1,m_1\rangle\otimes|j_2,\ m_2\rangle.
\end{aligned} \tag{84}$$

比较方程两边系数后，我们得到

$$(m-m_1-m_2)\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m\rangle\ =0. \tag{85}$$

也就是说，我们有

$$\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m\rangle=\delta_{m_1+m_2,m}\langle j_1,m_1;j_2,m-m_1|j,m\rangle. \tag{86}$$

代入 $|j,m\rangle$ 的展开式后，我们得到

$$|j,m\rangle=\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\langle j_1,m_1;j_2,m-m_1|j,m\rangle\ |j_1,m_1\rangle\otimes|j_2,\ m-m_1\rangle. \tag{87}$$

最后，我们讨论一下量子数 j 的可能取值范围。为此，让我们比较一下两组基底 $\{|j_1,m_1\rangle\otimes|j_2,\ m_2\rangle\}$ 和 $\{|j,m\rangle\}$ 各自的维数。

对于前者，我们立刻可得

$$N_1=(2j_1+1)(2j_2+1). \tag{88}$$

而为了计算后者，我们注意到，$|j,m\rangle$ 的展开系数应该满足条件 $m=m_1+m_2$ 。因此，磁量子数 m 可能取得最大值为

$$m_{\max}=m_{1,\max}+m_{2,\max}=j_1+j_2. \tag{89}$$

而根据 10.2 节中关于角动量本征值的一般结论， $m_{\max}$ 也是量子数 j^2 的最大可能值 $j_{\max}$ 。又由于这样的最大值是唯一的，故只有 $2j_{\max}+1$ 个态

$$|j_{\max},j_{\max}\rangle,\ |j_{\max},(j_{\max}-1)\rangle,\cdots\cdots|j_{\max},-(j_{\max}-1)\rangle,\ |j_{\max},-j_{\max}\rangle \tag{90}$$

具有此最大角动量值。

接下来，我们考虑具有量子数 $m=m_{\max}-1$ 的态。显然，满足这一条件的态有两个 $|j_1,j_1-1\rangle\otimes|j_2,j_2\rangle$ 以及 $|j_1,j_1\rangle\otimes|j_2,j_2-1\rangle$ 。利用表达式 (87) 连同 10.2 节中的结论，不难看出它们的线性组合给出两个线性无关的态 $|j_{\max},j_{\max}-1\rangle$ 和 $|j=j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle$ 。其中第一个已经包括在上式中给出的 $2j_{\max}+1$

个态中。而第二个态则具有总角动量量子数 $j = j_1 + j_2 - 1$ 。将算符 $\hat{J}_-$ 连续作用到这个态上，我们得到如下 $2(j_1 + j_2 - 1) + 1 = 2j_1 + 2j_2 - 1$ 个态

$$\begin{aligned} & |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle,\ |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle, \cdots\cdots \\ & |j_1 + j_2 - 1, -(j_1 + j_2 - 2)\rangle,\ |j_1 + j_2 - 1, -(j_1 + j_2 - 1)\rangle. \end{aligned} \tag{91}$$

它们都具有相同的总角动量量子数 $j = j_1 + j_2 - 1$ 。

以此类推，我们可知在耦合角动量的表象中，具有总角动量值 $j = j_1 + j_2 - k$ 的态共有 $2(j_1 + j_2 - k) + 1$ 个。这样的过程可以继续下去，直到 j 的取值减小到某一最小值 $j_{\min}$ 为止。换句话说，对于介于总角动量最大值 $j = j_1 + j_2$ 和最小值 $j_{\min}$ 之间的任何一个正整数 j ，我们都可找到 $2j + 1$ 个态，而它们具有相同的总角动量值 j 。

现在，我们计算基底 $\{|j, m\rangle\}$ 的维数。根据上面的推论，这一数值应由下式

$$N_2 = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) \tag{92}$$

决定。将 $j_{\max} = j_1 + j_2$ 代入此式后，我们得到

$$\begin{aligned} N_2 &= \sum_{j=j_{\min}}^{j_1+j_2} (2j + 1) \\ &= 2\left(\sum_{j=j_{\min}}^{j_1+j_2} j\right) + (j_1 + j_2 - j_{\min} + 1) \\ &= 2(j_1 + j_2 - j_{\min} + 1)\frac{j_1 + j_2 + j_{\min}}{2} + (j_1 + j_2 - j_{\min} + 1) \\ &= (j_1 + j_2 - j_{\min} + 1)(j_1 + j_2 + j_{\min} + 1). \end{aligned} \tag{93}$$

由于两组基底 $\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\}$ 和 $\{|j, m\rangle\}$ 的维数应该相等，即 $N_1 = N_2$ ，我们得到方程

$$(j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \tag{94}$$

解此方程，我们有

$$j_{\min}^2 = (j_1 + j_2 + 1)^2 - (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = j_1^2 + j_2^2 - 2j_1 j_2 = (j_1 - j_2)^2, \tag{95}$$

或是

$$j_{\min} = |j_1 - j_2|. \tag{96}$$

这样，我们就最后得到了合成角动量 j 的取值范围

$$j = |j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| + 1, \cdots\cdots,\ j_1 + j_2. \tag{97}$$