自旋1/2（二能级）体系

一、轨道角动量算符

二、自旋角动量

一、轨道角动量算符

A、定义

B、对易关系

C、球极坐标系中的表示

D、轨道角动量算符的本征值和本征函数

一、轨道角动量算符

A、定义

经典力学中角动量 $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$

量子力学中仍然以上式定义角动量，只是 $\vec{r}$，$\vec{p}$ 现在是算符，并不对易

$$L_x = yp_z - zp_y$$

$$L_y = zp_x - xp_z$$

$$L_z = xp_y - yp_x$$

或写成： $L_j = \varepsilon_{jkl} x_k p_l$ （重复指标求和）

ε_{jkl} 为反对称张量 $\varepsilon_{123}=\varepsilon_{231}=\varepsilon_{312}=1$

Levi-Civita符号 $\varepsilon_{132}=\varepsilon_{321}=\varepsilon_{213}=-1$

L_x，L_y，L_z 是厄米算符，因为每个分量定义式中坐标与动量分量乘积是对易的

定义角动量平方算符 $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$

B、对易关系

$$
\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\
&= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\
&= y[p_z, zp_x] + [y, zp_x]p_z + z[p_y, xp_z] + [z, xp_z]p_y \\
&= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\
&= -i\hbar(yp_x - xp_y) = i\hbar L_z
\end{aligned}
$$

同理 $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$

$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$

$$[L_\alpha, L_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar L_\gamma$$

又可写作 $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$ $\longrightarrow$ $\begin{pmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ L_x & L_y & L_z \\ L_x & L_y & L_z \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$

此式可作为轨道角动量算符的定义

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0$$ 合并后$\left[L^2, \vec{\boldsymbol{L}}\right] = \boldsymbol{0}$。

另外角动量算符与坐标算符对易关系

$$[L_x, x] = 0, [L_x, y] = i\hbar z, [L_x, z] = -i\hbar y$$
$$[L_y, x\,] = -i\hbar z, [L_y, y] = 0, [L_y, z] = i\hbar x$$
$$[L_z, x] = i\hbar \hat{y}, [L_z, y] = -i\hbar x, [L_z, z] = 0$$

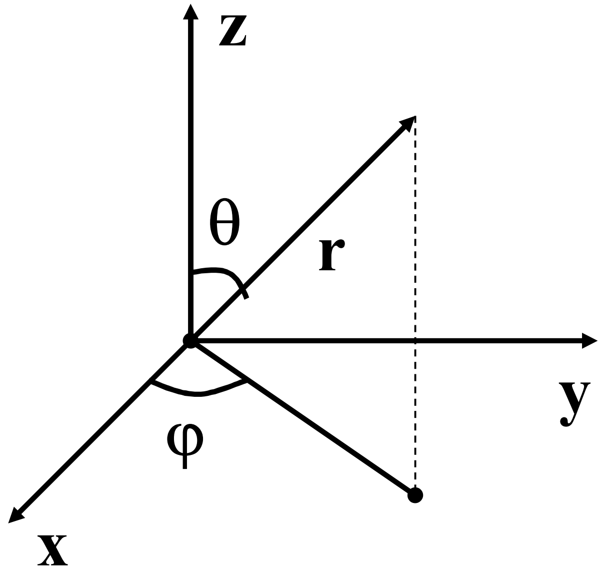
$$[L_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k$$

同理，可证明角动量和动量算符之间关系

$$[L_i, p_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k$$

C、球极坐标系中的表示

$$
\left.\begin{aligned}
L_x &= i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\\
L_y &= -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),\\
L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.
\end{aligned}\right\}
$$



$$
\begin{cases}
L^2{}_x = \cdots,\\
L^2{}_y = \cdots,\\
L^2{}_z = -\hbar^2\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2},\\
L^2 = -\hbar^2\left[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]
\end{cases}
$$

D、轨道角动量算符的本征值和本征函数

角动量z分量 $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$ 的本征值与本征函数：

本征方程： $L_z\psi = \lambda\psi$

$$or -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\psi = \lambda\psi$$

$$\Rightarrow \quad \psi = Ce^{\frac{i}{\hbar}\lambda\varphi}$$

连续性条件： $\psi(0) = \psi(2\pi)$

本征值： $\lambda = m\hbar, m = 0, \pm1, \pm2, \cdots,$ 　磁量子数

可见，微观系统的角动量在z方向的分量只能取分离值（零或$\hbar$的整数倍）。所以角动量在空间任意方向的投影是量子化的。

本征函数 $\phi_m(\varphi) = Ae^{im\varphi}$

由归一化条件 $\int_0^{2\pi} \left|\phi_m(\varphi)\right|^2 d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi A^2 = 1$

$\longrightarrow$ $A = 1/\sqrt{2\pi}$

归一化本征函数 $\phi_m(\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

角动量的平方 L^2 的本征值与本征函数:

本征方程: $L^2 Y = \alpha^2 Y$

在球坐标系中

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)=\alpha^2 Y(\theta,\varphi)$$

令 $\lambda = \alpha^2 / \hbar^2$

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi)+\lambda Y(\theta,\varphi)=0$$

此为球面方程（球谐函数方程）。其中$\boldsymbol{Y(\theta,\varphi)}$ 是 L^2属于本征值$\lambda\hbar^2$的本征函数。

L^2 的本征函数可以分离变量，令

本征函数： $Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\psi_m(\varphi)$

其中： $\psi_m(\varphi)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, m=0,\pm1,\pm2,\cdots,$

本征方程： $\hat{L}^2Y(\theta,\varphi)=\lambda\hbar^2Y(\theta,\varphi)$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\Theta)+(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta})\Theta=0,0\le\theta\le\pi$$

令：$\xi=\cos\theta(|\xi|\le 1)$

$$\boxed{\frac{d}{d\xi}[(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}\Theta]+(\lambda-\frac{m^2}{1-\xi^2})\Theta=0,0\le\theta\le\pi}$$

连带**Legendre**方程

只有当：$\lambda=l(l+1),l=0,1,2,\cdots,$ 多项式解：$P_l^m(\cos\theta),|m|\le l$

m阶***l***次连带**Legendre**函数

m阶l次连带Legendre函数

$$P_l^{|m|}(\cos\theta)=(1-\cos^2\theta)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_l(\cos\theta)$$

$$\boxed{\begin{array}{l} l=0,1,2,\cdots \\ m=-l,-l+1,\cdots l-1,l \end{array}}$$

归一化条件：

$$\int_{-1}^{1}P_l^m(\xi)P_{l'}^m(\xi)d\xi=\frac{2}{(2l+1)}\cdot\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'}$$

归一化Θ函数：

$$\Theta(\theta)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)$$

L^2 的本征函数为：

$$\boxed{\begin{array}{l} Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\dfrac{2l+1}{4\pi}\cdot\dfrac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \\ m=l,l-1,l-2,\cdots,-l+2,-l+1,-l \end{array}}$$

球谐函数

本征值：

$$\boxed{\begin{cases} L^2Y_{lm}=l(l+1)\hbar^2Y_{lm} \\ L_zY_{lm}=m\hbar Y_{lm} \end{cases}}$$

$$l=0,1,2,\cdots,m=l,l-1,\cdots,-l+1,-l$$

讨 论　（1）球谐函数系 $\{Y_{lm}(\theta,\varphi)\}$是$L^2$与$L_z$共同的本征函数系

$$L^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$L_zY_{lm}(\theta,\varphi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

（2）简并情况

在求解 L^2 本征方程的过程中，出现角量子数 l 和磁量子数 m 。

$$\boxed{l=0,1,2,\cdots} \qquad \boxed{m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l}$$

L^2 的本征值$l(l+1)\hbar^2$仅由角量子数 l 确定，而本征函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 却由l 和 m 确定。对于一个 l 值，可取 $0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$ ，这样就有 $(2l+1)$ 个 m值

l 相同而m值不同的本征函数与同一个本征值$l(l+1)\hbar^2$ 对应。

即 L^2 属于本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 的线性独立本征函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 共有 $(2l+1)$ 个。因此，$\hat{L}^2$ 的本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 是 $(2l+1)$ 度简并的。

Ex: $l=0, \quad m=0$

$$Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$L^2=0(0+1)\hbar=0$$

简并度为1

$l=1, \quad m=0,\pm1$

$$\begin{cases} Y_{11}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} \\ Y_{10}(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta \\ Y_{1-1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} \end{cases}$$

$$L^2=1(1+1)\hbar^2$$

简并度为3

$$l=2,\quad m=0,\pm1,\pm2$$

$$\begin{cases} Y_{22}(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{i2\varphi} \\ Y_{21}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\varphi} \\ Y_{20}(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y_{2-1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\varphi} \\ Y_{2-2}(\theta,\varphi)=\sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{-i2\varphi} \end{cases}$$

$$\alpha^2=2(2+1)\hbar^2$$

简并度为5

L^2本征值：

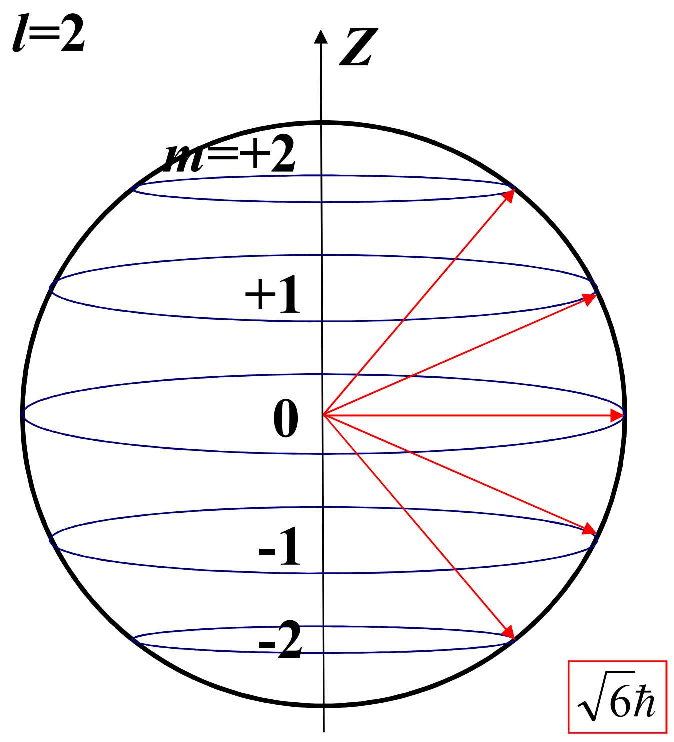
$$\boxed{l(l+1)\hbar^2, l = 1,2,\ldots}$$

确定了角动量的大小

L_z本征值：

$$\boxed{m\hbar, m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm l}$$

确定了角动量的方向



角动量的空间取向量子化

二、自旋

A、自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子：角动量量子化

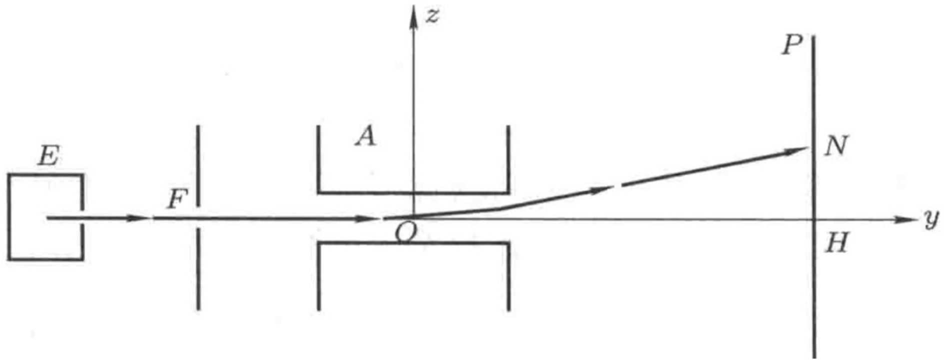
B、就自旋为 $\frac{1}{2}$ 的情况说明量子力学的假定

A、自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子：角动量量子化

1. Stern-Gerlach 实验

（1）实验描述

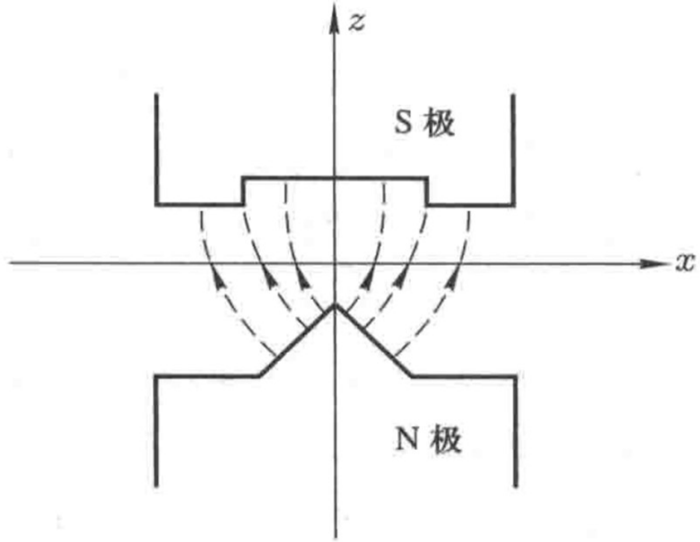
S 态(l=0)的银·原子束流，经非均匀磁场发生偏转，在感光板上呈现两条分立线。



（2）结论

I. 银原子有磁矩

在非均匀磁场中发生偏转



II. 银原子磁矩只有两种取向
即空间量子化的

（3）讨论　　　设原子磁矩为 $\vec{M}$ ，外磁场为 $\vec{B}$

原子在 z 方向外磁场 $\vec{B}$ 中的势能为

$$W = -\vec{M} \bullet \vec{B} = -MB_z \cos\theta$$

磁矩与磁场之夹角

原子 z 向受力　$F_z = -\frac{\partial W}{\partial z} = M\frac{\partial B_z}{\partial z}\cos\theta$

分析

若原子磁矩可任意取向，则 **cos**θ 可在 （**-1**，**+1**）之间连续变化，感光板将呈现连续带

但是实验结果是：出现的两条分立线对应 **cos θ = -1** 和 **+1** ，处于 ***s*** 态的氢原子 ℓ**=0**，没有轨道磁矩，所以原子磁矩来自于电子的固有磁矩，即自旋磁矩。

2. 电子自旋假设

Uhlenbeck 和 **Goudsmit 1925**年根据上述现象提出了电子自旋假设

1）每个电子都具有自旋角动量，它在空间任何方向上的投影只能取两个数值：

$$\vec{S} \longrightarrow S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$$

不是h整数倍

2）每个电子都具有自旋磁矩，它与自旋角动量的关系为：

$$\vec{M}_S = \frac{-e}{\mu}\vec{S}$$

自旋磁矩，在空间任何方向上的投影只能取两个数值：

$$M_{Sz} = \pm\frac{e\hbar}{2\mu} = \pm M_B$$

Bohr 磁子

3. 回转磁比率

1）电子回转磁比率

$$\frac{M_{Sz}}{S_z} = -\frac{e}{\mu}$$

2）轨道回转磁比率

我们知道，轨道角动量与轨道磁矩的关系是：$\vec{M}_L = -\frac{e}{2\mu}\vec{L}$

则，轨道回转磁比率为：$-\frac{e}{2\mu}$

可见电子回转磁比率是轨道回转磁比率的二倍

5. 自旋算符

（1） 概述

自旋角动量是纯量子概念，它不可能用经典力学来解释。

自旋角动量也是一个力学量，但是它和其他力学量有着根本的差别

●通常的力学量都可以表示为坐标和动量的函数 $F = F(\vec{r}, \vec{p})$

而自旋角动量则与电子的坐标和动量无关，它是电子内部状态的表征，是描写电子状态的第四个自由度（第四个变量）。

●与其他力学量一样，自旋角动量也是用一个算符描写，记为 $\vec{S}$

自旋角动量	与坐标、动量无关	$\vec{r} \times \vec{p}$ 不适用
轨道角动量	同是角动量	满足同样的角动量对易关系

异同点

轨 道 角 动 量	自 旋 角 动 量
$\vec{L}$	$\vec{S}$
$\vec{L}\times\vec{L}=i\hbar\vec{L}$	$\vec{S}\times\vec{S}=i\hbar\vec{S}$
$[L_x,L_y]=i\hbar L_z$	$[S_x,S_y]=i\hbar S_z$
$[L_y,L_z]=i\hbar L_x$	$[S_y,S_z]=i\hbar S_x$
$[L_z,L_x]=i\hbar L_y$	$[S_z,S_x]=i\hbar S_y$

由于自旋角动量在空间任意方向上的投影只能取 **$\pm\hbar/2$** 两个值

所以 S_x S_y S_z 的本征值都是$\pm$**$\hbar/2$**，其平方为**$(\hbar/2)^2$**

S^2 算符的本征值是 $S^2=S_x^2+S_y^2+S_z^2=\frac{3}{4}\hbar^2$

仿照 $\alpha^2=l(l+1)\hbar^2 \Longrightarrow S^2=s(s+1)\hbar^2=\frac{3}{4}\hbar^2 \quad \rightarrow s=\frac{1}{2}$

自旋量子数**s**
只有一个数值

轨道量子数***l***可有多个数值

（2） 可观测量 S_z 和自旋态空间

对于自旋角动量 z分量，应当联系于一个观察算符 S_z，它具有两个相反的非简并的本征值：分别是$+\frac{\hbar}{2}$和 $-\frac{\hbar}{2}$，对应的本征矢分别记作$|+\rangle$和$|-\rangle$，即

$$\begin{cases} S_z\,|+\rangle = +\frac{\hbar}{2}|+\rangle \\ S_z\,|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle \end{cases} \qquad \text{且} \qquad \begin{cases} \langle+|+\rangle = \langle-|-\rangle = 1 \\ \langle+|-\rangle = \langle-|+\rangle = 0 \end{cases}$$

S_z 本身就构成一个观测算符完备集，其态空间是二维的

$|+\rangle$和 $|-\rangle$ 构成一个基

$$|+\rangle\langle+|+|-\rangle\langle-|=I$$

在这个基下S_z具有对角形式的矩阵

$$[S_z]=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

（3）Pauli 算符

1. 引进**Pauli** 算符　　令　$\vec{S}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$　　分量形式 $\Rightarrow$

$$\begin{cases} S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \\ S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \\ S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \end{cases}$$

对易关系：$\vec{S}\times\vec{S} = i\hbar\vec{S}$　$\Rightarrow$　$\vec{\sigma}\times\vec{\sigma} = 2i\vec{\sigma}$

分量形式：
$$\begin{cases} \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z \\ \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y = 2i\sigma_x \\ \sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z = 2i\sigma_y \end{cases}$$

因为S_x,S_y,S_z 的本征值都是±$\hbar$/2，
所以$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$的本征值都是±1；

$\sigma_x^2,\sigma_y^2,\sigma_z^2$ 的本征值都是1

即：

$$\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=\mathrm{I}$$

2. 反对易关系

基于**σ**的对易关系，可以证明**σ**各分量之间满足反对易关系:

$$\begin{cases} \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0 \\ \sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y = 0 \\ \sigma_z\sigma_x + \sigma_x\sigma_z = 0 \end{cases}$$

证： $\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y = 2i\sigma_x$

左乘$\boldsymbol{\sigma}_y$ $\sigma_y\sigma_y\sigma_z - \sigma_y\sigma_z\sigma_y = 2i\sigma_y\sigma_x$ $\Rightarrow$ $\sigma_z - \sigma_y\sigma_z\sigma_y = 2i\sigma_y\sigma_x$

$\boldsymbol{\sigma}_y^2=1$

右乘$\boldsymbol{\sigma}_y$ $\sigma_y\sigma_z\sigma_y - \sigma_z\sigma_y^2 = 2i\sigma_x\sigma_y$

$$\sigma_y\sigma_z\sigma_y - \sigma_z = 2i\sigma_x\sigma_y \Rightarrow \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$$

或 $\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x$

同理可证: **z, y** 分量的反对易关系亦成立. [证毕]

由对易关系和反对易关系还可以得到关于 **Pauli** 算符的如下非常有用性质:

$$\begin{cases} \sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \\ \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x \\ \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y \end{cases}$$

3. Pauli算符的矩阵形式

根据定义 $\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z = S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

求Pauli 算符的其他两个分量

令 $\sigma_x = \begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$ $\xrightarrow{\text{利用反对易关系}}$ $\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z$

得：$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix} = -\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}a & b\\ -c & -d\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-a & b\\ -c & d\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases}a=0\\ d=0\end{cases}$

σ_x 简化为：$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}$ 由力学量算符厄密性 $\sigma_x^+ = \sigma_x \Rightarrow \begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}^+ = \begin{pmatrix}0 & c^*\\ b^* & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}$ 得：$b = c^*$ (或$c = b^*$)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & c^*\\ c & 0\end{pmatrix} \qquad \sigma_x^2 = \begin{pmatrix}0 & c^*\\ c & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & c^*\\ c & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}|c|^2 & 0\\ 0 & |c|^2\end{pmatrix} = I \Rightarrow |c|^2 = 1$$

$\boxed{\sigma_x^2 = I}$

令：c = exp[iα]（α为实），则 $\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & e^{-i\alpha}\\ e^{i\alpha} & 0\end{pmatrix}$

求$\boldsymbol{\sigma}_y$的矩阵形式

$$i\sigma_y = \sigma_z \sigma_x \Rightarrow \sigma_y = -i\sigma_z \sigma_x$$

写成矩阵形式 $$\sigma_y = -i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\alpha} \\ ie^{i\alpha} & 0 \end{pmatrix}$$

这里有一个相位不定性，习惯上取**α= 0**，

于是得到 **Pauli** 算符的矩阵形式为：

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{i} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}$$

从自旋算符与 **Pauli** 矩阵的关系,自然得到自旋算符的矩阵表示：

$$\boldsymbol{S}_x = \frac{\hbar}{\mathbf{2}}\begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{S}_y = \frac{\hbar}{\mathbf{2}}\begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{i} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{S}_z = \frac{\hbar}{\mathbf{2}}\begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}$$

更一般地，对于在极角为(θ,φ)的单位矢量$\vec{n}$方向上，总角动量$\vec{\mathbf{S}}$的分量

$$\mathbf{S}_n = \vec{n}\cdot\vec{\mathbf{S}} = S_x \sin\theta\cos\varphi + S_y \sin\theta\sin\varphi + S_z \cos\theta$$

因此相应的观察算符 S_n 在基$\{|+\rangle, |-\rangle\}$下的矩阵表示为

$$[S_n] = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}$$

该算符的本征值为$\pm\dfrac{\hbar}{2}$ 在基 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$下的本征矢量记作 $|+\rangle_n, |-\rangle_n$

$$\begin{cases} |+\rangle_n = \cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}|+\rangle + \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}|-\rangle \\ |-\rangle_n = -\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}|+\rangle + \cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}|-\rangle \end{cases}$$

将算符$\boldsymbol{S_x}$、$\boldsymbol{S_y}$的本征值本征矢量记作 $\left|\pm\right\rangle_x$,$\left|\pm\right\rangle_y$

$$\left|\pm\right\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm |-\rangle]$$

$$\left|\pm\right\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm \mathrm{i}\,|-\rangle]$$

B、就自旋为$\frac{1}{2}$的情况说明量子力学的假定

1. 各自旋态的制备

（1）$|+\rangle$和$|-\rangle$自旋态的制备

算符S_z的本征态的制备非常简单。只要利用斯特恩-盖拉赫实验的结果，在右侧选择性地分别让向上偏转或向下偏转的银原子束通过，例如在原有冷凝位置开孔，那么它们分别就全部处于是$|+\rangle$态或$|-\rangle$态。

因此实际上这套设备对于银原子所起的作用相当于是某种“原子起偏器”，类似于光学起偏器是将任意偏振成分的光通过后变为某一偏振光。

（**2**）$\left|\pm\right\rangle_x$、$\left|\pm\right\rangle_y$、$\left|\pm\right\rangle_n$ 自旋态的制备

只要将系统的设备进行旋转，使其银原子束发出的方向分别平行于***Ox***轴、***Oy***轴、单位矢量$\vec{n}$，由于相应的算符$\boldsymbol{S_x}$、$\boldsymbol{S_y}$、$\boldsymbol{S_z}$也都分别构成可观测算符完备集，因此可以完全类似$\boldsymbol{S_z}$的处理进行态的制备。

（**3**）一般自旋态的制备

$$|\psi\rangle = \alpha\,|+\rangle + \beta\,|-\rangle \qquad \left(|\,\alpha\,|^2 + |\,\beta\,|^2 = 1\right)$$

模长方面，事实上一定存在唯一的$\theta \in \left[0, \pi\right]$满足：

$$\begin{cases} \cos\dfrac{\theta}{2} = \left|\alpha\right| \\ \sin\dfrac{\theta}{2} = \left|\beta\right| \end{cases}$$

而相位方面，存在物理效应的仅仅是α、β的相位差，因此可令

$$\begin{cases}\varphi = \arg\beta - \arg\alpha \\ \chi = \arg\beta + \arg\alpha\end{cases}$$

所以 $$\begin{cases}\arg\alpha = \dfrac{\chi}{2} - \dfrac{\varphi}{2} \\ \arg\beta = \dfrac{\chi}{2} + \dfrac{\varphi}{2}\end{cases}$$

$$|\psi\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\chi}{2}}\left[\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}|-\rangle\right]$$

与$\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{n}}$的本征矢$|+\rangle_n = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}|-\rangle$ 比较：

对于任意的自旋态$|\psi\rangle$，总存在一个单位矢量$\vec{n}$ 所决定的方向，使得它与$|+\rangle_n$ 只相差一个没有物理意义的相位因子。

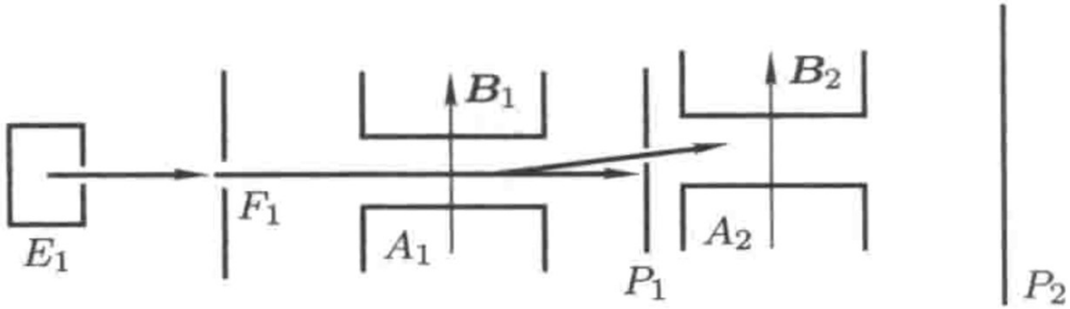
2. 自旋的测量

利用斯特恩-盖拉赫实验设备可以测量银原子的角动量在指定方向上的分量；另一方面也可以用来制备指定的自旋态。因此两套实验设备级联放置，实际上就可以构成一种类似于光学中的“检偏设备”，用以验证前面提出的量子力学模型。

实验假定两套设备安排很近且无其他干扰，使得银原子在两套设备之间运动过程中自旋态不会发生改变。

（1）同向级联设备实验

现使两套设备的轴线均平行于Oz轴。第一套设备的作用是制备处于$|+\rangle$态 的原子，第二套设备测量其 S_z。

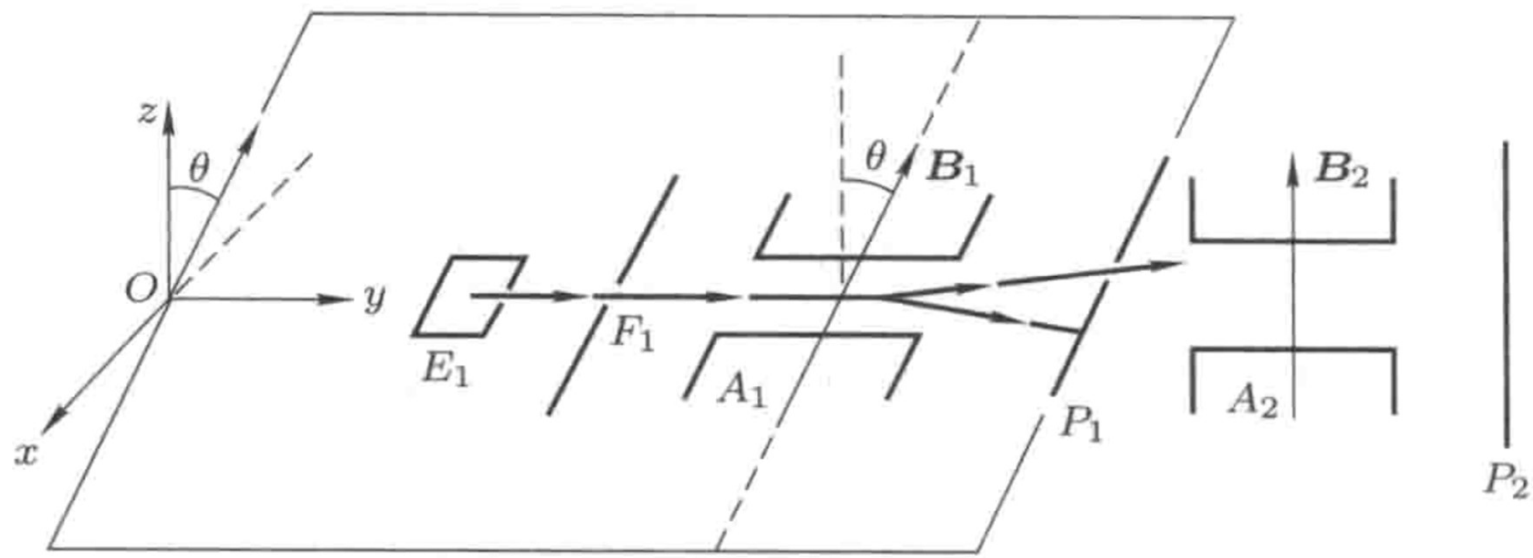


根据量子力学的假定，进入第二套设备的银原子全部处于本征态 $|+\rangle$ ，

因而测量结果一定是本征值$+\dfrac{\hbar}{2}$ ，

因而所有银原子都应该冷凝到同一个斑点处。实验结果与理论预测一致。

（**2**） 异向级联设备实验一



现在前一实验基础上调整第一套设备，使其轴线平行于极角**(*θ*,*φ*=0)** 的单位矢量 $\vec{n}$ （即位于***xOz***面内），而保持第二套设备轴线方向不变。

于是从“起偏器”发出的原子自旋态都处于

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|-\rangle$$

那么在经过第二套设备后，理论将会预期，原子有 $p_{+} = \cos^2\frac{\theta}{2}$ 的概率测量值为$+\hbar/2$ ，落到上冷凝点；

有 $p_{-} = \sin^2\frac{\theta}{2}$ 的概率测量值为 $-\hbar/2$ ，落到下冷凝点；

因而当原子数目较多的时候，上下冷凝点处的原子数目应当分别正比于

$\cos^2\frac{\theta}{2}$和 $\sin^2\frac{\theta}{2}$ 。实验结果证明了这一预测。

（**3**） 异向级联设备实验二

第一台设备按上述调整，同时将第二套设备的轴线调整为平行于 ***Ox***轴，即对于态

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|-\rangle$$

测量其角动量 ***x***分量 $\boldsymbol{S_x}$。可以计算得

$$\begin{cases} {}_x\langle + | \psi \rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\dfrac{\theta}{2} + \sin\dfrac{\theta}{2}\right) = \cos\left(\dfrac{\pi}{4} - \dfrac{\theta}{2}\right) \\ {}_x\langle - | \psi \rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\dfrac{\theta}{2} - \sin\dfrac{\theta}{2}\right) = \sin\left(\dfrac{\pi}{4} - \dfrac{\theta}{2}\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} {}_x\langle + | \psi \rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\dfrac{\theta}{2} + \sin\dfrac{\theta}{2} \right) = \cos\left(\dfrac{\pi}{4} - \dfrac{\theta}{2} \right) \\ {}_x\langle - | \psi \rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\dfrac{\theta}{2} - \sin\dfrac{\theta}{2} \right) = \sin\left(\dfrac{\pi}{4} - \dfrac{\theta}{2} \right) \end{cases}$$

可见测量$\boldsymbol{S}_x$得到本征值 $\pm\hbar/2$ 的概率分别是

$\cos^2\left(\dfrac{\pi}{4} - \dfrac{\theta}{2} \right)$ 和 $\sin^2\left(\dfrac{\pi}{4} - \dfrac{\theta}{2} \right)$。

关于实验检验，可以通过观察冷凝斑点的强度来验证。

（**4**） 平均值

关于这一实验的量子理论与经典理论之间的关系，实际上应当从均值期望的角度来理解。

例如在异向级联设备实验一中，无论 θ大小如何（只要不等于 **0**或 π），第二套设备测量其 S_z总会出现两个结果：$\pm\hbar/2$。

但是这与经典直觉是相悖的，经典理论给出的结果应当是唯一的，即 $\frac{\hbar}{2}\cos\theta$

实际上，正确的理解应当是从期望角度来解释两者之间的联系，即认为经典结果是对于量子结果的均值描述。

若从概率的角度来看的话，θ越小，得到 $-\hbar/2$ 结果的概率 $\sin^2\dfrac{\theta}{2}$ 也就越小。

一般地，在多次（N次）全同实验下，测量结果的平均值

$$\left\langle S_z\right\rangle=\frac{1}{N}\left[\frac{\hbar}{2}N\cos^2\frac{\theta}{2}-\frac{\hbar}{2}N\sin^2\frac{\theta}{2}\right]=\frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

这与经典结果是一致的。

实际上这也是算符 $\boldsymbol{S}_z$在$\left|\psi\right\rangle$下的期望$\left\langle S_z\right\rangle$，或者说正是矩阵元 $\left\langle\psi\right|S_z\left|\psi\right\rangle$

类似地

$$\langle S_x \rangle = \frac{1}{N}\left[\frac{\hbar}{2}N\cos^2\left(\frac{\pi}{4}-\frac{\theta}{2}\right)-\frac{\hbar}{2}N\sin^2\left(\frac{\pi}{4}-\frac{\theta}{2}\right)\right]=\frac{\hbar}{2}\sin\theta$$

也等于相应算符 $\boldsymbol{S_x}$的矩阵元，例如在基$\{|+\rangle,|-\rangle\}$下计算：

$$\langle\psi|S_x|\psi\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\end{bmatrix}=\frac{\hbar}{2}\sin\theta$$

可见角动量分量的均值，就是相应算符的期望——矩阵元，
这进一步说明了引入相应算符来描述角动量的合理性。

前面得到的两个均值 $\frac{\hbar}{2}\cos\theta$ 和 $\frac{\hbar}{2}\sin\theta$，

实际上正是经典理论中模长为 $\hbar/2$ 、取向为“起偏器”轴向的经典角动量分别在 ***Oz***轴和 ***Ox***轴的分量。

更普遍地，若计算三个算符 $\boldsymbol{S_x}$、$\boldsymbol{S_y}$、 $\boldsymbol{S_z}$在态 $\left|+\right\rangle_n$ 中的平均值：

$$\begin{cases} {}_n\left\langle + \middle| S_x \middle| + \right\rangle_n = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\varphi \\ {}_n\left\langle + \middle| S_y \middle| + \right\rangle_n = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\varphi \\ {}_n\left\langle + \middle| S_z \middle| + \right\rangle_n = \frac{\hbar}{2}\cos\theta \end{cases}$$

实际上就是经典理论中模长为 $\hbar/2$ 、取向为(θ,φ)方向的经典角动量分别在 ***Ox*** 轴、 ***Oy***轴和 ***Oz***轴的分量。