[Cohen 量子力学 Vol.1] Chap.6
量子力学中角动量的普遍性质

张沐华

July 26th 2020

角动量在经典力学中具有很重要的地位。经典理论表明，孤立系统的总角动量守恒。某些非孤立系统，例如有心势场中的质点，其相对于势场中心的角动量也是运动常量；这一事实导致，之巅的运动将被局限于一个固定的平面内，且满足面积速度不变的规律。

在量子力学中上述结果都有等价的论述。与一个系统的经典角动量 $\boldsymbol{\mathcal{L}}$ 相对应的量子对象，是观察算符矢量 $\boldsymbol{L}$ ，它包含三个观察算符分量 L_x 、L_y 、L_z （直角坐标系）。然而并不是所有量子的角动量都可以与经典对应：

量子力学中的角动量包含有两部分：其中一部分存在经典类比，例如质点的轨道运动伴随的角动量，这称为“**轨道角动量**”，符号上采用 $\boldsymbol{L}$ ；另一部分则不存在经典类比，例如在某些实验中需要引入的内禀角动量以合理解释，称之为“**自旋角动量**”，符号上采用 $\boldsymbol{S}$ 。而一个复杂系统其各个组成部分的各个轨道角动量 L_i 与自旋角动量 S_i 相互作用、耦合，构成了系统的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 。在不作具体区分的时候，也用 $\boldsymbol{J}$ 来表示各种类型的角动量。

本章首先讨论一切角动量的普遍性质。

1 角动量所特有的对易关系式

1.1 轨道角动量

为了得到无自旋粒子的轨道角动量分量算符 L_i ，首先考虑经典角动量的分量

$$\mathcal{L}_x = yp_z - zp_y$$

它是坐标和动量的函数，因此利用前面的量子化规则（且注意到 Y 与 P_z 、Z 与 P_y 都可对易，因此无需对称化），因此写出其对应的量子观察算符非常简单

$$L_x = YP_z - ZP_y$$

这显然是一个厄米算符。另外两个分量也容易得到；于是普遍规律可以写为

$$L_i = R_j P_k - R_k P_j \quad \Longleftrightarrow \quad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P}$$

于是对易子很容易求出：

$$\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] \\
&= [YP_z, ZP_x] + [ZP_y, XP_z] - [YP_z, XP_z] - [ZP_y, ZP_x] \\
&= [YP_z, ZP_x] + [ZP_y, XP_z] \\
&= YP_zZP_x - ZP_xYP_z + ZP_yXP_z - XP_zZP_y \\
&= Y[P_z, Z]P_x + X[Z, P_z]P_y \\
&= -\mathrm{i}\hbar YP_x + \mathrm{i}\hbar XP_y \\
&= \mathrm{i}\hbar L_z
\end{aligned}$$

于是：

$$\left.\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= \mathrm{i}\hbar L_z \\
[L_y, L_z] &= \mathrm{i}\hbar L_x \\
[L_z, L_x] &= \mathrm{i}\hbar L_y
\end{aligned}\right\} [L_i, L_j] = \epsilon_{ijk}\mathrm{i}\hbar L_k$$

这就是轨道角动量满足的代数关系，实际上就是**李代数 $\mathfrak{so}(3)$** ，也被称作**角动量代数**。

上述结果对于多粒子的系统也是成立的，即系统的总角动量是各个粒子角动量之和：

$$\boldsymbol{L} = \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{L}_n$$

其中每个粒子的角动量 $\boldsymbol{L}_n$ 都满足上述代数关系 $[L_{ni}, L_{nj}] = \epsilon_{ijk}\mathrm{i}\hbar L_{nk}$ ；并且 $\boldsymbol{L}_n$ 和 $\boldsymbol{L}_m$ $(m \neq n)$ 也得可对易的，因为它们作用在不同粒子的态空间。最后，对于总角动量 $\boldsymbol{L}$ ，它的分量也满足角动量代数。

1.2 推广：角动量的定义

前述的轨道角动量所满足的对易关系，实际上从它是李代数 $\mathfrak{so}(3)$ 可以看出，更深层次反映的是三维空间中旋转的几何性质。因此不妨采取更普遍的观点：

如果任意三个观察算符 J_x 、J_y 、J_z 满足关系

$$\left.\begin{aligned}
[J_x, J_y] &= \mathrm{i}\hbar J_z \\
[J_y, J_z] &= \mathrm{i}\hbar J_x \\
[J_z, J_x] &= \mathrm{i}\hbar J_y
\end{aligned}\right\} [J_i, J_j] = \epsilon_{ijk}\mathrm{i}\hbar J_k$$

则可以称 $\boldsymbol{J}=(J_x,J_y,J_z)$ 为某种角动量。

引入“**角动量平方**”算符：

$$\boldsymbol{J}^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2$$

显然它也是一个厄米算符。计算对易子：

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{J}^2,J_x]&=[J_x^2+J_y^2+J_z^2,J_x]\\&=[J_x^2,J_x]+[J_y^2,J_x]+[J_z^2,J_x]\\&=[J_y^2,J_x]+[J_z^2,J_x]\\&=-\mathrm{i}\hbar J_yJ_z-\mathrm{i}\hbar J_zJ_y+\mathrm{i}\hbar J_zJ_y+\mathrm{i}\hbar J_yJ_z\\&=0\end{aligned}$$

另外两个分量也是一样；可以一并记为

$$\left.\begin{aligned}[\boldsymbol{J}^2,J_x]=0\\ [\boldsymbol{J}^2,J_y]=0\\ [\boldsymbol{J}^2,J_z]=0\end{aligned}\right\}[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}]=0$$

上面的对易关系 $[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}]=0$ ，连同 $[J_i,J_j]=\epsilon_{ijk}\mathrm{i}\hbar J_k$ 说明，**角动量的三个分量不可能同时测量；但是角动量平方却和角动量的任一分量都相容**。于是在很多问题中，由于不能得到由 $\boldsymbol{J}$ 的三个分量的共同本征矢构成的态空间的基，因此只能取 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z（或其他分量）的共同本征矢集合来描述一些问题，这两个算符分别对应于角动量的模平方和角动量在 Oz 轴上的分量。

2 角动量的普遍理论

本节主要讨论在一般情况下确定 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的谱，并寻求它们的共同本征矢。

2.1 定义和符号

2.1.1 算符 J_+ 、J_- 的引入

首先引入两个算符

$$\begin{aligned}J_+&=J_x+\mathrm{i}J_y\\J_-&=J_x-\mathrm{i}J_y\end{aligned}$$

对于选定的 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 为基础的讨论将会很方便。显然，J_+ 、J_- 并不是厄米算符，但它们互为伴随算符。容易证明下列对易关系：

$$
\begin{aligned}
&[J_z, J_+] = \hbar J_+ \\
&[J_z, J_-] = -\hbar J_- \\
&[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \\
&[\boldsymbol{J}^2, J_+] = [\boldsymbol{J}^2, J_-] = [\boldsymbol{J}^2, J_z] = 0
\end{aligned}
$$

这四个算符及其对易关系就是本节只使用到的。

另外：

$$
\begin{aligned}
J_+J_- &= (J_x + \mathrm{i}J_y)(J_x - \mathrm{i}J_y) = J_x^2 + J_y^2 - \mathrm{i}[J_x, J_y] \\
&= J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z \\
&= \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \\
J_-J_+ &= (J_x - \mathrm{i}J_y)(J_x + \mathrm{i}J_y) = J_x^2 + J_y^2 + \mathrm{i}[J_x, J_y] \\
&= J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z \\
&= \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \\
\boldsymbol{J}^2 &= \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2
\end{aligned}
$$

2.1.2 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值的符号

首先由于 $\boldsymbol{J}^2$ 的定义，无论任何右矢 $|\psi\rangle$ ，矩阵元 $\langle\psi|\boldsymbol{J}^2|\psi\rangle$ 始终是非负数：

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\boldsymbol{J}^2|\psi\rangle &= \langle\psi|J_x^2|\psi\rangle + \langle\psi|J_y^2|\psi\rangle + \langle\psi|J_z^2|\psi\rangle \\
&= \|J_x|\psi\rangle\|^2 + \|J_y|\psi\rangle\|^2 + \|J_z|\psi\rangle\|^2 \geq 0
\end{aligned}
$$

因此 $\boldsymbol{J}^2$ 的全体本征值一定都是非负数。考虑到角动量具有 $\hbar$ 的量纲，于是可以将它的全体本征值写成下面的形式：

$$
j(j+1)\hbar
$$

并限定 $j \geq 0$ 。一方面这是因为函数 $j^2 + j$ 在 $j \geq 0$ 的区间上的值取遍全体非负实数；另一方面将在后面看到，取这一形式的好处。而且确定了 j ，也就确定了本征值 $j(j+1)\hbar$ 。

关于 J_z 的本征值，习惯上直接记为 $m\hbar$ 。

2.1.3 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征方程

两个算符 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值的指标 (j,m) 可用于标记它们的共同本征矢；但是一般而言它们两者并不构成一个 CSCO，因此还需要引入第三个指标（未必是离散的）k 用以对共同本征矢进行区分。于是在角动量问题中，要求解的目标方程便是：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2|k,j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|k,j,m\rangle \\ J_z|k,j,m\rangle &= m\hbar|k,j,m\rangle\end{aligned}$$

2.2 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值

首先证明三个引理：

引理 I： **若 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的对应于同一本征矢 $|k,j,m\rangle$ 的本征值，则一定有：**$-j \leq m \leq j$ 。

考虑矢量模方非负：

$$\begin{aligned}\|J_+|k,j,m\rangle\|^2 &= \langle k,j,m|J_-J_+|k,j,m\rangle \geq 0 \\ \|J_-|k,j,m\rangle\|^2 &= \langle k,j,m|J_+J_-|k,j,m\rangle \geq 0\end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned}\langle k,j,m|J_-J_+|k,j,m\rangle &= \langle k,j,m|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|k,j,m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 \\ &= (j-m)(j+m+1)\hbar^2 \geq 0 \\ \langle k,j,m|J_+J_-|k,j,m\rangle &= \langle k,j,m|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|k,j,m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 \\ &= (j+m)(j-m+1)\hbar^2 \geq 0\end{aligned}$$

即证。

引理 II： **设 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的对应于同一本征矢 $|k,j,m\rangle$ 的本征值，则**

1）若 $m=-j$ ，则 $J_-|k,j,m\rangle = 0$ ；

2）若 $m > -j$ ，则 $J_-|k,j,m\rangle = |k',j,m-1\rangle \neq 0$ 。

首先 $\|J_-|k,j,m\rangle\|^2 = \hbar^2[j(j+1)-m(m-1)]$ ，当 $m=-j$ 时其值为零，则 1）成立。实际上其逆命题也是成立的，即 $J_-|k,j,m\rangle = 0 \Longrightarrow m=-j$ 。而当 $m > -j$ 时其模长不为零。

另一方面，分别考虑对易关系

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_-$$
$$[\boldsymbol{J}^2, J_-] = 0$$

可见

$$\boldsymbol{J}^2 J_-|k,j,m\rangle = J_-\boldsymbol{J}^2|k,j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_-|k,j,m\rangle$$
$$J_z J_-|k,j,m\rangle = J_- J_z|k,j,m\rangle - \hbar J_-|k,j,m\rangle = (m-1)\hbar J_-|k,j,m\rangle$$

即证。

引理 III:　设 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的对应于同一本征矢 $|k,j,m\rangle$ 的本征值，则

1）若 $m = j$ ，则 $J_+|k,j,m\rangle = 0$ ；

2）若 $m > j$ ，则 $J_+|k,j,m\rangle = |k',j,m+1\rangle \neq 0$ 。

证明类似。

利用上述三条引理即可确定 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的谱。

设 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的对应于同一本征矢 $|k,j,m\rangle$ 的本征值，那么 $-j \leq m \leq j$ ，于是存在非负整数 p 使得

$$-j \leq m-p < -j+1$$

考虑矢量: $J_-^p|k,j,m\rangle$ ，根据引理　可知其是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的共同本征矢，分别属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $(m-p)\hbar$ 。且

$$m-p \geq -j$$

首先假设 $m-p > -j$ ，再将 J_- 作用于 $J_-^p|k,j,m\rangle$ ，根据引理　，$J_-^{p+1}|k,j,m\rangle$ 为非零矢量且本征值为 $m-p-1 < -j$ ，但这与引理　矛盾，因此只能 $m-p=-j$ ；于是据引理　，$J_-^{p+1}|k,j,m\rangle = 0$ 。

于是证明了，存在非负整数 p 使得 $m-p=-j$ 。

同理考虑矢量：$J_+^p|k,j,m\rangle$ ，且根据引理　，类似上述过程可以证明：存在非负整数 q 使得 $m+q=j$ 。

结合起来可知，存在两个非负整数 p 、q ，使得 $p+q=2j$ 。另一方面，对于给定的 j ，存在不同的 (p,q) 组合，等价于说存在不同的 m 值。由此推知可以归结下述结果：

1）数 j 必须是非负整数或半整数： 0 1/2 1 3/2 2 5/2 3 $\cdots$ 。

2）对于一个固定的 j ，m 的可能值有 $(2j+1)$ 个： $-j,-j+1,\cdots,j-1,j$ 。**因此，若 j 是半整数，则 m 也是半整数**。

2.3 “标准表象” $\{|k,j,m\rangle\}$

2.3.1 基右矢

考虑在态空间 $\mathscr{E}$ 起作用的一个角动量 $\boldsymbol{J}$ 。对于两个算符 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z ，取在所研究情况下可能出现的一组确定的本征值 $\big(j(j+1)\hbar^2,m\hbar\big)$ ，或者说一组确定的 (j,m) ，及其对应的各个 $\{|k,j,m\rangle\}$ ，其张成一个 $\mathscr{E}$ 的子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ ；由于一般而言这两个算符不构成 CSCO。故子空间维数一般 $g(j,m)>1$ 。现在在该子空间中选择任意一个正交归一基

$$\{|k,j,m\rangle;k=1,2,\cdots,g(j,m)\}$$

若 $m\neq j$ ，则在 $\mathscr{E}$ 中一定有另一个子空间 $\mathscr{E}(j,m+1)$ ；同样若 $m\neq -j$ ，则在 $\mathscr{E}$ 中一定有另一个子空间 $\mathscr{E}(j,m-1)$ 。这两个新的子空间的正交归一基，可以由前述 $\mathscr{E}(j,m)$ 已选定的正交归一基出发构造如下。

首先证明，若 $k_1\neq k_2$ ，则 $J_+|k_1,j,m\rangle$ 与 $J_+|k_2,j,m\rangle$ 正交；$J_-|k_1,j,m\rangle$ 与 $J_-|k_2,j,m\rangle$ 正交：

$$\begin{aligned}\langle k_2,j,m|J_\mp J_\pm|k_1,j,m\rangle &= \langle k_2,j,m|(\boldsymbol{J}^2-J_z^2\mp\hbar J_z)|k_1,j,m\rangle\\ &= \big[j(j+1)-m(m\pm1)\big]\hbar^2\langle k_2,j,m|k_1,j,m\rangle\\ &= 0\end{aligned}$$

而若 $k_1=k_2=k$ 则得到

$$\begin{aligned}\|J_\pm|k,j,m\rangle\|^2 &= \langle k,j,m|J_\mp J_\pm|k,j,m\rangle\\ &= \langle k,j,m|(\boldsymbol{J}^2-J_z^2\mp\hbar J_z)|k,j,m\rangle\\ &= \big[j(j+1)-m(m\pm1)\big]\hbar^2\langle k,j,m|k,j,m\rangle\\ &= \big[j(j+1)-m(m\pm1)\big]\hbar^2\end{aligned}$$

于是可以选择如下的矢量集合

$$\left\{|k,j,m\pm1\rangle=\frac{J_\pm|k,j,m\rangle}{\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}};k=1,2,\cdots\right\}$$

构成 $\mathscr{E}(j,m\pm1)$ 的一个正交归一集合；再证明 $\mathscr{E}(j,m\pm1)$ 中的任一矢量 $|\alpha,j,m\pm1\rangle$ 都不与该集合中的矢量正交即可。为此，考虑由于 $m\pm1\neq\mp j$ ，因此 $J_\mp|\alpha,j,m\pm1\rangle\in\mathcal{E}(j,m)$ 且正交于所有 $J_\mp|k,j,m\pm1\rangle$ ；而根据上面的定义，$J_\mp|k,j,m\pm1\rangle\propto J_\mp J_\pm|k,j,m\rangle\propto|k,j,m\rangle$ ，于是 $J_\mp|\alpha,j,m\pm1\rangle$ 正交于所有 $|k,j,m\rangle$ ，但这违反了正交归一基的选取；所以不存在 $\mathscr{E}(j,m\pm1)$ 中的矢量 $|\alpha,j,m\pm1\rangle$ 正交于所有上述集合中的矢量。于是上述集合就构成了 $\mathscr{E}(j,m\pm1)$ 的正交归一基。

注：上述集合中矢量的定义，实际上隐含了一种相位的选择，即使得系数为实数。

特别地，由此可见 $\mathscr{E}(j,m\pm1)$ 与 $\mathscr{E}(j,m)$ 维数相等；或者说维数与 m 无关：

$$g(j,m)=g(j,m\pm1)=g(j,m\mp1)=g(j)$$

上面的过程，得到了对于问题中给定的一个 j 和相应所有可能的 m ，其子空间的正交归一基的构造。下面进一步考虑任何可能的 j ，都按照上述步骤为其对应的 $(2j+1)$ 个子空间构造正交归一基。于是对于任何可能的 j ，都按照这样的方法得到了 $(2j+1)g(j)$ 个相互正交的归一化矢量 $|k,j,m\rangle$ ，它们的集合就构成了态空间 $\mathscr{E}$ 的一个"标准基"：

$$\left\{|k,j,m\rangle\middle|j=1,\frac{1}{2},2,\cdots;\quad m=-j,\cdots,j;\quad k=1,2,\cdots,g(j)\right\}$$

它的正交归一关系和封闭性关系分别为

$$\langle k',j',m'|k,j,m\rangle=\delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

$$\sum_j\sum_{m=-j}^{j}\sum_{k}^{g(j)}|k,j,m\rangle\langle k,j,m|=1$$

大多数情况下，为了确定一个标准基，即确定参数 k ，通常会选取与 $\boldsymbol{J}$ （的三个分量都）对易，且与算符 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 构成 CSCO 的若干可观测量 $A,B,\cdots$ ：

$$[A,\boldsymbol{J}]=[B,\boldsymbol{J}]=\cdots=0$$

这种情况下，那么上面的任意子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 在 A （或 B 或其他 CSCO 中的算符）的作用下都具有整体不变性，即 $\forall|\psi_{j,m}\rangle\in\mathscr{E}(j,m)$ ，都有 $A|\psi_{j,m}\rangle\in\mathscr{E}(j,m)$ 。换句话说 $A|\psi_{j,m}\rangle$ 分别是算符 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的属于同一本征值的本征矢。

因此对于给定的一个 j ，首先在 $\mathscr{E}(j,j)$ 中，寻找各个算符 $A,B,\cdots$ 的共同本征矢 $|k,j,j\rangle$ （即将它们的矩阵（分块）对角化），将如此求得的各个本征值记作 $(a_{k,j},b_{k,j},\cdots)$ 。已经假定

了 $A,B,\cdots$ 、$\boldsymbol{J}^2$ 、J_z 构成 CSCO，因此与每组本征值 $(a_{k,j},b_{k,j},\cdots)$ 相联系的只有 $\mathscr{E}(j,j)$ 中的唯一一个矢量 $|k,j,j\rangle$ 。

给定一个 j ，集合 $\{|k,j,j\rangle|k=1,2,\cdots,g(j)\}$ 构成空间 $\mathscr{E}(j,j)$ 中的一个正交归一基，从而可以按照前面的方法构成其他子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 的正交归一基，最后构成 $\mathscr{E}$ 的一个标准基。

注：与 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 对易的算符不一定与 $\boldsymbol{J}$ 对易（例如 J_z 本身），但是若这类算符构成了 CSCO，则 $J_\pm|k,j,m\rangle$ 不一定是 A 的本征矢，因此选择算符时必须满足“与 $\boldsymbol{J}$ （的三个分量都）对易”这一条件。

2.3.2 子空间 $\mathscr{E}(k,j)$

上一节里可以将 $\mathscr{E}$ 看作全体子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 的直和，即是说 $\mathscr{E}$ 中的任一矢量都可唯一地分解为一系列矢量之和，每个矢量属于不同的子空间。

但是这样的分解存在不方便之处：首先各个子空间的维数 $g(j)$ 不能实现知道，而是于具体物理系统有关。其次这些子空间在 $\boldsymbol{J}$ 的作用下不是不变的，因为按照定义，J_+ 和 J_- 在子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 的和 $\mathscr{E}(j,m\pm1)$ 的矢量之间的矩阵元非零。

为此引入另一类子空间，即在给定的 (k,j) 下由 m 不同的那些右矢 $|k,j,m\rangle$ 张成的子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 。回顾前面的表 -1，$\mathscr{E}(j,m)$ 是将其各行的 $g(j)$ 个矢量组合起来；而 $\mathscr{E}(k,j)$ 是将其各列的 $(2j+1)$ 个矢量组合。

于是 $\mathscr{E}$ 也可看作全体子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 的直和，它们的性质有：

1）子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 维数始终是 $(2j+1)$ ，无论物理系统如何。

2）子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 在 $\boldsymbol{J}$ 的作用下具有不变性，即将其在任一方向 $\boldsymbol{u}$ 上的分量 J_u ，或是其函数算符 $F(\boldsymbol{J})$ 作用于子空间中的任一矢量，得到的结果仍是其元素。

2.3.3 表示角动量算符的矩阵

在一个标准基中，$\boldsymbol{J}$ 在任一方向 $\boldsymbol{u}$ 上的分量 J_u ，或是其函数算符 $F(\boldsymbol{J})$ 的矩阵比较好求，因为使用子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 使得 $\boldsymbol{J}$ 的矩阵分块对角化。这使得在每个子空间内部，只需要计算其对应的那个分块即可，也就是某个有限阶的子矩阵。它在该子空间内，与整体矩阵的作用没有区别。

另一方面，每个这样的子矩阵都不依赖于 k 或者具体的物理系统，而仅依赖于 j 。根据

$$J_z|k,j,m\rangle = m\hbar|k,j,m\rangle$$
$$J_\pm|k,j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}|k,j,m\pm1\rangle$$

可知

$$\langle k,j,m|J_z|k',j',m'\rangle = m\hbar\delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{mm'}$$
$$\langle k,j,m|J_\pm|k',j',m'\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m'(m'\pm1)}\delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{m,m'\pm1}$$

这些式子表明，表示 $\boldsymbol{J}$ 的分量的那些矩阵元仅与 j 、m 有关，而与 k 无关。

因此无论什么情况下，为了求得一个标准基中的任意方向分量 J_u 的矩阵，只需对 j 的所有可能值一次算出所有的“普适”矩阵 $(J_u)^{(j)}$ ，这些矩阵在子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 内都表示 J_u 。对于一个具体的物理系统，首先确定其 j 可取的值，以及各个 $g(j)$ ；然后可以利用那些“普适”矩阵构成实际的 J_u 矩阵，它是分块对角的，对于每个 j 值，都有 $g(j)$ 个与 $(J_u)^{(j)}$ 全同的子块。

下面是 $(J_u)^{(j)}$ 的几个例子：

1） $j=0$

子空间 $\mathscr{E}(k,j=0)$ 都是一维的，因为只能取 $m=0$ 。因此各个 $(J_u)^{(j)}$ 都是数；且根据上面矩阵元的计算公式，它们都是 0 ；

2） $j=\frac{1}{2}$

子空间 $\mathscr{E}(k,j=\frac{1}{2})$ 都是二维的，$m=\pm\frac{1}{2}$ 。按照 $(m=\frac{1}{2},m=-\frac{1}{2})$ 的顺序取基矢，则

$$(J_z)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

$$(J_+)^{(1/2)} = \hbar\begin{bmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix} \quad (J_-)^{(1/2)} = \hbar\begin{bmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{bmatrix}$$

$$(J_x)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \quad (J_y)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}$$

$$(\boldsymbol{J}^2)^{(1/2)} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

第四章中的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统就是这里的一个特例。

3） $j=1$

子空间 $\mathscr{E}(k,j=1)$ 都是三维的，按照 $(m=1,m=0,m=-1)$ 的顺序取基矢，则

$$(J_z)^{(1)} = \hbar\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

$$(J_+)^{(1)} = \hbar \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (J_-)^{(1)} = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}$$

$$(J_x)^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (J_y)^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}$$

$$(\boldsymbol{J}^2)^{(1)} = 2\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

4）j 取任意值

根据 $J_\pm$ 矩阵元的计算公式可得

$$\begin{aligned}\langle k,j,m|J_x|k',j',m'\rangle =&\frac{\hbar}{2}\delta_{kk'}\delta_{jj'} \times \Big[\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\delta_{m,m'+1} \\ &+\sqrt{j(j+1)-m'(m'-1)}\delta_{m,m'-1}\Big] \\ \langle k,j,m|J_y|k',j',m'\rangle =&\frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\delta_{kk'}\delta_{jj'} \times \Big[\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\delta_{m,m'+1} \\ &-\sqrt{j(j+1)-m'(m'-1)}\delta_{m,m'-1}\Big] \\ \langle k,j,m|J_z|k',j',m'\rangle =&m\hbar\delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{mm'}\end{aligned}$$

可见只有矩阵 $(J_z)^{(j)}$ 是对角的，对角元分别是 $m\hbar$ 的 $(2j+1)$ 个值；而矩阵 $(J_x)^{(j)}$ 和 $(J_y)^{(j)}$ 中非零元则全部分布在主对角线的两侧，且 $(J_x)^{(j)}$ 是实对称阵，$(J_y)^{(j)}$ 是纯虚共轭对称阵。

另一方面，各个右矢 $|k,j,m\rangle$ 都是 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征矢，于是

$$\langle k,j,m|\boldsymbol{J}^2|k',j',m'\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

即其矩阵正比于 $(2j+1)\times(2j+1)$ 单位阵，对角元均为 $j(j+1)\hbar^2$ 。

需要明确的是，物理上选择所谓“量子化轴”即 Oz 轴是完全任意的（空间各个方向等价），可以预料 $\boldsymbol{J}$ 在各个方向分量的本征值都应该相同（尽管本征矢不同）。一般而言，在一个确定的子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 内，$\boldsymbol{J}$ 在任意方向分量的本征值都是 $-j\hbar,(-j+1)\hbar,\cdots,(j-1)\hbar,j\hbar$ 对应的和 $\boldsymbol{J}^2$ 的共同本征矢是在 k 、j 固定条件下各个 $|k,j,m\rangle$ 的线性组合。

3 应用于轨道角动量

现在将角动量的普遍理论应用于无自旋粒子的轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 。

3.1 $\boldsymbol{L}^2$ 与 L_z 的本征值及本征函数

在 $\{|\boldsymbol{r}\rangle\}$ 表象中，采用直角坐标系，角动量 $\boldsymbol{L}$ 的三个分量可写作

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ L_y &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{aligned}$$

使用球坐标更方便，因为将会看到各个角动量算符只对变量 θ 、φ 起作用而对 r 不起作用。可得：

$$\begin{aligned} L_x &= \mathrm{i}\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_y &= \mathrm{i}\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned}$$

这些又可求得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L}^2 &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \\ L_+ &= \hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_- &= \hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \end{aligned}$$

于是在 $\{|\boldsymbol{r}\rangle\}$ 表象中的本征方程为：

$$\begin{cases} -\left(\dfrac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \dfrac{1}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi(r,\theta,\varphi) = l(l+1)\psi(r,\theta,\varphi) \\ -\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi) = m\psi(r,\theta,\varphi) \end{cases}$$

由于变量 r 未出现在任何微分算符中故无需考虑，于是可以写成

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\varphi) \\ L_z Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\varphi) \end{cases}$$

其中 $\psi_{l,m}(r,\theta,\varphi)=f(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$ ，$f(r)$ 是任意函数（作为上述本征方程的积分常数），因此在 (r,θ,φ) 的函数空间中，$\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 不构成一个 CSCO。

为了将 $\psi_{l,m}(r,\theta,\varphi)$ 归一化，通常会分别将两部分归一化：

$$\begin{cases}\displaystyle\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\sin\theta|Y_l^m(\theta,\varphi)|^2=1\\ \displaystyle\int_0^{\infty}r^2|f(r)|^2\mathrm{d}r=1\end{cases}$$

下面分析 l 、m 可取哪些值。首先

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_l^m(\theta,\varphi)=mY_l^m(\theta,\varphi)$$

表明解具有形式：

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}F_l^m(\theta)$$

而根据

$$Y_l^m(\theta,\varphi=0)=Y_l^m(\theta,\varphi=2\pi)$$

又可知

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}m2\pi}=1\Longrightarrow m=1,2,\cdots$$

之前的普遍理论表明 l 和 m 可能是整数或半整数；而这里可见**对于轨道角动量而言，m 只能是整数**。进而根据之前的关系可以推知，对于**轨道角动量而言，l 也只能是整数**。

将 l 固定于一个非负整数。根据普遍理论，

$$L_+Y_l^l(\theta,\varphi)=0$$

即

$$\begin{aligned}&\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}F_l^l(\theta)\\
=&\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}F_l^l(\theta)+\mathrm{i}\cot\theta F_l^l(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}\right)\\
=&\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}(l+1)\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}F_l^l(\theta)-l\cot\theta F_l^l(\theta)\right) \qquad\Longrightarrow\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-l\cot\theta\right)F_l^l(\theta)\\
=&\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}(l+1)\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-l\cot\theta\right)F_l^l(\theta)\\
=&0\end{aligned}$$

其解具有形式

$$F_l^l(\theta)=c_l(\sin\theta)^l$$

其中 c_l 是归一化常数。因此对于 l 的每一个可能的非负整数值，都存在**唯一**的归一化函数

$$Y_l^l(\theta,\varphi)=c_l(\sin\theta)^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}-l\leq m\leq l$$

它是 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 分别对应于 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $l\hbar$ 的共同本征函数。

进而，$\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 分别对应于 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$ 的共同本征函数由下式给出：

$$\begin{aligned}Y_l^m(\theta,\varphi)&=(L_-)^{l-m}Y_l^l(\theta,\varphi)\\&=\left[\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]^{l-m}c_l(\sin\theta)^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}\end{aligned}$$

当 $-l\leq m\leq l$ 时，它存在且唯一。

上面得到的这一系列函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ ，称为**球谐函数**。

3.2 球谐函数的性质

3.2.1 递推关系

根据普遍结果

$$L_\pm Y_l^m(\theta,\varphi)=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi)$$

于是代入算符表达式并注意到 $Y_l^m(\theta,\varphi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}F_l^m(\theta)$ 就有：

$$\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta}-m\cot\theta\right)Y_l^m(\theta,\varphi)=\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi)$$

3.2.2 正交归一关系和封闭性关系

根据本征方程确定的球谐函数只差一个常数因子。按照这样的规则选取：将 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 作为角变量 θ 和 φ 的函数进行正交归一化，即：

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta,\varphi)=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

此外，任何 θ 和 φ 的函数 $f(\theta,\varphi)$ 都可以按球谐函数展开

$$f(\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}c_{l,m}Y_l^m(\theta,\varphi)$$

其中

$$c_{l,m}=\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta Y_l^{m*}(\theta,\varphi)f(\theta,\varphi)$$

球谐函数在 θ 和 φ 的函数空间中构成一个正交归一基，其封闭性关系为

$$\begin{aligned}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}Y_l^m(\theta,\varphi)Y_l^{m*}(\theta',\varphi')&=\delta(\cos\theta-\cos\theta')\delta(\varphi-\varphi')\\&=\frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')\end{aligned}$$

（上式注意到积分元 $\sin\theta\mathrm{d}\theta=-\mathrm{d}(\cos\theta)$ ）。

3.2.3 宇称和复共轭

在球坐标系中，位矢关于坐标原点的对称变换 $\boldsymbol{r}\to-\boldsymbol{r}$ 为：

$$\begin{aligned}r&\to r\\\theta&\to\pi-\theta\\\varphi&\to\pi+\varphi\end{aligned}$$

容易证明在上述宇称变换下

$$Y_l^m(\pi-\theta,\pi+\varphi)=(-1)^lY_l^m(\theta,\varphi)$$

可见球谐函数具有确定的宇称，且与 m 无关，仅与 l 有关。l 为偶数时具有偶宇称，l 为奇数时具有奇宇称。

另一方面，在复共轭变换下，还有：

$$Y_l^{m*}(\theta,\varphi)=(-1)^mY_l^{-m}(\theta,\varphi)$$

可见复共轭仅与 m 有关。

3.3 一个无自旋粒子的波函数空间中的“标准基”

首先取无自旋粒子的波函数空间 $\mathcal{E}$ 的一个子空间 $\mathcal{E}(l,m=l)$ ，它是 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 分别对应于 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $l\hbar$ 的共同本征函数的空间。在该空间中选定任意一个正交归一基 $\{\psi_{k,l,l}(\boldsymbol{r})\}$ ；再将算符 L_- 迭次作用在其中每一个矢量上得到 $\{\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})\}$ ；对每一个 l 重复上述操作，就得到了 $\mathcal{E}$ 的一个“标准基”。

之前已经知道，本征方程只能确定 $\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})$ 对角变量 θ 、φ 的依赖关系，即球谐函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ ；而径向变量 r 的依赖关系则不能通过本征方程确定。因此将之分离变量：

$$\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})=R_{k,l,m}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$$

将 $L_\pm$ 对其作用，由于其微分算符不作用于 r 的函数，故

$$\begin{aligned}L_\pm\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})&=R_{k,l,m}(r)L_\pm Y_l^m(\theta,\varphi)\\&=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}R_{k,l,m}(r)Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi)\end{aligned}$$

而根据定义，又应该有

$$\begin{aligned}L_\pm\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})&=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\psi_{k,l,m\pm1}(\boldsymbol{r})\\&=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}R_{k,l,m\pm1}(r)Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi)\end{aligned}$$

比较可知，

$$R_{k,l,m\pm1}(r)=R_{k,l,m}(r)=R_{k,l}(r)$$

可见径向变量 r 的函数与 m 无关。从而**在一个无自旋粒子的波函数空间中构成一个“标准基”的函数一定具有下述形式：**

$$\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})=R_{k,l}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$$

它的正交归一关系为

$$\begin{aligned}&\int\mathrm{d}r^3\psi^*_{k,l,m}(\boldsymbol{r})\psi_{k',l',m'}(\boldsymbol{r})\\=&\int_0^\infty r^2\mathrm{d}rR^*_{k,l}(r)R^*_{k',l'}(r)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta,\varphi)\\=&\delta_{kk'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\end{aligned}$$

结合球谐函数的归一化式，可见径向函数的正交归一化式为：

$$\int_0^\infty r^2\mathrm{d}rR^*_{k,l}(r)R_{k',l}(r)=\delta_{kk'}$$

即对于同一个 l 值，但是 k 值不同的两个径向函数是正交的。

注意到式子左端的两个指标 l 是相同的。这是因为，这一正交关系的结果是来源于，在最初子空间 $\mathcal{E}(l,l)$ 的正交归一基的选取时，各个函数 $\psi_{k,l,l}(\boldsymbol{r})=R_{k,l}(r)Y_l^l(\theta,\varphi)$ 是正交归一的，因此上式左端的两个指标 l 应该是相同的；若 $l\neq l'$ ，则 $\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})$ 与 $\psi_{k',l',m'}(\boldsymbol{r})$ 由于依赖于角变量而总是正交的；这样积分

$$\int_0^\infty r^2\mathrm{d}rR^*_{k,l}(r)R_{k',l'}(r)$$

就可以具有任意值。

此外，一般而言，径向函数都与 l 有关。因为形如 $f(r)g(\theta,\varphi)$ 的函数在 $r=0$ 处连续所需的条件是 $g(\theta,\varphi)=\text{constant}$ ，或 $f(0)=0$ 。因此若要保证 $\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})$ 在 $r=0$ 处的的连续性，则径向函数在 $r=0$ 必须不为零，除了 $R_{k,l=0}(r)$ ，因为 $Y_0^0(\theta,\varphi)$ 是常数。同样若要保证 $\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})$ 在 $r=0$ 处一次或多次可导，那么得到的 $R_{k,l}(r)$ 相应条件将依赖于 l 值。

3.4 物理上的考虑

3.4.1 关于态 $|k,j,m\rangle$ 的讨论

讨论一个无自旋粒子，处于 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的共同本征态 $|k,j,m\rangle$ ，即粒子的角动量模方和在 Oz 轴上的投影具有确定值 $l(l+1)\hbar^2$ 、$m\hbar$ 。

现在希望测量其角动量在 Ox 轴、Oy 轴上的分量。由于 L_x 、L_y 都不与 L_z 对易，$|k,j,m\rangle$ 不是它们的本征态，因此这一测量不是确定的，而是概率性的。为描述之，需要求平均值和方均根偏差。

首先将算符表示为

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$
$$L_y = \frac{1}{2}(L_+ - L_-)$$

于是可以看出，$L_x|k,j,m\rangle$ 和 $L_y|k,j,m\rangle$ 都是 $|k,j,m\pm1\rangle$ 的线性组合，由此可知

$$\langle k,j,m|L_x|k,j,m\rangle = \langle k,j,m|L_y|k,j,m\rangle = 0$$

此外还有

$$\begin{aligned}\langle k,j,m|L_x^2|k,j,m\rangle &= \frac{1}{4}\langle k,j,m|(L_+^2 + L_-^2 + L_+L_- + L_-L_+)|k,j,m\rangle \\ &= \frac{1}{4}\langle k,j,m|(L_+L_- + L_-L_+)|k,j,m\rangle \\ &= \frac{1}{4}\langle k,j,m|2(\boldsymbol{L}^2 - L_z^2)|k,j,m\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1)-m^2\right]\end{aligned}$$

$$\langle k,j,m|L_y^2|k,j,m\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1)-m^2\right]$$

于是在态 $|k,j,m\rangle$ 中

$$\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$$

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\big[l(l+1) - m^2\big]}$$

直观理解这一物理图像，可以考虑如下的经典角动量 $\boldsymbol{\mathcal{L}}$ ：模长 $|\boldsymbol{\mathcal{L}}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ ，在 Oz 轴上的投影 $\mathcal{L}_z = |\boldsymbol{\mathcal{L}}|\cos\theta = m\hbar$ ；角变量 θ 固定，而 $\varPhi$ 是以取值于 $[0, 2\pi)$ 的随机变量。于是其他两个经典分量为：

$$\mathcal{L}_x = |\boldsymbol{\mathcal{L}}|\sin\theta\cos\varPhi = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2}\cos\varPhi$$
$$\mathcal{L}_y = |\boldsymbol{\mathcal{L}}|\sin\theta\sin\varPhi = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2}\sin\varPhi$$

于是

$$\begin{cases} \overline{\mathcal{L}_x} \propto \displaystyle\int_0^{2\pi} \cos\varPhi \mathrm{d}\varPhi = 0 \\ \overline{\mathcal{L}_y} \propto \displaystyle\int_0^{2\pi} \sin\varPhi \mathrm{d}\varPhi = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \overline{\mathcal{L}_x^2} = \dfrac{1}{2\pi}\hbar^2\big[l(l+1) - m^2\big]\displaystyle\int_0^{2\pi} \cos^2\varPhi \mathrm{d}\varPhi = \dfrac{\hbar^2}{2}\big[l(l+1) - m^2\big] \\ \overline{\mathcal{L}_y^2} = \dfrac{1}{2\pi}\hbar^2\big[l(l+1) - m^2\big]\displaystyle\int_0^{2\pi} \sin^2\varPhi \mathrm{d}\varPhi = \dfrac{\hbar^2}{2}\big[l(l+1) - m^2\big] \end{cases}$$

$$\begin{cases} \delta\mathcal{L}_x = \sqrt{\overline{\mathcal{L}_x^2} - \overline{\mathcal{L}_x}^2} = \sqrt{\overline{\mathcal{L}_x^2}} = \hbar\sqrt{\dfrac{1}{2}\big[l(l+1) - m^2\big]} \\ \delta\mathcal{L}_y = \sqrt{\overline{\mathcal{L}_y^2} - \overline{\mathcal{L}_y}^2} = \sqrt{\overline{\mathcal{L}_y^2}} = \hbar\sqrt{\dfrac{1}{2}\big[l(l+1) - m^2\big]} \end{cases}$$

可见同样可以将经典理论给出的结果理解为量子结果的平均效应。尽管如此，但是要注意，对易量子系统的单次测量，得到的结果也只能是各个本征值之一。

3.4.2 关于测量 $\boldsymbol{L}^2$ 与 L_z 的物理预言的计算

考虑一个粒子的波函数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ ，希望从它出发计算得到相应的测量结果。

用 $\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2, L_z}(l, m)$ 表示同时测量 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z ，得到结果分别是 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$ 的概率。将 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 在标准基中展开：

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_k \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} c_{k,l,m} R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

其展开系数为

$$\begin{aligned} c_{k,l,m} &= \int \mathrm{d}^3 r \psi_{k,l,m}^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \\ &= \int_0^{\infty} r^2 \mathrm{d}r R_{k,l}^*(r) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi)\psi(r, \theta, \varphi) \end{aligned}$$

于是

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m) = \sum_k |c_{k,l,m}|^2$$

与此类似，若只测量测量 $\boldsymbol{L}^2$ 得到结果是 $l(l+1)\hbar^2$ ，以及只测量 L_z 得到结果是 $m\hbar$ ，分别的概率为

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2}(l) = \sum_k \sum_{m=-l}^{l} |c_{k,l,m}|^2$$

$$\mathscr{P}_{L_z}(m) = \sum_k \sum_{l=|m|}^{\infty} |c_{k,l,m}|^2$$

由于算符 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 仅作用于 θ 和 φ ，因此改写一下展开式

$$\begin{aligned}\psi(r,\theta,\varphi) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left[\sum_k c_{k,l,m} R_{k,l}(r)\right] Y_l^m(\theta,\varphi) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} a_{l,m}(r) Y_l^m(\theta,\varphi)\end{aligned}$$

这相当于是把变量 r 看作参量，将波函数按照球谐函数展开了。于是

$$\int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r |a_{l,m}(r)|^2 = \sum_k |c_{k,l,m}|^2 = \mathcal{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m)$$

以及

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2}(l) = \sum_{m=-l}^{l} \int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r |a_{l,m}(r)|^2$$

$$\mathscr{P}_{L_z}(m) = \sum_{l=|m|}^{\infty} \int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r |a_{l,m}(r)|^2$$

类似地，由于算符 L_z 仅作用于 φ ，因此进一步利用

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} F_l^m(\theta) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}} Z_l^m(\theta)$$

（这里 $1/\sqrt{2\pi}$ 是为了使两部分都归一化）改写一下展开式

$$\begin{aligned}\psi(r,\theta,\varphi) &= \sum_{m=-l}^{l} \left[\sum_{l=0}^{\infty} a_{l,m}(r) Z_l^m(\theta)\right] \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_m b_m(r,\theta) \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\end{aligned}$$

这相当于是把变量 r 和 θ 都看作参量，将波函数按照傅里叶级数展开了。其中

$$b_m(r,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi} \psi(r,\theta,\varphi)$$

同时也有

$$a_{l,m}(r) = \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta Z_l^{m*}(\theta) b_m(r,\theta)$$

可见

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta |b_m(r,\theta)|^2 = \sum_l |a_{l,m}(r)|^2$$

于是

$$\mathscr{P}_{L_z}(m) = \int_0^{\infty} r^2 \mathrm{d}r \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta |b_m(r,\theta)|^2$$