利用对易关系求角动量算符的矩阵元

艾鑫

三峡大学　理学院

2016 年 1 月 3 日

目的与方法

目的 求 J_x, J_y, J_z 和 J^2 算符在 J^2, J_z 共同表象的矩阵元

方法 通过角动量算符的对易关系来讨论其本征值问题

经典力学中的角动量

在经典力学中, 角动量的定义为

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} \tag{1}$$

展开为

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x \tag{2}$$

在量子力学中只需将动量换成动量算符, 即为轨道角动量的定义

角动量的一般定义

角动量的一般定义是通过对易关系定义的

$$\boldsymbol{J} \times \boldsymbol{J} = i\hbar \boldsymbol{J} \tag{3}$$

展开为

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y \tag{4}$$

角动量平方算符

由于 J_x, J_y, J_z 相互之间不对易, 因此没有共同的本征态. 而角动量平方算符

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{5}$$

却与 J_x, J_y, J_z 都对易, 即

$$[J^2, J_x] = 0, \quad [J^2, J_y] = 0, \quad [J^2, J_z] = 0 \tag{6}$$

我们可以找到 J^2 和 J_z 的共同的本征态 $|\psi\rangle$:

$$J^2 |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle, J_z |\psi\rangle = \mu |\psi\rangle. \tag{7}$$

升降算符

定义升降算符

$$J_\pm \equiv J_x \pm iJ_y \tag{8}$$

升降算符有下列性质:

- ${J_\pm}^\dagger = J_\mp$
- $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$
- $\left[J_\pm, J^2\right] = 0$
- $[J_\pm, J_z] = \mp\hbar J_\pm$
- $J_\pm J_\mp = J^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z$

升降算符

如果 $|\psi\rangle$ 是 J^2 和 J_z 的共同本征态, 那么 $L_\pm|\psi\rangle$ 也是它们的本征态.

$$J^2(J_\pm|\psi\rangle) = J_\pm(J^2|\psi\rangle) = J_\pm(\lambda|\psi\rangle) = \lambda(J_\pm|\psi\rangle) \tag{9}$$

$$\begin{aligned} J_z(L_\pm|\psi\rangle) &= (J_zJ_\pm - J_\pm J_z)|\psi\rangle + J_\pm J_z|\psi\rangle \\ &= \pm\hbar J_\pm|\psi\rangle + J_\pm(\mu|\psi\rangle) \\ &= (\mu\pm\hbar)(J_\pm|\psi\rangle) \end{aligned} \tag{10}$$

由上式可知, J^2 的本征值不变, J_z 的本征值加 (减) 一个 $\hbar$

升降算符

对于给定的 λ, 不断的施加一个升算符, J_z 的本征值将不断增加. 但是增加到一程度就会到顶, 我们令这个态为 $|\psi_t\rangle$, 有

$$J_+ |\psi_t\rangle = 0 \tag{11}$$

设此时 J_z 的本征值为 $\hbar j$:

$$J_z |\psi_t\rangle = \hbar j |\psi_t\rangle \, , \quad J^2 |\psi_t\rangle = \lambda |\psi_t\rangle \tag{12}$$

升降算符

现在有

$$
\begin{aligned}
J_\pm J_\mp = (J_x \pm iJ_y)(J_x \mp iJ_y) &= J_x^2 + J_y^2 \mp i(J_xJ_y - J_yJ_x) \\
&= J^2 - J_z^2 \mp i(i\hbar J_z)
\end{aligned}
\tag{13}
$$

移项后有

$$
J^2 = J_\pm J_\mp + J_z^2 \mp \hbar J_z \tag{14}
$$

因此有

$$
\begin{aligned}
J^2 |\psi_t\rangle &= (J_- J_+ + J_z^2 + \hbar J_z) |\psi_t\rangle \\
&= (0 + \hbar^2 j^2 + \hbar^2 j) |\psi_t\rangle \\
&= \hbar^2 j(j+1) |\psi_t\rangle
\end{aligned}
\tag{15}
$$

升降算符

由本征值方程 $J^2 |\psi_t\rangle = \lambda |\psi_t\rangle$ 得

$$\lambda = \hbar^2 j(j+1) \tag{16}$$

这告诉了我们 J^2 的特征值 λ 与 J_z 的最大特征值 $j\hbar$ 的关系

降算符

同样的道理, 对于降算符也有对应的最低的态 $|\psi_b\rangle$ 有

$$J_- |\psi_b\rangle = 0 \tag{17}$$

类似地, 我们令 J_z 对应的本征值为 $\hbar\bar{j}$:

$$J_z |\psi_b\rangle = \hbar\bar{j} |\psi_b\rangle, \quad J^2 |\psi_b\rangle = \lambda |\psi_b\rangle \tag{18}$$

同样利用(13), 我们有

$$\begin{aligned} J^2 |\psi_b\rangle &= (J_+ J_- + J_z^2 - \hbar J_z) |\psi_b\rangle \\ &= (0 + \hbar^2\bar{j}^2 - \hbar^2\bar{j}) |\psi_b\rangle \\ &= \hbar^2\bar{j}(\bar{j} - 1) |\psi_b\rangle \end{aligned} \tag{19}$$

比较 $\lambda = \hbar^2 j(j+1)$ 和 $\lambda = \hbar^2 \bar{j}(\bar{j}-1)$ 有

$$j(j+1) = \hbar j(\bar{j}+1) \tag{20}$$

要么 $\bar{j} = j+1$, 要么 $\bar{j} = -j$. 前面一种情况是不合理的, 故

$$\bar{j} = -j \tag{21}$$

设 J_z 的特征值为 $m\hbar$, 其中

$$m = -j, -j+1, \cdots, j-1, j \tag{22}$$

因此, $j = -j + N$, N 为某个整数, 所以 $j = N/2$, 即 j 要么是整数, 要么是半整数:

$$j = 0, 1/2, 1, 3/2, \cdots \tag{23}$$

因此我们可以用 j, m 来刻画本征态:

$$J^2 \left| j, m \right\rangle = \hbar^2 j(j+1) \left| j, m \right\rangle, \quad J_z \left| j, m \right\rangle = \hbar m \left| j, m \right\rangle \tag{24}$$

矩阵元

以 $|j,m\rangle$ 为基矢的表象为 J^2 和 J_z 的共同表象. 在此表象中, J^2 和 J_z 是对角矩阵, 矩阵元分别为

$$\langle j',m'|J^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \tag{25}$$

$$\langle j',m'|J_z|j,m\rangle = m\hbar\delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \tag{26}$$

下面我们来求 $J_\pm$ 的矩阵元. 设

$$J_\pm\,|j,m\rangle = C_\pm(j,m)\hbar\,|j,m\pm 1\rangle \tag{27}$$

上式中 $C_\pm(j,m)$ 为待定系数. 下面来求 $C_\pm(j,m)$. 取上式的厄米共轭, 有

$$\langle j,m|\,J_\pm^\dagger = \langle j,m|\,J_\mp = \langle j,m\pm 1|\,{C_\pm}^*\hbar \tag{28}$$

$$\langle j,m|J_\mp J_\pm|j,m\rangle = {C_\pm}^*(j,m)\,C_\pm(j,m)\hbar^2\,\langle j,m\pm 1|j,m\pm 1\rangle \tag{29}$$

矩阵元

利用归一化条件 $\langle j, m \pm 1 | j, m \pm 1 \rangle = 1$ 以及 $J_{\mp} J_{\pm} = J^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z$ 有

$$
\begin{aligned}
|C_{\pm}(j,m)|^2 \hbar^2 &= \langle j, m | J^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z | j, m \rangle \\
&= [j(j+1) - m^2 \mp m] \hbar^2 \langle j, m | j, m \rangle \qquad (30) \\
&= (j \mp m)(j \pm m + 1) \hbar^2
\end{aligned}
$$

$$C_{\pm}(j,m) = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \tag{31}$$

故

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar |j, m \pm 1\rangle \tag{32}$$

矩阵元为

$$\langle j', m' | J_{+} | j, m \rangle = \sqrt{(j - m)(j + m + 1)} \hbar \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \tag{33}$$

$$\langle j', m' | J_{-} | j, m \rangle = \sqrt{(j + m)(j - m + 1)} \hbar \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \tag{34}$$

J_x 和 J_y 的矩阵元

$$
\begin{aligned}
J_x |j,m\rangle &= \frac{1}{2}(J_+ + J_-)|j,m\rangle \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar |j,m+1\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar |j,m-1\rangle
\end{aligned} \tag{35}
$$

$$
\begin{aligned}
J_y |j,m\rangle &= \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)|j,m\rangle \\
&= \frac{1}{2i}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar |j,m+1\rangle \\
&\quad - \frac{1}{2i}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar |j,m-1\rangle
\end{aligned} \tag{36}
$$

J_x 和 J_y 的矩阵元

$$\begin{aligned}\langle j', m'| J_x |j, m\rangle = &\frac{1}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar\delta_{j,j'}\delta_{m+1,m'} \\ &+ \frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\delta_{j,j'}\delta_{m-1,m'}\end{aligned} \tag{37}$$

$$\begin{aligned}\langle j', m'| J_y |j, m\rangle = &\frac{1}{2i}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar\delta_{j,j'}\delta_{m+1,m'} \\ &- \frac{1}{2i}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\delta_{j,j'}\delta_{m-1,m'}\end{aligned} \tag{38}$$