第九章　本征值问题的代数方法 v.s.第三章 一维势场中的粒子

§9.1　线性谐振子的阶梯算符方法

9.1.1 线性谐振子的代数解法　阶梯算符　和第三章的推导对比学习

现在我们介绍求解谐振子能量本征方程的代数方法，采用 Dirac 符号进行分析和推导。

线性谐振子的 Hamiltonian 是（这里不涉及采用什么表示）

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.$$

令

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}\right),$$

算符的因式分解

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}\right),$$

（由于 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 是厄密算符，所以 $\hat{a}^\dagger$ 确实是 $\hat{a}$ 的厄密共轭），那么由 $[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$ 就不难发现

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \equiv \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1.$$

反过来说，

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger),$$

$$\hat{p} = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger),$$

把它们代入上面的 Hamiltonian，可以把它重新表为

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

在所谓“二次量子化”的形式中，常记

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a},$$

并且称之为**粒子数算符**，所以

$$\hat{H} = \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

我们还发现：

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger,$$

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a}.$$

记算符 $\hat{N}$ 的本征方程为

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle,$$

由于 $\hat{N}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger$，$\hat{N}\hat{a} = \hat{a}\hat{N} - \hat{a}$，把它们作用于 $|n\rangle$ 就得到

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle,$$

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle,$$

这就是说

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle,$$

$$\hat{a}|n\rangle \propto |n-1\rangle.$$

所以 $\hat{a}^\dagger$ 称为粒子的**产生算符**，$\hat{a}$ 称为粒子的**湮灭算符**。在谐振子能量本征态的意义上，$\hat{a}^\dagger$ 和 $\hat{a}$ 则分别

称为**升级算符**和**降级算符**，合称为**阶梯算符**。

前面已经发现：n 的允许值系列必是公差为 1 的等差数列。由于对任何态 $|\psi\rangle$ 有

$$\langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|\psi\rangle=\langle\psi'|\psi'\rangle\geq 0,\quad \left(|\psi'\rangle\equiv\hat{a}|\psi\rangle\right)$$

所以

$$n\geq 0,$$

因此必存在最小本征值 n_0，满足

$$\hat{a}|n_0\rangle=0,$$

也就是说

$$\hat{N}|n_0\rangle=0,$$

这就导致

$$n_0=0,$$

所以 $\hat{N}$ 的本征值系列是

$$n=0,1,2,\cdots$$

而最小本征值态（基态）是 $|0\rangle$。设

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle=c_n|n+1\rangle,$$

那么

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle=|c_n|^2\langle n+1|n+1\rangle=|c_n|^2=\langle n|(\hat{N}+1)|n\rangle=n+1,$$

所以可取

$$c_n=\sqrt{n+1},$$

因而

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle,\ \text{或者}\ |n+1\rangle=\frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle\,(n=0,1,2,\cdots).$$

类似地可得

$$\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle,\ \text{或者}\ |n-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}|n\rangle\,(n=1,2,3,\cdots).$$

然后利用数学归纳法就不难证明

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^n|0\rangle.$$

而 $\hat{H}$ 的本征方程的解就是

$$\hat{H}|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle.$$

所以线性谐振子的能谱是

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

这和第三章中得到的能谱完全相同。

9.1.2 坐标表象中的波函数

现在考虑坐标表象（$\hat{x}=x,\ \hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\partial_x$）。就像第三章中所做的那样，引入

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\equiv\alpha x,$$

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.$$

则 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^{+}$ 变为

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right),$$

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}+\mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}\right),$$

$$\hat{a}^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}-\mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}\right),$$

$$\hat{a}^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right).$$

记基态$\left|0\right\rangle$的波函数为$\psi_0(\xi)$，那么它必须满足

$$\hat{a}\,\psi_0(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\psi_0(\xi)=0,$$

这个方程的解不难求出为

$$\psi_0(\xi)=N_0\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2},$$

其中N_0是归一化常数，使$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_0(x)|^2\,dx=1$，计算得到

$$N_0=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}},\quad\left(\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

所以最后得

$$\psi_0(\xi)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2}.\quad\left(\xi=\alpha x=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

这和我们在第三章中得到的结果完全相同。依前所述还可以得到$\psi_n(\xi)$：

$$\psi_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{+})^n\psi_0(\xi)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)^n\mathrm{e}^{-\xi^2/2}.$$

表面上看来，它和我们在第三章中得到的结果不完全一样。第三章中得到的$\psi_n(\xi)$是

$$\psi_n(\xi)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}}H_n(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2},$$

其中的 Hermite 多项式$H_n(\xi)$是

$$H_n(\xi)=(-1)^n\,\mathrm{e}^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2},$$

而这里得到的结果等于说是用

$$\tilde{H}_n(\xi)=\mathrm{e}^{\xi^2/2}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)^n\mathrm{e}^{-\xi^2/2},$$

代替了$H_n(\xi)$。但我们可以证明：实际上$\tilde{H}_n(\xi)$和$H_n(\xi)$是完全恒等的（这留给读者作为练习题）。

从上面的过程不难发现，阶梯算符方法的优越性在于：第一，它可以完全不涉及任何表象而得到关于能谱的确定结论；第二，即使我们需要知道坐标表象中的具体的波函数，也只需要求解一个简单的一阶微分方程，而不是比较复杂的二阶微分方程。这些优越性使得阶梯算符方法还被应用在许多其它的问题上，并且以此为基础发展了所谓“超对称量子力学”，成为解决量子力学问题的有力工具。

*9.1.3 关于自然单位制

在上面的推导过程中我们发现，用$\xi=\sqrt{m\omega/\hbar}\,x$来代替$x$是非常方便的（$\xi$是无量纲的），类似地可以用$\sqrt{1/m\hbar\omega}\,p$代替$p$，用$(1/\hbar\omega)E$代替$E$。这使我们想到一个更“根本”的解决办法，就是取

$$m=\hbar=\omega=1,$$

这样的话x, p, E就直接变成无量纲的了。这就是所谓的“自然单位制”。当然，$m,\hbar,\omega$是确定的物理常数，我们不能“让”它们$=1$，所以，这样做只是意味着分别用$\sqrt{\hbar/m\omega},\sqrt{m\hbar\omega},\hbar\omega$作为$x, p, E$的单位。当我们用自然单位制完成了全部的理论分析以后，还要转换回普通的单位制，也就是再把x用$\sqrt{m\omega/\hbar}\,x$代替，等等。实际上，在自然单位制下，不仅仅x, p, E成为无量纲的，而且所有的物理量都成为无量纲的。这时候，任何物理量在自然单位制中的单位，就是用$m^{k_1}\hbar^{k_2}\omega^{k_3}$这种形式构造出的与该

物理量的量纲相同的那个常数，例如时间的单位是$1/\omega$，速度的单位是$\sqrt{\hbar\omega/m}$，等等。在原子物理中也有类似的做法，就是取

$$m_{\mathrm{e}}=\hbar=k_1e^2=1,$$

（假如原先我们采用的是 SI），这称为“原子单位制”。

在自然单位制下，我们可以更直观地理解阶梯算符方法的实质。这时，线性谐振子的 Hamiltonian 变成了

$$\hat{H}=\frac{1}{2}(\hat{x}^2+\hat{p}^2).$$

如果x, p是普通的实变量，这个式子显然有下面的因式分解表达式：

$$\frac{1}{2}(x^2+p^2)=\frac{1}{\sqrt{2}}(x+\mathrm{i}p)\frac{1}{\sqrt{2}}(x-\mathrm{i}p)=\frac{1}{\sqrt{2}}(x-\mathrm{i}p)\frac{1}{\sqrt{2}}(x+\mathrm{i}p),$$

或者，定义

$$a_+=\frac{1}{\sqrt{2}}(x+\mathrm{i}p),\quad a_-=\frac{1}{\sqrt{2}}(x-\mathrm{i}p),$$

则有

$$\frac{1}{2}(x^2+p^2)=a_+a_-=a_-a_+.$$

可是实际上现在$\hat{x}$, $\hat{p}$是彼此不对易的算符，所以右方的两个式子并不相等。但这也没有什么难的：用它们的平均来代替就行了。所以对于算符，我们有

$$\hat{H}=\frac{1}{2}(\hat{x}^2+\hat{p}^2)=\frac{1}{2}(\hat{a}\hat{a}^++\hat{a}^+\hat{a}),$$

其中

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}+\mathrm{i}\hat{p}),\quad \hat{a}^+=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}-\mathrm{i}\hat{p}),$$

它们正是在自然单位制下的湮灭/产生算符。由此可见，阶梯算符方法的实质是算符的**因式分解**。从这个角度，我们能够很容易地理解其它问题中的阶梯算符方法，并且也不难看出在什么情况下这个方法能够发挥其特殊的优越性。

*9.1.4 相干态和压缩态

在量子光学里是把上面的做法反过来的（以下省去算符顶上的∧符号）。考虑给定频率的激光束。记$a/a^\dagger$为光子的湮灭/产生算符，$N=a^\dagger a$是光子数算符，$|n\rangle$ $(n=0,1,2,\cdots)$是N的本征态，通常在形式上仍然记$x=(a+a^\dagger)/\sqrt{2}$, $p=(a-a^\dagger)/\sqrt{2}\,\mathrm{i}$。由于在光与物质相互作用的过程中光子数并不守恒，所以激光束通常不是N的本征态。恰恰相反，我们可以假设它处于相干态 (coherent state)。相干态$|\alpha\rangle$定义为湮灭算符的本征态（但本征值α是复数而不是实数），也就是满足

$$a|\alpha\rangle=\alpha|\alpha\rangle,\ (\alpha\in\mathbb{C});\qquad \langle\alpha|\alpha\rangle=1.$$

读者不妨试着回答下面的问题。

(1) 求证：

$$|\alpha\rangle=\mathrm{e}^{-\alpha^*\alpha/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle,$$

并且态$|\alpha\rangle$的平均光子数为$\langle N\rangle=|\alpha|^2=\alpha^*\alpha$，光子数的均方根涨落为$\Delta N\equiv\sqrt{\langle N^2\rangle-\langle N\rangle^2}=\sqrt{\langle N\rangle}$，态$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$的内积为$\langle\beta|\alpha\rangle=\mathrm{e}^{-(\alpha^*\alpha+\beta^*\beta-2\beta^*\alpha)/2}$。

(2) 求证：对于态$|\alpha\rangle$有

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=\langle(\Delta p)^2\rangle=1/2,$$

因而$|\alpha\rangle$是最小测不准态。

(3) 求证：

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| \mathrm{d}^2\alpha = 2\pi I, \qquad (\mathrm{d}^2\alpha \equiv \mathrm{d}\alpha^*\mathrm{d}\alpha = 2\,\mathrm{d}(\mathrm{Re}\,\alpha)\mathrm{d}(\mathrm{Im}\,\alpha))$$

I 是单位算符。这称为$\{|\alpha\rangle\}$的"过完备性"(over-completeness)。

(4) 求证：算符$D(\alpha) = \mathrm{e}^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}$（称为$a$的平移算符）满足：

$$D^{-1}(\alpha)\, a\, D(\alpha) = a + \alpha,$$
$$D(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle,$$
$$D(\alpha)D(\beta) = \mathrm{e}^{(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta)/2} D(\alpha+\beta).$$

提示：利用 Baker-Campbell-Hausdorff-Feynman 公式

$$\mathrm{e}^A \mathrm{e}^B = \exp\big(A + B + [A,B]/2 + [A,[A,B]]/12 + [[A,B],B]/12 + \cdots\big),$$

以及公式

$$\mathrm{e}^A B\, \mathrm{e}^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \cdots + \frac{1}{n!}[A,[A,\cdots[A,B]\cdots]] + \cdots.$$

(5) 设$\hat{H} = (p^2 + x^2)/2$，求证：含时间 Schrödinger 方程$\mathrm{i}\,\partial_t |\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$满足初条件$|\psi\rangle\big|_{t=0} = |\alpha\rangle$的解是

$$|\psi\rangle(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t/2}\left|\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t}\right\rangle,$$

其中$\left|\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t}\right\rangle$就是$a$的本征值$=\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t}$的相干态。若$\alpha = \rho\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$，那么这时候"坐标"和"动量"的平均值随时间的变化是

$$\langle x\rangle(t) = \sqrt{2}\rho\cos(t-\varphi), \qquad \langle p\rangle(t) = -\sqrt{2}\rho\sin(t-\varphi),$$

它们正是一个经典谐振子的运动方程。

由于相干态具有以上的特点，人们常说：相干态是最接近经典运动状态的量子状态。

(6) $a, a^\dagger$ 的变换

$$\begin{aligned} a(\eta) &= a\cosh\eta + a^\dagger\sinh\eta, \\ a^\dagger(\eta) &= a^\dagger\cosh\eta + a\sinh\eta, \end{aligned} \qquad (-\infty < \eta < +\infty)$$

称为 Bogoliubov 变换。求证：

$$[a(\eta), a^\dagger(\eta)] = 1,$$

即$a^\dagger(\eta)/a(\eta)$也是产生/湮灭算符。设态$|\alpha\rangle_\eta$满足

$$a(\eta)|\alpha\rangle_\eta = \alpha|\alpha\rangle_\eta,$$

求证：

$$|\alpha\rangle_\eta = \mathrm{e}^{\eta(a^2 - (a^+)^2)/2}|\alpha\rangle,$$

并且对于这个态，

$$\langle x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \alpha^*)\mathrm{e}^{-\eta}, \qquad \langle x^2\rangle = \frac{1}{2}\big((\alpha+\alpha^*)^2 + 1\big)\mathrm{e}^{-2\eta},$$

因此

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-2\eta},$$

类似地可得

$$\langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{2\eta}.$$

所以它被称为"压缩态"(squeezed state)。

§9.2 角动量的本征值和本征态

9.2.1 角动量的一般定义

我们知道，轨道角动量算符 $\hat{\vec{L}}$ 的各个分量 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 满足对易关系

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \mathrm{i}\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = \mathrm{i}\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = \mathrm{i}\hbar \hat{L}_y,$$

或者写为

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = \mathrm{i}\hbar\, \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k, \quad (i, j, k = 1, 2, 3 = x, y, z)$$

其中 ε_{ijk} 是三阶完全反对称单位张量，它对于 i, j, k 是完全反对称的并且 $\varepsilon_{123} = 1$，因此非零元素只有

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = -\varepsilon_{321} = -\varepsilon_{213} = -\varepsilon_{132} = 1.$$

这些对易关系是 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 的定义以及坐标与动量之间的对易关系的结果。但是，现在我们把它们推广为量子力学中的一般角动量应该满足的对易关系，也就是说，我们假设：若 $\hat{\vec{J}}$ 是一个角动量算符，那么它的各个分量算符 $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ 就要满足

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \mathrm{i}\hbar\, \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k.$$

这可以看作是量子力学的**角动量的一般定义**。由此还不难证明

$$[J^2, \hat{J}_i] = 0, \quad J^2 \equiv \hat{J}_x^{\,2} + \hat{J}_y^{\,2} + \hat{J}_z^{\,2}, \ i = x, y, z.$$

所以，角动量的本征态并不是 $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ 的同时本征态，而是 **J^2 和 $\hat{J}_z$ 的同时本征态**。采用 Dirac 符号，J^2 和 $\hat{J}_z$ 的同时本征方程是

$$\boxed{\begin{aligned} J^2 |\eta, m\rangle &= \eta\hbar^2 |\eta, m\rangle, \\ \hat{J}_z |\eta, m\rangle &= m\hbar |\eta, m\rangle, \end{aligned}}$$

其中 $|\eta, m\rangle$ 就是 J^2 和 $\hat{J}_z$ 的同时本征态。注意，在 Dirac 符号的形式下，我们只是说存在满足角动量的对易关系的力学量和它们的本征态，但是并不需要把它们写成任何具体的形式。

9.2.2 角动量的阶梯算符

现在我们引进如下的阶梯算符：

$$\hat{J}_\pm \equiv \hat{J}_x \pm \mathrm{i}\hat{J}_y, \quad (\hat{J}_\pm)^\dagger = \hat{J}_\mp,$$

那么不难证明

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar \hat{J}_\pm,$$

这是因为

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = [\hat{J}_z, \hat{J}_x] \pm \mathrm{i}[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = \mathrm{i}\hbar \hat{J}_y \pm \mathrm{i}(-\mathrm{i}\hbar \hat{J}_x) = \pm\hbar(\hat{J}_x \pm \mathrm{i}\hat{J}_y) = \pm\hbar \hat{J}_\pm,$$

还有

$$[J^2, \hat{J}_\pm] \equiv J^2 \hat{J}_\pm - \hat{J}_\pm J^2 = 0.$$

把这两个式子作用于 $|\eta, m\rangle$，我们发现

$$\hat{J}_z\left(\hat{J}_\pm |\eta, m\rangle\right) = \hat{J}_\pm\left(\hat{J}_z |\eta, m\rangle\right) \pm \hbar\left(\hat{J}_\pm |\eta, m\rangle\right) = (m \pm 1)\hbar\left(\hat{J}_\pm |\eta, m\rangle\right),$$

$$J^2\left(\hat{J}_\pm |\eta, m\rangle\right) = \hat{J}_\pm\left(J^2 |\eta, m\rangle\right) = \eta\hbar^2\left(\hat{J}_\pm |\eta, m\rangle\right),$$

这意味着

$$\hat{J}_\pm |\eta, m\rangle \propto |\eta, m \pm 1\rangle,$$

所以 $\hat{J}_+$ 是 $\hat{J}_z$ 的**上升算符**，$\hat{J}_-$ 是 $\hat{J}_z$ 的**下降算符**，而且 $\hat{J}_z$ 的本征值上升和下降的公差都是 $\hbar$，但是它们都不改变 J^2 的本征值。$\hat{J}_+$ 和 $\hat{J}_-$ 的对易关系是

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z,$$

这是因为

$$[\hat J_+,\hat J_-]=[\hat J_x+\mathrm{i}\hat J_y,\hat J_x-\mathrm{i}\hat J_y]=-\mathrm{i}[\hat J_x,\hat J_y]+\mathrm{i}[\hat J_y,\hat J_x]=2\hbar\hat J_z,$$

所以把 $J^2\equiv\hat J_x^{\,2}+\hat J_y^{\,2}+\hat J_z^{\,2}$ 用 $\hat J_+,\hat J_-,\hat J_z$ 来表达的式子是

$$J^2=\frac{\hat J_+\hat J_-+\hat J_-\hat J_+}{2}+\hat J_z^{\,2}=\hat J_-\hat J_++\hat J_z^{\,2}+\hbar\hat J_z=\hat J_+\hat J_-+\hat J_z^{\,2}-\hbar\hat J_z.$$

如果注意 $J^2-\hat J_z^{\,2}=\hat J_x^{\,2}+\hat J_y^{\,2}$，那么 $\hat J_\pm=\hat J_x\pm\mathrm{i}\hat J_y$ 正是它的因子算符。

9.2.3 J^2 和 $\hat J_z$ 的本征值

在给定的η值之下，m 的可能值一定是有界的。我们把给定η值以后m **的最大值**记为 j，对应于m 取这个值的本征态是$|\eta,j\rangle$，那么就有

$$\hat J_z|\eta,j\rangle=j\hbar|\eta,j\rangle,$$
$$\hat J_+|\eta,j\rangle=0,$$

所以

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

和 $J^2|\eta,m\rangle=\eta\hbar^2|\eta,m\rangle$ 比较，我们发现这给出了

$$\eta=j(j+1).$$

另一方面，若m的最大值是 j，则它的最小值一定是$-j$，并且

$$j-(-j)=2j=\text{非负整数},$$

所以我们得到如下的结论：J^2 和 $\hat J_z$ 的本征值系列是

$$J^2\ \text{的本征值为}\ j(j+1)\hbar^2,\quad j=0,\frac12,1,\frac32,2,\cdots,$$
$$\hat J_z\ \text{的本征值为}\ m\hbar,\qquad m=j,j-1,\cdots,-j.$$

以后它们的同时本征态就记为$|j,m\rangle$，即$|j,m\rangle$满足

$$J^2|j,m\rangle=j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle,$$
$$\hat J_z|j,m\rangle=m\hbar|j,m\rangle.$$

我们发现，前面通过求解微分方程的方法得到的轨道角动量的本征值系列包括在了这个系列之中（$j=0,1,2,\cdots$），但是这个系列里也包括了另外的角动量本征值（$j=1/2,3/2,5/2,\cdots$）。以后我们将会看到，电子的自旋角动量就是 $j=1/2$ 的情形。所以，上面的分析导致了普遍的结论。

9.2.4 角动量的本征态

设

$$\hat J_\pm|j,m\rangle=c_\pm|j,m\pm1\rangle,$$

那么

$$\langle j,m|\hat J_\mp\hat J_\pm|j,m\rangle=|c_\pm|^2=\langle j,m|J^2-\hat J_z^{\,2}\mp\hbar\hat J_z|j,m\rangle=\big(j(j+1)-m(m\pm1)\big)\hbar^2,$$

通常约定

$$c_\pm=\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,\hbar=\sqrt{(j\pm m+1)(j\mp m)}\,\hbar,$$

所以

$$\hat J_\pm|j,m\rangle=\sqrt{(j\pm m+1)(j\mp m)}\,\hbar|j,m\pm1\rangle,$$

因此，用 $\hat J_-$ 不断地作用于$|j,j\rangle$并乘以适当的系数就可以得到其他的$|j,m\rangle$ $(m=j-1,\cdots,-j)$

$$|j,j-k\rangle=\sqrt{\frac{(2j-k)!}{k!(2j)!}}\left(\frac{\hat J_-}{\hbar}\right)^k|j,j\rangle.\quad(0\le k\le 2j)$$

由此还得到：在 $J^2, \hat{J}_z$ 的表象中，$\hat{J}_\pm$ 的非零矩阵元是

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

所以 $\hat{J}_x = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$ 的非零矩阵元是

$$\langle j, m+1 | \hat{J}_x | j, m\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,\hbar,$$

$$\langle j, m-1 | \hat{J}_x | j, m\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\,\hbar,$$

它们都是实的，$\hat{J}_y = (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)/2\mathrm{i}$ 的非零矩阵元是

$$\langle j, m+1 | \hat{J}_y | j, m\rangle = \frac{-\mathrm{i}}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,\hbar,$$

$$\langle j, m-1 | \hat{J}_y | j, m\rangle = \frac{\mathrm{i}}{2}\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\,\hbar,$$

它们都是纯虚的。

*9.2.5 球谐函数的代数生成法

把 $\hat{\vec{J}}$ 具体化为轨道角动量 $\hat{\vec{L}}(\theta, \varphi)$，那么

$$\hat{L}_x = \mathrm{i}\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_y = -\mathrm{i}\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi},$$

所以

$$\hat{L}_+ = \hbar\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_- = \hbar\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

$m = l$ 的本征函数 $Y_{ll}(\theta,\varphi)$ 具有形式

$$Y_{ll}(\theta,\varphi) = P_l(\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi},$$

并满足

$$\hat{L}_+ Y_{ll} = 0,$$

代入 $\hat{L}_+$ 和 $Y_{ll}(\theta,\varphi)$ 就发现 $P_l(\theta)$ 满足

$$\frac{dP_l}{d\theta} = l\cot\theta\, P_l(\theta),$$

它的解是

$$P_l(\theta) \propto \sin^l\theta,$$

完成波函数的归一化就得到

$$Y_{ll}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2\pi}}\,\frac{1}{2^l\, l!}\sin^l\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}.$$

如前所述，再用 $\hat{L}_-$ 不断地作用于 $Y_{ll}(\theta,\varphi)$ 就能得到其余的 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$。不难证明：这样得到的 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 和我们前面得到的球谐函数完全相同（证明从略）。

§9.3 角动量的合成

9.3.1 角动量合成的一般规则

我们在很多情况下会遇到角动量合成（即相加）的问题。在本节，我们只注意角动量合成的一般规律，而不注意那些角动量的具体物理背景，所以我们将采用 Dirac 符号。

设 $\hat{\vec{J}}_1$ 和 $\hat{\vec{J}}_2$ 是两个**互相独立的角动量**，这意思是，它们的分量分别满足角动量的对易关系，而它们互相之间是对易的：

$$[\hat{J}_{1i},\hat{J}_{2k}]=0,\quad (i,k=x,y,z).$$

$\hat{\vec{J}}_1$ 和 $\hat{\vec{J}}_2$ 的**矢量和**记为

$$\hat{\vec{J}}=\hat{\vec{J}}_1+\hat{\vec{J}}_2,\ \text{即是}\ \ \hat{J}_x=\hat{J}_{1x}+\hat{J}_{2x},\ \hat{J}_y=\hat{J}_{1y}+\hat{J}_{2y},\ \hat{J}_z=\hat{J}_{1z}+\hat{J}_{2z},$$

则不难证明 $\hat{\vec{J}}$ 仍然是角动量，即它的分量也满足角动量的对易关系。所以，互相独立的角动量可以相加，角动量自己却不可以被常数乘。由此看出量子力学里的角动量和经典的“矢量”还是有很大差别的。

从未耦合（$\hat{\vec{J}}_1$ 和 $\hat{\vec{J}}_2$ 未相加）的角度看来，这个体系的完备算符集是 $J_1^2,\hat{J}_{1z},J_2^2,\hat{J}_{2z}$，共同本征态是 $\left|j_1,m_1;\,j_2,m_2\right\rangle$，Hilbert 空间的总维数是 $(2j_1+1)(2j_2+1)$。那么角动量耦合以后，体系的完备算符集变成了什么？新的完备算符集当中当然要包括 $J^2,\hat{J}_z$，问题是 $J_1^2,\hat{J}_{1z},J_2^2,\hat{J}_{2z}$ 这几个算符中还有谁和它们都对易？不难验证：$\hat{J}_{1z},\hat{J}_{2z}$ 是和 J^2 **不对易**的，而 J_1^2,J_2^2 却和 $J^2,\hat{J}_z$ 都对易。所以，现在的完备算符集是 $J^2,\hat{J}_z,J_1^2,J_2^2$，共同本征态则记为 $\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle$，也就是说我们有

$$\begin{aligned}
J^2\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle&=j(j+1)\hbar^2\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle,\\
\hat{J}_z\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle&=m\hbar\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle,\\
J_1^2\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle&=j_1(j_1+1)\hbar^2\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle,\\
J_2^2\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle&=j_2(j_2+1)\hbar^2\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle.
\end{aligned}$$

根据叠加原理，$\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle$ 一定是 $\left|j_1,m_1;\,j_2,m_2\right\rangle$ 的线性组合：

$$\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle=\sum_{m_1,m_2}C(j_1,j_2,j;m_1,m_2,m)\left|j_1,m_1;\,j_2,m_2\right\rangle,$$

若采用 Dirac 符号则

$$C(j_1,j_2,j;m_1,m_2,m)=\left\langle j_1,m_1;\,j_2,m_2\right|j,m;\,j_1,j_2\rangle.$$

这些组合系数称为 Clebsch-Gordan (CG) 系数。实际上，从未耦合表象到耦合表象的变换是一个幺正变换，而 CG 系数就是这个幺正变换的矩阵元。

我们的问题是：j,m 和 $j_1,m_1;\,j_2,m_2$ 有什么关系？组合系数 $C(j_1,j_2,j;m_1,m_2,m)$ 是什么？

以 $\hat{J}_z=\hat{J}_{1z}+\hat{J}_{2z}$ 作用于上述展开式得到

$$m\left|j,m;\,j_1,j_2\right\rangle=\sum_{m_1,m_2}(m_1+m_2)C(j_1,j_2,j;m_1,m_2,m)\left|j_1,m_1;\,j_2,m_2\right\rangle,$$

即是

$$\sum_{m_1,m_2}(m-m_1-m_2)C(j_1,j_2,j;m_1,m_2,m)\left|j_1,m_1;\,j_2,m_2\right\rangle=0,$$

所以

$$(m-m_1-m_2)C(j_1,j_2,j;m_1,m_2,m)=0.$$

这就是说，只有在

$$m=m_1+m_2$$

的时候才能有

$$C(j_1,j_2,j;m_1,m_2,m)\neq 0.$$

其次，在一个特殊的状态下未耦合的本征态和耦合的本征态是相同的，那就是“最大投影态”

$$m_1 = j_1,\ m_2 = j_2,\ m = j\,.$$

注意到

$$J^2 = (\hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2)^2 = J_1^2 + J_2^2 + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} + 2\,\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z},$$

并把它作用于最大投影态$\left| j_1, j_1;\ j_2, j_2 \right\rangle$，我们发现

$$\begin{aligned} J^2 \left| j_1, j_1;\ j_2, j_2 \right\rangle &= (J_1^2 + J_2^2 + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} + 2\,\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}) \left| j_1, j_1;\ j_2, j_2 \right\rangle \\ &= \big(j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) + 2 j_1 j_2 \big)\hbar^2 \left| j_1, j_1;\ j_2, j_2 \right\rangle = (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)\,\hbar^2 \left| j_1, j_1;\ j_2, j_2 \right\rangle, \end{aligned}$$

其中注意 $J_+ \left| j, j \right\rangle = 0$，所以对于这个态 $j = j_1 + j_2$。它显然是 j 的最大可能值，即

$$j_{\max} = j_1 + j_2\,.$$

由于 m_1 和 m_2 的其它值总是以公差 1 递减，所以 j 的可能值也以公差 1 递减。那么 j 的最小值 $j_{\min}$ 是多大？我们可以通过 Hilbert 空间的总维数的分析得出。从耦合以后的角度来看，总维数是

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) = (j_{\max}+1)^2 - (j_{\min})^2 = (j_1 + j_2 + 1)^2 - (j_{\min})^2,$$

但 Hilbert 空间的总维数并不依赖于采用什么完备算符集，所以

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

由此得到

$$(j_{\min})^2 = (j_1 - j_2)^2\,.$$

所以我们最后的结论是：

$$j = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1, \cdots, \left| j_1 - j_2 \right|, \quad \text{或写为} \ \left| j_1 - j_2 \right| \le j \le j_1 + j_2,$$

以及

$$m = m_1 + m_2,$$

也就是说，只有当这些条件被满足的时候，$C(j_1, j_2, j; m_1, m_2, m)$ 才 $\neq 0$。这个法则是量子力学中的重要法则，实质上属于一种“选择定则”(selection rule)。在直观上，这是矢量相加的三角形法则的结果，因为三角形的三条边 a, b, c 必然满足关系

$$\left| b - c \right| \le a \le b + c.$$

所以上述关系又称为三角形关系。

9.3.2　CG 系数的确定

CG 系数的值的计算是一件比上面的推导复杂得多的事情，许多数学家和物理学家都曾经为此做了大量的工作，这里不再仔细介绍，而只是指出确定 CG 系数的基本原则。

按照 $m = m_1 + m_2$ 的规则，我们可以写

$$\left| j, m;\ j_1, j_2 \right\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} C(j_1, j_2, j; m_1, m - m_1, m) \left| j_1, m_1;\ j_2, m - m_1 \right\rangle,$$

所以需要求和的实际上只有一个量子数（在上式中取作 m_1）。下面的任务就是让

$$J^2 \left| j, m;\ j_1, j_2 \right\rangle = j(j+1)\hbar^2 \left| j, m;\ j_1, j_2 \right\rangle.$$

代入 $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} + 2\,\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}$，把各项算符对$\left| j_1, m_1;\ j_2, m - m_1 \right\rangle$的作用结果算出来，再比较等式两边的相同的态，就可以定出 CG 系数。还有一个相位约定的问题，通常采用的约定是：

（1）　CG 系数都是实的；

（2）　$C(j_1, j_2, j; m_1, m_2, m)\big|_{m_1 = j_1, m_2 = j - j_1, m = j} > 0$。

可以证明，有了这些要求，CG 系数就被唯一地确定了。本课程的后续章节中会给出一些 CG 系数的具体例子。

在许多物理问题中都要用到 CG 系数。以前的老办法是查表，现在有了计算机，事情就变得简单多了：在计算机程序库里有现成的 CG 系数计算程序（数值的或者符号的）可供调用。这也算是物理学的“与时俱进”吧。