角动量

步允霆

2023 年 11 月 7 日

目录

1 角动量与对易关系

1.1 轨道角动量

经典角动量为

$$\mathscr{L}_x = yp_z - zp_y \tag{1}$$

根据量子化规则

$$L_x = YP_z - ZP_y \tag{2}$$

如此构造的算符是厄米算符。

按相同的办法可以得到与经典角动量分量 $\mathscr{L}_y, \mathscr{L}_z$ 对应的算符 L_y, L_z；于是，我们可以写成

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \tag{3}$$

接下来计算对易子 $[L_x, L_y]$

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] \\ &= [YP_z, ZP_x] + [ZP_y, XP_z]\end{aligned} \tag{4}$$

于是我们有

$$\begin{aligned}[L_z, L_y] &= Y[P_z, Z]P_x + X[Z, P_z]P_y \\ &= -\mathrm{i}\hbar YP_x + \mathrm{i}\hbar XP_y \\ &= \mathrm{i}\hbar L_z\end{aligned} \tag{5}$$

类似的，可以给出其他对易子

$$
\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= \mathrm{i}\hbar L_z \\
[L_y, L_z] &= \mathrm{i}\hbar L_x \\
[L_z, L_x] &= \mathrm{i}\hbar L_y
\end{aligned} \tag{6}
$$

这样，我们建立了一个无自旋粒子的角动量诸分量之间的对易关系式。

上述结果可以推广至 N 个无自旋粒子的体系。在量子力学中，这个体系的总角动量就是

$$
\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{L}_i \tag{7}
$$

其中

$$
\mathbf{L}_i = \mathbf{R}_i \times \mathbf{P}_i \tag{8}
$$

每一个粒子的角动量 $\mathbf{L}_i$ 都满足对易关系(6)，而且只要 j 不同于 i，他就可以和 $\mathbf{L}_j$ 对易。

1.2 角动量定义的推广

如果任意三个观察算符 J_x, J_y, J_z 满足如下关系式

$$
\begin{aligned}
[J_x, J_y] &= \mathrm{i}\hbar J_z \\
[J_y, J_z] &= \mathrm{i}\hbar J_x \\
[J_z, J_x] &= \mathrm{i}\hbar J_y
\end{aligned} \tag{9}
$$

我们就称 J_x, J_y, J_z 的集合为角动量 $\boldsymbol{J}$。

我们现在引入角动量 $\boldsymbol{J}$ 的平方的算符

$$
\boldsymbol{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{10}
$$

因为 J_x, J_y, J_z 都是厄米算符，故 $\boldsymbol{J}^2$ 也是厄米算符。$\boldsymbol{J}^2$ 与 $\boldsymbol{J}$ 的三个分量对易

$$
[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}] = 0 \tag{11}
$$

以 J_x 为例证明如下

$$
\begin{aligned}
[\boldsymbol{J}^2, J_x] &= [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_x] \\
&= [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_x]
\end{aligned} \tag{12}
$$

根据(9)，很容易算出其他两个对易子

$$
\begin{aligned}
[J_y^2, J_x] &= J_y[J_y, J_x] + [J_y, J_x]J_y \\
&= -\mathrm{i}\hbar J_y J_z - \mathrm{i}\hbar J_z J_y
\end{aligned} \tag{13a}
$$

$$
\begin{aligned}
[J_z^2, J_x] &= J_z[J_z, J_x] + [J_z, J_x]J_z \\
&= -\mathrm{i}\hbar J_z J_y - \mathrm{i}\hbar J_y J_z
\end{aligned} \tag{13b}
$$

由此可见，(12)中的两个对易子之和等于零。

量子力学的角动量理论完全建立在对易关系(9)的基础上，意味着：角动量的三个分量是不可能同时测量的，但是，$\boldsymbol{J}^2$ 与 $\boldsymbol{J}$ 的任意一个分量却都是相容的。

2 角动量的普遍理论

2.1 定义与符号

2.1.1 算符 J_+ 和 J_-

不使用角动量 $\boldsymbol{J}$ 的分量 J_x 和 J_y 而引入他们的线性组合，将是方便的

$$
\begin{aligned}
J_+ &= J_x + \mathrm{i}J_y \\
J_- &= J_x - \mathrm{i}J_y
\end{aligned} \tag{14}
$$

与谐振子 a 和 $a^\dagger$ 相似，J_+, J_- 不是厄米算符，但他们互为伴随算符。

根据(9)(11)，很容易证明这些算符满足下列对易关系：

$$
[J_z, J_+] = \hbar J_+ \tag{15}
$$

$$
[J_z, J_-] = -\hbar J_- \tag{16}
$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \tag{17}$$

$$[\boldsymbol{J}^2, J_+] = [\boldsymbol{J}^2, J_-] = [\boldsymbol{J}^2, J_z] = 0 \tag{18}$$

我们来计算 J_+J_- 和 J_-J_+

$$\begin{aligned} J_+J_- &= (J_x + \mathrm{i}J_y)(J_x - \mathrm{i}J_y) \\ &= J_x^2 + J_y^2 - \mathrm{i}[J_x, J_y] \\ &= J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z \end{aligned} \tag{19}$$

$$\begin{aligned} J_-J_+ &= (J_x - \mathrm{i}J_y)(J_x + \mathrm{i}J_y) \\ &= J_x^2 + J_y^2 + \mathrm{i}[J_x, J_y] \\ &= J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z \end{aligned} \tag{20}$$

应用定义 $\boldsymbol{J}^2$ 的(10)，还可以把这些式子写成下列形式

$$J_+J_- = \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \tag{21a}$$

$$J_-J_+ = \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \tag{21b}$$

将此两式的对应项相加，便可得

$$\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \tag{22}$$

2.1.2 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的本征值符号与方程

根据(10)，$\boldsymbol{J}^2$ 是三个厄米算符的平方之和，因而不论 $|\varphi\rangle$ 是任何右矢，矩阵元 $\langle\varphi|\boldsymbol{J}^2|\varphi\rangle$ 总是整数或零：

$$\begin{aligned} \langle\varphi|\boldsymbol{J}^2|\varphi\rangle &= \langle\varphi|J_x^2|\varphi\rangle + \langle\varphi|J_y^2|\varphi\rangle + \langle\varphi|J_z^2|\varphi\rangle \\ &\| J_x|\varphi\rangle \|^2 + \| J_y|\varphi\rangle \|^2 + \| J_z|\varphi\rangle \|^2 \geqslant 0 \end{aligned} \tag{23}$$

我们可以由此推知：$\boldsymbol{J}^2$ 的全体本征值都是整数或零，这是因为，如果 $|\varphi\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征矢，那么，$\langle\varphi|\boldsymbol{J}^2|\varphi\rangle$ 就是对应的本征值与 $|\varphi\rangle$ 的模平方的乘积。

我们把：$\boldsymbol{J}^2$ 的本征值写成 $j(j+1)\hbar^2$ 的形式，并且按照惯例取

$$j \geqslant 0 \tag{24}$$

引入这个符号的目的在于简化以后的推证。由于 $\boldsymbol{J}$ 具有 $\hbar$ 的量纲，故 $\boldsymbol{J}^2$ 的任何本征值都具有 $\lambda\hbar$ 的形式，其中的 λ 是一个无量纲的实数。我们刚才看到，λ 一个是正数或零；于是很容易证明关于 j 的二次方程

$$j(j+1) = \lambda \tag{25}$$

必有而且只有一个正的或等于零的根。如果加上条件(24)的限制，那么，λ 的值就唯一确定了 j 的值；因此，$\boldsymbol{J}^2$ 的任一本征值都可以写作 $j(j+1)\hbar^2$ 的形式，其中 j 是正数或零。

至于 J_z 的本征值，其量纲和 $\hbar$ 的相同，习惯上，我们将这些本征值记作 $m\hbar$，其中 m 是无量纲的数。

我们将用确定 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的本征值的指标 j 和 m 来标记此两算符的共同本征矢。但是，一般来说，$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 并不构成一个 CSCO，因而必须引入第三个指标，用来区别对应于 $\boldsymbol{J}^2$ 的同一本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 和 J_z 的同一本征值 $m\hbar$ 的那些不同的本征矢，我们将这个指标记作 k。

这样一来，我们试图求解的本征值方程组便成为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2|k,j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|k,j,m\rangle \\ J_z|k,j,m\rangle &= m\hbar|k,j,m\rangle \end{aligned} \tag{26}$$

2.2 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的本征值

2.2.1 引理 1：$\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 本征值的性质

如果 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的对应于同一本征矢 $|k,j,m\rangle$ 的本征值，则 j 与 m 满足下列不等式

$$-j \leqslant m \leqslant j \tag{27}$$

我们来考虑矢量 $J_+|k,j,m\rangle$ 与 $J_-|k,j,m\rangle$，他们的模平方为正值或零，即

$$\| J_+|k,j,m\rangle \|^2 = \langle k,j,m|J_-J_+|k,j,m\rangle \geqslant 0 \tag{28a}$$

$$\| J_-|k,j,m\rangle \|^2 = \langle k,j,m|J_+J_-|k,j,m\rangle \geqslant 0 \tag{28b}$$

为了计算这些不等式的左端，我们可以利用(21)，并且假定 $|k,j,m\rangle$ 已经归一化，这样便有

$$\begin{aligned}\langle k,j,m|J_-J_+|k,j,m\rangle &= \langle k,j,m|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|k,j,m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2\end{aligned} \tag{29a}$$

$$\begin{aligned}\langle k,j,m|J_+J_-|k,j,m\rangle &= \langle k,j,m|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|k,j,m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2\end{aligned} \tag{29b}$$

将这些结果代入不等式(28)，得到

$$j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1) \geqslant 0 \tag{30a}$$

$$j(j+1) - m(m-1) = (j-m+1)(j+m) \geqslant 0 \tag{30b}$$

亦即

$$-(j+1) \leqslant m \leqslant j \tag{31a}$$

$$-j \leqslant m \leqslant j+1 \tag{31b}$$

仅当 m 满足不等式(27)时，这两个条件才能同时满足。

2.2.2 引理 2：矢量 $J_-|k,j,m\rangle$ 的性质

设 $|k,j,m\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的一个本征矢，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$。

(1) 如果 $m=-j$。则 $J_-|k,j,-j\rangle = 0$。

(2) 如果 $m>-j$，则 $J_-|k,j,m\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的一个非零本征矢，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $(m-1)\hbar$。

两个性质的证明分别使用对易子 $[\boldsymbol{J}^2, J_-]$ 与 $[J_z, J_-]$ 即可。

2.2.3 引理 3：矢量 $J_+|k,j,m\rangle$ 的性质

设 $|k,j,m\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的一个本征矢，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$。

(1) 如果 $m=j$。则 $J_+|k,j,j\rangle = 0$。

(2) 如果 $m<j$，则 $J_+|k,j,m\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的一个非零本征矢，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $(m-1)\hbar$。

证明方法与上节相似。

2.2.4 确定 $\boldsymbol{J}^2$ 及 J_z 的谱

设 $|k,j,m\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的一个非零本征矢，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$。那么，根据引理 1，应该有 $-j\leqslant m\leqslant j$。因而，一定存在一个非负的整数 p 使得

$$-j\leqslant m-p<-j+1 \tag{32}$$

考虑下面的矢量序列

$$|k,j,m\rangle, J_-|k,j,m\rangle,\cdots,(J_-)^p|k,j,m\rangle \tag{33}$$

根据引理 2，此序列中的每一个矢量 $(J_-)^p|k,j,m\rangle(n=0,1,\cdots,p)$ 都是 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的非零本征矢，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$。

我们逐步的证明：根据假设，$|k,j,m\rangle$ 是一个非零矢量，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$；将算符 J_- 作用于矢量 $(J_-)^{n-1}|k,j,m\rangle$，便得到矢量 $(J_-)^n|k,j,m\rangle$，前一个矢量是 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的本征矢，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $(m-n+1)\hbar$；后面这个本征值是严格大于 $-j\hbar$ 的，这是因为，根据(32)有

$$m-n+1\geqslant m-p+1\geqslant -j+1 \tag{34}$$

根据引理 2 的第 (2) 点，可知 $(J_-)^n|k,j,m\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的非零本征矢，属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $(m-n)\hbar$。

现在将算符 J_- 作用于 $(J_-)^p|k,j,m\rangle$。首先假设 J_z 的与矢量 $(J_-)^p|k,j,m\rangle$ 相联系的本征值 $(m-p)\hbar$ 严格大于 $-j\hbar$，也就是说

$$m-p>-j \tag{35}$$

根据引理 2 的第 (2) 点，$J_-(J_-)^p|k,j,m\rangle$ 就应该是一个非零矢量而且应该对应于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $(m-p-1)\hbar$，这就和引理 1 互相矛盾了；这是因为，根据(32)，有

$$m-p-1<-j \tag{36}$$

因而 $m-p$ 必须等于 $-j$。在这个条件下，$(J_-)^p|k,j,m\rangle$ 实际上对应于 J_z 的本征值 $-j\hbar$，而且，根据引理 2 的第 (2) 点，$J_-(J_-)^p|k,j,m\rangle$ 是个零矢量；因而，通过算符 J_- 迭次作用于 $|k,j,m\rangle$ 而形成的矢量序列(33)是有限的，而且与引理 1 的矛盾也消除了。

于是我们证明了：存在着这样一个整数 p，他取正值或零，使得

$$m-p=-j \tag{37}$$

和上面完全相同的推理可以证明：根据引理 3，存在这样一个整数 q，他取正值或零，使得

$$m+q=j \tag{38}$$

这是因为矢量序列

$$|k,j,m\rangle, J_+|k,j,m\rangle, \cdots, (J_+)^p|k,j,m\rangle \tag{39}$$

必须是有限的，才不致和引理 1 矛盾。

将(37)(38)结合起来，我们得到

$$p+q=2j \tag{40}$$

因而 j 等于正整数的一半或零。由此可以推知，j 必须是整数或半整数。此外，如果存在一个非零矢量 $|k,j,m\rangle$，则序列(33)(39)中的所有矢量也都是非零矢量；而且都是 $\boldsymbol{J}^2$ 的属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 的本征矢又都是 J_z 的属于本征值

$$-j\hbar, (-j+1)\hbar, (-j+2)\hbar, \cdots, (j-2)\hbar, (j-1)\hbar, j\hbar \tag{41}$$

的本征矢。

现在把结果归纳如下

假设 $\boldsymbol{J}$ 是满足对易关系式(9)的任意角动量。如果 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$ 表示 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的本征值，那么

(1)　j 只能取正的整数、半整数或零，即 $0, 1/2, 1, 3/2, 2, \cdots$

(2) 对于 j 的一个固定值，m 的可能值只有 $(2j+1)$ 个：$-j, -j+1, \cdots, j-1, j$。因此，若 j 是半整数，则 m 也是半整数。在 m 的这些值中，只要有一个出现，其他的值也会出现。

2.3 表象 $|k,j,m\rangle$

2.3.1 基右矢

我们取在所研究的情况下能够出现一对本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$。与这一对本征值相联系的本征矢的集合在 $\mathscr{E}$ 空间中张成一个矢量子空间，我们将他记作 $\mathscr{E}(j,m)$；可以预见他的维数 $g(j,m)$ 大于 1，这是因为一般来说 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 并不构成一个 CSCO。现在，我们在子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 中选择一个任意的正交归一基 $|k,j,m\rangle; k=1,2,\cdots,g(j,m)$。

如果 m 不等于 j，则在 $\mathscr{E}$ 空间中一定有另一个子空间 $\mathscr{E}(j,m+1)$，他由 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的属于本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$ 的本征矢所张成。同样，若 m 不等于 $-j$，便存在着一个子空间 $\mathscr{E}(j,m-1)$。我们从 $\mathscr{E}(j,m)$ 空间中已经选定的基出发，在 m 不等于 j 与 $-j$ 的情况下，在 $\mathscr{E}(j,m+1)$ 空间和 $\mathscr{E}(j,m-1)$ 空间中构成一个正交归一基。

首先，我们证明，若 k_1 不等于 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 $J_-|k_2,j,m\rangle$ 也是正交的。我们利用(21)来计算 $J_\pm|k_2,j,m\rangle$ 和 $J_\pm|k_1,j,m\rangle$ 的标量积

$$\begin{aligned}\langle k_2,j,m|J_\mp J_\pm|k_1,j,m\rangle &= \langle k_2,j,m|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z)|k_1,j,m\rangle \\ &= [j(j+1)-m(m\pm1)]\hbar^2\langle k_2,j,m|k_1,j,m\rangle \qquad (42)\end{aligned}$$

由于 $\mathscr{E}(j,m)$ 空间中的基是正交归一的，如果 $k_1\neq k_2$，则这些标量积都是零。如果 $k_1=k_2$，便得到矢量 $J_\pm|k,j,m\rangle$ 的模平方 $[j(j+1)-m(m\pm1)]\hbar^2$。

现在，我们来考虑由下式

$$|k,j,m+1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}}J_+|k,j,m\rangle \qquad (43)$$

定义是 $g(j,m)$ 个矢量的集合。根据上面的论证，这些矢量是正交归一的。此外，他们构成 $\mathscr{E}(j,m+1)$ 空间中的一个基。这一点可证明如下：我们假设在 $\mathscr{E}(j,m+1)$ 空间中存在一个矢量 $|\alpha,j,m+1\rangle$，他正交于自(43)的全体矢量 $|k,j,m+1\rangle$。因为 $m+1$ 不会等于 $-j$，故矢量 $J_-|\alpha,j,m+1\rangle$ 不会是零矢量，他应该属于 $\mathscr{E}(j,m)$，并应正交于所有的矢量 $J_-|k,j,m+1\rangle$；但根据(43)，$J_-|k,j,m+1\rangle$ 正比于 $J_-J_+|k,j,m\rangle$，即正比于 $|k,j,m\rangle$；于是 $J_-|\alpha,j,m+1\rangle$ 应是 $\mathscr{E}(j,m)$ 空间中的一个非零矢量，他正交于基 $|k,j,m\rangle$ 中的所有矢量，但这是不可能的。因而矢量集合(43)构成 $\mathscr{E}(j,m+1)$ 空间

中的一个基。

采用和上面完全相同的方法，我们可以证明：由下式定义的诸矢量 $|k,j,m-1\rangle$

$$|k,j,m-1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}} J_-|k,j,m\rangle \tag{44}$$

构成 $\mathscr{E}(j,m-1)$ 空间中的一个正交归一基。

特别的，我们看到，子空间 $\mathscr{E}(j,m+1)$ 和子空间 $\mathscr{E}(j,m-1)$ 的维数等于 $\mathscr{E}(j,m)$ 空间的维数。换句话说，他们的维数与 m 无关

$$g(j,m+1) = g(j,m-1) = g(j,m) = g(j) \tag{45}$$

我们现在按下列步骤进行。对于在待研究的问题中实际出现的 j 的每一个数值。我们取与 j 的数值相联系的诸子空间中的一个。譬如 $\mathscr{E}(j,j)$，他对应于 $m=j$。我们在这个子空间中任意取一个正交归一基 $|k,j,j\rangle; k=1,2,\cdots,g(j)$，然后，根据(44)，我们可以顺序地为其他 $2j$ 个子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 中的每一个构成一个基。图 1 中的箭头概略地表示我们所用的方法。对于问题中实际出现的 j 的每一个数值，我们都按照同样的方法去做，最后构成的基叫做态空间 $\mathscr{E}$ 中的标准基。对于这样一个基，正交归一关系式及封闭性关系式可以写作

$$\langle k,j,m|k',j',m'\rangle = \delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{46a}$$

$$\sum_j \sum_{m=-j}^{+j} \sum_{k=1}^{g(j)} |k,j,m\rangle\langle k,j,m| = 1 \tag{46b}$$

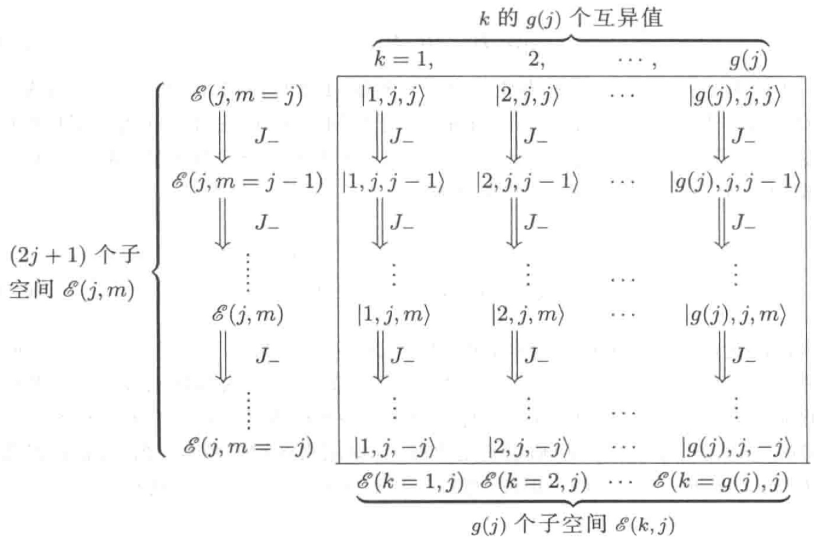

图 1: 对于固定 j, 构建标准基

2.3.2 子空间 $\mathscr{E}(k,j)$

在上一节中，我们从子空间 $\mathscr{E}(j,m=j)$ 中已选定的一个基出发，构成子空间 $\mathscr{E}(j,m=j-1)$ 中的一个基，然后构成子空间 $\mathrm{E}(j,m=j-2),\cdots,\mathscr{E}(j,m),\cdots$ 中的基，最后便构成态空间中的一个“标准基”。我们可以把态空间看做全体正交子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 的直和，这里 m 从 $-j$ 变到 $+j$，每次改变一个单位，而 j 则取遍待研究问题中实际出现的所有数值。这就是说，$\mathscr{E}$ 空间中的任一个矢量都可以唯一的分解为一系列矢量之和，其中每一个矢量分别属于一个确定的子空间 $\mathscr{E}(j,m)$。

但是，利用这些子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 也有不便的地方。首先，他的维数 $g(j)$ 事先是不知道的，而且是与待研究物理体系相关联的；其次，这些子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 在 $\boldsymbol{J}$ 的作用下并不是不变的，这是因为，按照矢量 $|k,j,m\rangle$ 的构成方法，算符 J_+ 和 J_- 在子空间 $\mathscr{E}(j,m)$ 的矢量和 $\mathscr{E}(j,m\pm1)$ 的矢量之间的矩阵元并不等于零。

现在我们引入 $\mathscr{E}$ 空间中的另外一些子空间，即子空间 $\mathscr{E}(k,j)$。为此，我们不再组合指标 j 和 m 都是固定数值的那些矢量 $|k,j,m\rangle$，而另外组成一个集合，其中诸矢量的指标 k 和 j 都具有指定值，我们称这些矢量所张成的空间为子空间 $\mathscr{E}(k,j)$。这种做法相当于将图 1 中的同一列中的 $(2j+1)$

个矢量 [而不是同一行中的 $g(j)$ 个矢量] 组合起来。

于是 $\mathscr{E}$ 空间就成为这些正交子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 的直和，现在这些子空间具有如下简单性质

——无论待研究的是什么物理体系，也无论 k 的值如何，子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 的维数都是 $(2j+1)$。

——子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 在 $\boldsymbol{J}$ 的作用下具有整体不变性；也就是说，将 $\boldsymbol{J}$ 的任意一个分量 J_u 作用于子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 中的一个右矢，所得的另一个右矢仍属于 $\mathscr{E}(k,j)$。这一点是不难证明的，因为 J_u 总可以通过 J_z, J_+ 及 J_- 来表示；但由 J_z 对 $|k,j,m\rangle$ 作用而得的右矢正比于 $|k,j,m\rangle$，由 J_+ 的作用而得的右矢正比于 $|k,j,m+1\rangle$，由 J_- 的作用而得的右矢正比于 $|k,j,m-1\rangle$；因此，根据构成“标准基”$|k,j,m\rangle$ 的方法便可得出上述性质。

2.3.3 表示角动量算符的矩阵

在一个标准基中，表示 $\boldsymbol{J}$ 的某一分量 J_u 的矩阵的求法，由于使用子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 而得到很大的简化，实际上，在分别属于互异子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 的两个基右矢之间的矩阵元都等于零。因此，这种矩阵的形式如下

	$\mathscr{E}(k,j)$	$\mathscr{E}(k',j)$	$\mathscr{E}(k',j')$	
$\mathscr{E}(k,j)$	$(2j+1)\times(2j+1)$ 矩阵	0	0	0
$\mathscr{E}(k',j)$	0	$(2j+1)\times(2j+1)$ 矩阵	0	0
$\mathscr{E}(k',j')$	0	0	$(2j'+1)\times(2j'+1)$ 矩阵	0
$\vdots$	0	0	0	0

图 2: 角动量算符的矩阵

由此可见，我们只需计算有限阶的子矩阵，在每一个子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 内部，这些矩阵都表示我们所有的算符。

第二个十分重要的简化在于：每一个这样的有限阶子矩阵都不依赖于 k，也不依赖于待研究体系，而只依赖于 j；当然，还依赖于我们所要表示的

算符。实际上，由 $|k,j,m\rangle$ 的定义，可以推知

$$
\begin{aligned}
J_z|k,j,m\rangle &= m\hbar|k,j,m\rangle \\
J_+|k,j,m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|k,j,m+1\rangle \\
J_-|k,j,m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|k,j,m-1\rangle
\end{aligned} \tag{47}
$$

这就是说

$$
\begin{aligned}
\langle k,j,m|J_z|k',j',m'\rangle &= m\hbar\delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{mm'} \\
\langle k,j,m|J_\pm|k',j',m'\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1)-m'(m'\pm 1)}\delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{mm'\pm 1}
\end{aligned} \tag{48}
$$

这些等式表明，表示 $\boldsymbol{J}$ 的分量的那些矩阵元只依赖于 j 和 m，不依赖于 k。

因此，不论在什么情况下，为了求得在一个标准基中与任意分量 J_u 相联系的矩阵，我们只需对于 j 的所有可能值 $(j=0,12,1,3/2,\cdots)$ 一次算出所有“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。研究一个具体的物理体系与他的角动量 $\boldsymbol{J}$ 时，我们应该确定这个问题中 j 实际上取哪些数值，以及与 j 的每一个数值相联系的子空间 $\mathscr{E}(k,j)$ 的个数 $g(j)$[也就是说，他的维数为 $(2j+1)g(j)$]；我们知道在这种特殊情况下，表示 J_u 的矩阵具有分块对角的形式，即图 2，因而，我们可以从刚才定义的普适矩阵出发构成这个矩阵；对于 j 的每一个值，将有 $g(j)$ 个与 $(J_u)^{(j)}$ 全同的子块。

j 取任意值时，利用(48)(14)，我们可以写作

$$
\begin{aligned}
\langle k,j,m|J_x|k',j',m'\rangle = \frac{\hbar}{2}\delta_{kk'}\delta_{jj'}[&\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\delta_{mm'+1}+ \\
&\sqrt{j(j+1)-m'(m'-1)}\delta_{mm'-1}]
\end{aligned} \tag{49}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle k,j,m|J_y|k',j',m'\rangle = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\delta_{kk'}\delta_{jj'}[&\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\delta_{mm'+1}+ \\
&\sqrt{j(j+1)-m'(m'-1)}\delta_{mm'-1}]
\end{aligned} \tag{50}
$$

由此可见，矩阵 $(J_z)^{(j)}$ 是对角的，他的元是 $m\hbar$ 的 $(2j+1)$ 个值。在矩阵 $(J_x)^{(j)}$ 和 $(J_y)^{(j)}$ 中，只在紧邻主对角线的上下两侧，才有非零元；$(J_x)^{(j)}$ 是实对称矩阵，$(J_y)^{(j)}$ 是纯虚反对称矩阵。

另一方面，从构成的方法来看，诸右矢 $|k,j,m\rangle$ 都是 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征矢，我们便有

$$\langle k,j,m|\boldsymbol{J}^2|k',j',m'\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{kk'}\delta_{jj'}\delta_{mm'} \tag{51}$$

因而，矩阵 $(\boldsymbol{J}^2)^{(j)}$ 正比于 $(2j+1)\times(2j+1)$ 的单位矩阵，其对角元都等于 $j(j+1)\hbar^2$。

最后，我们把专门讨论标准表象的这一段的结论归纳为

用 $|k,j,m\rangle$ 表示 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 共同本征矢，即：

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

这些矢量构成态空间的一个正交归一基 $|k,j,m\rangle$；如果算符 J_+ 与 J_- 作用于基矢的结果为

$$\begin{aligned}J_+|k,j,m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|k,j,m+1\rangle \\ J_-|k,j,m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|k,j,m-1\rangle\end{aligned}$$

我们就称这个基是标准基。

3 应用于轨道角动量

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

3.1.1 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 表象中的本征值方程

在 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 表象中，观察算符 $\boldsymbol{R}$ 与 $\boldsymbol{P}$ 分别相当于倍乘因子 $\boldsymbol{r}$ 和微分算符 $\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla$。因而角动量 $\boldsymbol{L}$ 的三个分量可以写作：

$$L_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{52a}$$

$$L_y = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{52b}$$

$$L_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{52c}$$

使用球坐标更为方便，即

$$
\begin{aligned}
x &= r\sin\theta\cos\varphi \\
y &= r\sin\theta\sin\varphi \\
z &= r\cos\theta
\end{aligned}
\tag{53}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
& r \geqslant 0 \\
& 0 \leqslant \theta \leqslant \pi \\
& 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi
\end{aligned}
\tag{54}
$$

将(52)利用变量变换得到以下结果

$$
L_x = \mathrm{i}\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{55a}
$$

$$
L_y = \mathrm{i}\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{55b}
$$

$$
L_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{55c}
$$

由这些公式又可以求得

$$
\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \tag{56a}
$$

$$
L_+ = \hbar e^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{56b}
$$

$$
L_- = \hbar e^{-\mathrm{i}\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{56c}
$$

在 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 表现中，与 $\boldsymbol{L}^2$ 的本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 及 L_z 的本征值 $m\hbar$ 相联系的本征函数是下列偏微分方程组的解

$$
-\left\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\psi(r,\theta,\varphi) = l(l+1)\psi(r,\theta,\varphi) \tag{57a}
$$

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)=m\psi(r,\theta,\varphi) \tag{57b}$$

此外，根据之前所得的普遍结果，我们知道 l 是整数或半整数；而且 l 的值一旦取定，m 就只能取值 $-l,-l+1,\cdots,l-1,l$。

在方程组(57)中 r 并未出现在任何微分算符中，因此我们可以将他看作参变量而只需考虑 ψ 对 θ 及 φ 的依赖关系。若将 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的对应于本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 与 $m\hbar$ 的共同本征函数记作 $\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)$，则有

$$\boldsymbol{L}^2\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{58a}$$

$$L_z\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)=m\hbar\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{58b}$$

更严格一点，为了区别方程(58)的对应于同一对 l,m 值的各个解，应该再使用一个辅助指标。但是，事实上对于 l 和 m 的每一对容许值，这些方程只有一个解 (除倍乘因子外)，所以只用指标 l 和 m 就够了。

方程(58)给出了 $\boldsymbol{L}^2$ 与 L_z 的本征函数对 θ 和 φ 的依赖关系。一旦求得这些方程的解 $\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)$，我们就可以得到下列形式的本征函数

$$\varphi_{l,m}(r,\theta,\varphi)=f(r)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{59}$$

此处 $f(r)$ 是 r 的函数，他是作为偏微分方程(57)的积分常数而出现的。既然 $f(r)$ 可以是任意函数，这就表明，在 $\boldsymbol{r}$(或 r,θ,φ) 的函数所张成的函数空间 $\mathscr{E}_r$ 中，$\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 并不构成一个 CSCO。

为了将 $\varphi_{l,m}(r,\theta,\varphi)$ 归一化，比较方便的方法是分别将 $\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)$ 及 $f(r)$ 归一化；因而

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta|\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)|^2\mathrm{d}\theta=1 \tag{60}$$

以及

$$\int_0^{\infty}r^2|f(r)|^2\mathrm{d}r=1 \tag{61}$$

3.1.2 l 与 m 的值

利用 L_z 的表达式(55c), 可将(58b)写成下列形式

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)=m\hbar\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{62}$$

此式表明 $\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)$ 应为

$$\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)=F_l^m(\theta)e^{\mathrm{i}m\varphi} \tag{63}$$

φ 从 0 变到 2π 就覆盖整个空间。波函数在空间的所有点都应该是连续的，因此，特别的有

$$\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi=0)=\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi=2\pi) \tag{64}$$

由此可以推出

$$e^{2\mathrm{i}m\pi}=1 \tag{65}$$

根据普遍结果，m 是整数或半整数。(65)表明，就轨道角动量而言，m 只能是整数。但是，我们又知道，m 与 l 或者都是整数或者都是半整数，可见 l 也只能是整数。

我们将 l 固定于一个整数值。根据普遍理论，我们知道 $\mathrm{Y}_l^l(\theta,\varphi)$ 必须满足

$$L_+\mathrm{Y}_l^l(\theta,\varphi)=0 \tag{66}$$

考虑到(56b)和(63)，由上式得到

$$\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}-l\cot\theta\right\}F_l^l(\theta)=0 \tag{67}$$

注意到

$$\cot\theta\mathrm{d}\theta=\frac{\mathrm{d}(\sin\theta)}{\sin\theta} \tag{68}$$

便可立即积分一阶方程(67)，其通解为

$$F_l^l(\theta)=c_l(\sin\theta)^l \tag{69}$$

其中 c_l 是归一化常数。反过来看，我们刚才确定的函数正是 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的共同本征函数，对应于本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 与 $l\hbar$。这是因为，我们已经有 $L_z\mathrm{Y}_l^l(\theta,\varphi)=l\hbar\mathrm{Y}_l^l(\theta,\varphi)$。于是，为了证明 $\mathrm{Y}_l^l(\theta,\varphi)$ 是 $\boldsymbol{L}^2$ 的对应于我们所期望的本征值的本征函数，只需将这个方程与(66)结合起来，并利用(57b)。

因而，对于 l 的每一个正整数值或零值，都存在一个唯一的函数 $\mathrm{Y}_l^l(\theta,\varphi)$(倍

乘因子除外)

$$Y_l^l(\theta,\varphi)=c_l(\sin\theta)^l e^{il\varphi} \tag{70}$$

经过算符 L_- 的迭次作用，我们可以构成 $Y_l^{l-1},\cdots,Y_l^m,\cdots,Y_l^{-l}$。于是，我们看出，对应于一对本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$(这里 l 是一个任意的正整数或零；而 m 是另一个整数，他适合 $-l\leqslant m\leqslant l$)，必有一个而且只有一个本征函数：$Y_l^m(\theta,\varphi)$，根据(70)可以确切的算出这个函数。这些本征函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 叫做球谐函数。

3.1.3 球谐函数的主要性质

球谐函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 具有地推关系，我们根据普遍结果，有

$$L_\pm Y_l^m(\theta,\varphi)=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi) \tag{71}$$

于是，利用关于算符 L_+ 和 L_- 的表达式(56b)(56c)，并注意到 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 是一个只含 θ 的函数与 $e^{im\varphi}$ 的乘积，便有

$$e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-m\cot\theta\right)Y_l^m(\theta,\varphi)=\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}Y_l^{m+1}(\theta,\varphi) \tag{72a}$$

$$e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}-m\cot\theta\right)Y_l^m(\theta,\varphi)=\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}Y_l^{m-1}(\theta,\varphi) \tag{72b}$$

方程组(57)所确定的球谐函数只有倍乘因子的差异。以后，我们这样选择倍乘因子：将 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 作为角变量 θ 和 φ 的函数进行正价归一化，即

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta,\varphi)=\delta_{l'l}\delta_{m'm} \tag{73}$$

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

$$f(\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}c_{l,m}Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{74}$$

其中

$$c_{l,m}=\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta Y_l^{m*}(\theta,\varphi)f(\theta,\varphi) \tag{75}$$

球谐函数在 θ 和 φ 的函数空间 $\mathscr{E}_\Omega$ 中构成一个正交归一基，这一点可由下

式封闭性表达式给出

$$
\begin{aligned}
\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)\mathrm{Y}_l^{m*}(\theta',\varphi') &= \delta(\cos\theta-\cos\theta')\delta(\varphi-\varphi') \\
&= \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi') \qquad (76)
\end{aligned}
$$

另外，球谐函数的宇称为

$$
\mathrm{Y}_l^m(\pi-\theta,\pi+\varphi) = (-1)^l\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \qquad (77)
$$

由此可见，球谐函数是具有确定宇称的函数，而且宇称与 m 无关，l 为偶数时具有偶宇称，l 为奇数时具有奇宇称。

容易看出，还有下列关系：

$$
[\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)]^* = (-1)^m\mathrm{Y}_l^{-m}(\theta,\varphi) \qquad (78)
$$

3.1.4 一个无自旋粒子的波函数空间中的标准基

现在设 $\mathscr{E}(l,m=l)$ 是 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的共同本征函数的子空间，对应于本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 与 $l\hbar$，这里的 l 是零或确定的正整数。构成标准基的第一步，是在每一子空间 $\mathscr{E}(l,m=l)$ 中任意选定一个正交归一基；我们用 $\varphi_{k,l,l}(\boldsymbol{r})$ 表示构成空间 $\mathscr{E}(l,m=l)$ 中的已选定的基的那些函数，指标 k 用来区别这个基中的各函数。将算符 L_- 迭次作用于 $\varphi_{k,l,l}(\boldsymbol{r})$，便可构成诸函数 $\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})$，他们补足了 $m\neq l$ 的标准基；他们满足方程(26)和(47)，此两式现在成为

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{L}^2\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) &= l(l+1)\hbar^2\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) \\
L_z\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) &= m\hbar\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) \qquad (79)
\end{aligned}
$$

以及

$$
L_\pm\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\varphi_{k,l,m\pm1}(\boldsymbol{r}) \qquad (80)
$$

$\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的对应于指定的本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 与 $l\hbar$ 的全体共同本征函数对角变量的依赖关系都一样，他们的差别只在于对径向变量的依赖不同。于是，从方程(79)可以可以推知 $\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})$ 具有如下形式

$$
\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{R}_{k,l,m}(r)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \qquad (81)
$$

现在我们来证明。如果 $\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})$ 这些函数构成一个标准基，那么，各径向函数 $\mathrm{R}_{k,l,m}(r)$ 都不依赖 m。这是因为，微分算符 $L_\pm$ 并不作用于 r 的函数，根据(71)，我们有

$$\begin{aligned} L_\pm\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) &= \mathrm{R}_{k,l,m}(r)L_\pm \mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \\ &= \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)}\mathrm{R}_{k,l,m}(r)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{82}$$

将此式与(80)进行对比，便可看出，无论 r 如何径向函数都应满足

$$\mathrm{R}_{k,l,m\pm 1}(r) = \mathrm{R}_{k,l,m}(r) \tag{83}$$

所以这些函数与 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 $\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r})$ 一定具有下列形式

$$\varphi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{R}_{k,l}(r)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{84}$$

这个基的正交归一关系式可以写作

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}^3 r\varphi_{k,l,m}^*(\boldsymbol{r})\varphi_{k',l',m'}(\boldsymbol{r}) &= \int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\mathrm{R}_{k,l}^*(r)\mathrm{R}_{k',l'}(r) \\ &\quad\times\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\pi \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{Y}_l^{m*}(\theta,\varphi)\mathrm{Y}_{l'}^{m'}(\theta,\varphi) \\ &= \delta_{kk'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \end{aligned} \tag{85}$$

由于球谐函数作为 θ 和 φ 的函数已经归一化，所以，我们最后得到

$$\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\mathrm{R}_{k,l}^*(r)\mathrm{R}_{k',l'}(r) = \delta_{kk'} \tag{86}$$

由此可见，径向函数 $\mathrm{R}_{k,l}(r)$ 对变量 r 已经归一化；此外，对应于 l 的同一个值但指标 k 互异的两个径向函数是正交的。

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

考虑一个粒子，他的态由下面的波函数描述

$$\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle = \psi(\boldsymbol{r}) = \psi(r,\theta,\varphi) \tag{87}$$

我们已经知道,测量 $\boldsymbol{L}^2$ 可能得到的结果是 $0, 2\hbar^2, 6\hbar^2, \cdots, l(l{+}1)\hbar^2, \cdots, \cdots$，测量 L_z 可能得到的结果是 $0, \pm\hbar, \pm\hbar, \cdots, m\hbar, \cdots$。那么，怎么利用波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 计算测得这些结果的概率呢？

3.2.1 普遍公式

我们利用 $\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m)$ 表示同时测量 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 得到结果 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$ 的概率。在用 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的本征函数构成的基中，将 $\psi(\boldsymbol{r})$ 展开，便可求得这个概率。我们选择标准基：

$$\psi_{k,l,m}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{R}_{k,l}(r)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{88}$$

从而

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_k \sum_l \sum_m c_{k,l,m}\mathrm{R}_{k,l}(r)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{89}$$

其中系数可以这样计算

$$\begin{aligned} c_{k,l,m} &= \int \mathrm{d}^3 r \psi^*_{k,l,m}(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r}) \\ &= \int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r \mathrm{R}^*_{k,l}(r) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^\pi \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{Y}_l^{m*}(\theta,\varphi)\psi(r,\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{90}$$

在上述条件下，概率 $\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m)$ 由下式给出

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m) = \sum_k |c_{k,l,m}|^2 \tag{91}$$

如果我们只测量 $\boldsymbol{L}^2$，那么，得到结果 $l(l+1)\hbar^2$ 的概率为

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2}(l) = \sum_{m=-l}^{+l} \mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m) = \sum_k \sum_{m=-l}^{+l} |c_{k,l,m}|^2 \tag{92}$$

与此类似，如果只测量 L_z，那么，得到 $m\hbar$ 的概率为

$$\mathscr{P}_{L_z}(m) = \sum_{l \geqslant |m|} \mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m) = \sum_k \sum_{l \geqslant |m|} |c_{k,l,m}|^2 \tag{93}$$

由于算符 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 只作用于 θ 和 φ，不难看出，在上述概率的计算中

重要的是波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 对 θ 和 φ 的依赖关系。为了更精准的说明这一点，我们将 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 看做 θ 和 φ 的函数，而将 r 看做参变量。于是，和 θ 与 φ 的任何函数一样，ψ 也可以按球谐函数展开

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\sum_{l}\sum_{m}a_{l,m}\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{94}$$

这个展开式中的系数 $a_{l.m}$ 依赖于参变量 r，并由下式给出

$$a_{l,m}(r)=\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{Y}_l^{m*}(\theta,\varphi)\psi(r,\theta,\varphi) \tag{95}$$

如果比较一下(94)与(89)，我们就会发现，$c_{k,l,m}$ 就是 $a_{l,m}(r)$ 按 $\mathrm{R}_{k,l}(r)$ 展开的级数中的系数

$$a_{l,m}(r)=\sum_{k}c_{k,l,m}\mathrm{R}_{k,l}(r) \tag{96}$$

考虑到(90)与(95)，上式中的

$$c_{k,l,m}=\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r\mathrm{R}_{k,l}^{*}a_{l,m}(r) \tag{97}$$

利用(86)(96)，还可以得到

$$\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r|a_{l,m}(r)|^2=\sum_{k}|c_{k,l,m}|^2 \tag{98}$$

于是，我们可以将概率 $\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m)$ 写成

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m)=\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r|a_{l,m}(r)|^2 \tag{99}$$

如同在(92)和(93)中一样，我们可以得到

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2}(l)=\sum_{m=-l}^{+l}\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r|a_{l,m}(r)|^2 \tag{100}$$

以及

$$\mathscr{P}_{L_z}(m)=\sum_{l\geqslant|m|}\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r|a_{l,m}(r)|^2 \tag{101}$$

因而，为了求得关于测量 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的物理预言，只需将波函数看做仅仅是 θ 和 φ 的函数而将他按球谐函数展开，如(94)；然后利用公式(99)(100)(101)计算。

和上面的讨论相似，由于 L_z 只对 φ 起作用，所以在 $\mathscr{P}_{L_z}(m)$ 的计算中重要的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 对 φ 的依赖关系。为了说明这点，我们利用球谐函数的一个特点，即他是只含 θ 的函数与只含 φ 的函数的乘积，为使乘积中的每一个波函数都是归一化的，我们将此乘积写成下列形式

$$\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)=\mathrm{Z}_l^m(\theta)\frac{e^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \tag{102}$$

实际上我们有

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\frac{e^{-\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\frac{e^{\mathrm{i}m'\varphi}}{\sqrt{2\pi}}=\delta_{mm'} \tag{103}$$

再将这个公式代入球谐函数的正交归一关系式(73)，便看得到

$$\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{Z}_l^{m*}(\theta)\mathrm{Z}_{l'}^m(\theta)=\delta_{ll'} \tag{104}$$

如果将 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 看作 φ 的函数，定义在 $[0,2\pi]$ 区间上，而将 r 和 θ 看作参变量，就可以将这个函数展开为傅里叶级数

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\sum_m b_m(r,\theta)\frac{e^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \tag{105}$$

此式中的系数可由下列公式算出

$$b_m(r,\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi e^{-\mathrm{i}m\varphi}\psi(r,\theta,\varphi) \tag{106}$$

如果将(105)(106)与(94)(95)做一比较，我们就可看出，对于 m 的一个确定值，$a_{l,m}(r)$ 就是 $b_m(r,\theta)$ 按函数族 Z_l^m 展开的级数中的系数

$$b_m(r,\theta)=\sum_l a_{l,m}(r)\mathrm{Z}_l^m \tag{107}$$

其中

$$a_{l,m}(r)=\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{Z}_l^{m*}b_m(r,\theta) \tag{108}$$

考虑到(104)，可以从展开式(107)推出

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta |b_m(r,\theta)|^2 = \sum_l |a_{l,m}(r)|^2 \tag{109}$$

将这个公式代入(101)，便得到 $\mathscr{P}_{L_z}(m)$

$$\mathscr{P}_{L_z}(m) = \int_0^{\infty} r^2 \mathrm{d}r \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta |b_m(r,\theta)|^2 \tag{110}$$

这就是说，对于只测量 L_z 的情况而言，为了计算得到各种可能结果的概率，我们只需将波函数看作是只依赖于 φ 的函数，并将他如(105)那样展为傅里叶级数。

3.2.2 特殊情况

我们假设表示粒子的态的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 是两个函数的乘积，其中一个只是 r 的函数，另一个是 θ 和 φ 的函数

$$\psi(r,\theta,\varphi) = f(r)g(\theta,\varphi) \tag{111}$$

我们总可以假设 $f(r)$ 与 $g(\theta,\varphi)$ 都已分别归一化

$$\int_0^{\infty} r^2 \mathrm{d}r |f(r)|^2 = 1 \tag{112a}$$

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta |g(\theta,\varphi)|^2 = 1 \tag{112b}$$

为了得到这样一个波函数的展开式(94)，我们只需将 $g(\theta,\varphi)$ 按球谐函数展开

$$g(\theta,\varphi) = \sum_l \sum_m d_{l,m} \mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi) \tag{113}$$

其中

$$d_{l,m} = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{Y}_l^{m*}(\theta,\varphi) g(\theta,\varphi) \tag{114}$$

由此可见，这种情况下，公式(94)中的系数 $a_{l,m}(r)$ 都与 $f(r)$ 成比例

$$a_{l,m}(r) = d_{l,m} f(r) \tag{115}$$

考虑到(112a)，概率 $\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m)$ 的表达式(99)，现在简化为

$$\mathscr{P}_{\boldsymbol{L}^2,L_z}(l,m)=|d_{l,m}|^2 \tag{116}$$

这个概率与波函数的径向部分 $f(r)$ 完全无关。

与上面情况相似，我们再来看波函数为三个单元函数之积的情况

$$\psi(r,\theta,\varphi)=f(r)h(\theta)k(\varphi) \tag{117}$$

我们假设这三个函数都已经分别归一化

$$\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r|f(r)|^2=\int_0^\pi \sin\theta\mathrm{d}\theta|h(\theta)|^2=\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi|k(\varphi)|^2=1 \tag{118}$$

如果我们只关心 L_z 的测量，那么，只需将 $k(\varphi)$ 展开：

$$k(\varphi)=\sum_m e_m\frac{e^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \tag{119}$$

其中

$$e_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi e^{-\mathrm{i}m\varphi}k(\varphi) \tag{120}$$

这样就能得到与(105)相当的公式，不过现在的

$$b_m(r,\theta)=e_mf(r)h(\theta) \tag{121}$$

根据(110)利用(118)，便得到

$$\mathscr{P}_{L_z}(m)=|e_m|^2 \tag{122}$$