《量子化学基础》

第4章 角动量

Chapter 4 Angular Moments

樊建芬

Contents

4.1 单粒子体系的角动量

4.1.1 角动量的定义

4.1.2 角动量守恒

4.1.3 角动量算符的表达

4.1.4 角动量算符的对易关系

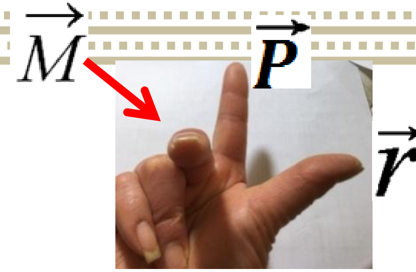
4.1.5 角动量算符的本征值和本征函数

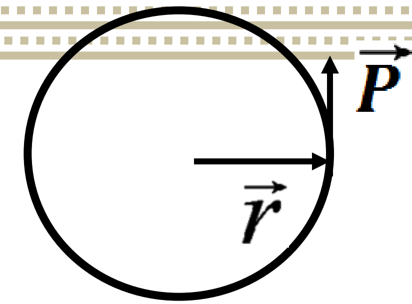
4.2 角动量的阶梯算符法

4.2.1 阶梯算符的定义及性质

4.2.2 阶梯算符的作用

4.1 单粒子体系的角动量





4.1.1 角动量的定义

在经典力学中，粒子的角动量被定义为粒子的位置矢量与线动量的叉积。

$$\boxed{\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p}}$$

$$\boxed{\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}} \qquad \boxed{\vec{p} = p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k}}$$

$$\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} y & z \\ p_y & p_z \end{vmatrix} \vec{i} - \begin{vmatrix} x & z \\ p_x & p_z \end{vmatrix} \vec{j} + \begin{vmatrix} x & y \\ p_x & p_y \end{vmatrix} \vec{k}$$

$$= (yp_z - zp_y)\vec{i} + (zp_x - xp_z)\vec{j} + (xp_y - yp_x)\vec{k}$$

则：

$$\boxed{\begin{aligned} M_x &= yp_z - zp_y \\ M_y &= zp_x - xp_z \\ M_z &= xp_y - yp_x \end{aligned}}$$

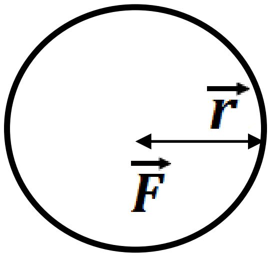
4.1.2 角动量守恒

经典力学中，角动量 $\vec{M}$ 对时间的导数称为力矩 $\vec{\tau}$ 。

力矩 $\vec{\tau}$ 又可以定义为位置矢量 $\vec{r}$ 与力 $\vec{F}$ 的叉乘。

即：$$\boxed{\frac{d\vec{M}}{dt} = \vec{\tau} = \vec{r} \times \vec{F}}$$

对于**中心力场,** $\vec{r}$ 和 $\vec{F}$ 夹角为180°，故 $\vec{\tau}$ =0



对于中心力场而言，角动量 $\vec{M}$ 不随时间变化，是一个守恒量。

4.1.3 角动量算符的表达

角动量分量算符

$$\boxed{\hat{M}_x = \hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\boxed{\hat{M}_y = \hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z} = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\boxed{\hat{M}_z = \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

角动量平方算符

$$\boxed{\widehat{M^2} = \widehat{M_x^2} + \widehat{M_y^2} + \widehat{M_z^2}}$$

$$= -\hbar^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right]$$

4.1.4 角动量算符的对易关系

1）算符运算规则

2）对易子运算规则

$[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$

3）两算符对易或不对易的量子力学意义

(1) 分量算符之间两两不对易

$$[\hat{M}_x,\hat{M}_y]=\hat{M}_x\hat{M}_y-\hat{M}_y\hat{M}_x$$

$$=(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z)-(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y)$$

分配律

$$=(y\hat{p}_z z\hat{p}_x-y\hat{p}_z x\hat{p}_z-z\hat{p}_y z\hat{p}_x+z\hat{p}_y x\hat{p}_z)$$

$$-(z\hat{p}_x y\hat{p}_z-z\hat{p}_x z\hat{p}_y-x\hat{p}_z y\hat{p}_z+x\hat{p}_z z\hat{p}_y)$$

$$=y\hat{p}_z z\hat{p}_x\cancel{-yx\hat{p}_z\hat{p}_z}\cancel{-z^2\hat{p}_y\hat{p}_x}+zx\hat{p}_y\hat{p}_z$$

$$-zy\hat{p}_x\hat{p}_z\cancel{+z^2\hat{p}_x\hat{p}_y}\cancel{+xy\hat{p}_z\hat{p}_z}-x\hat{p}_z z\hat{p}_y$$

$$=y\underline{\hat{p}_z z\hat{p}_x}+\underline{z\hat{p}_y x\hat{p}_z}-\underline{z\hat{p}_x y\hat{p}_z}-x\underline{\hat{p}_z z\hat{p}_y}$$

$$=\underline{z\hat{p}_z(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x)}-\underline{\hat{p}_z z(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x)}$$

$$=(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x)(z\hat{p}_z-\hat{p}_z z)=i\hbar\hat{M}_z$$

综上：$[\hat{M}_x,\hat{M}_y]=i\hbar\hat{M}_z$

同理：$[\hat{M}_y,\hat{M}_z]=i\hbar\hat{M}_x$ ； $[\hat{M}_z,\hat{M}_x]=i\hbar\hat{M}_y$

可见，角动量分量算符两两不对易，

说明任意两个角动量分量不能同时有确定值，

三者可能均无确定值或最多一个分量有确定值。

(2) 角动量分量和角动量平方算符是对易的

证明: $[\hat{M}^2,\hat{M}_z]=\hat{M}^2\hat{M}_z-\hat{M}_z\hat{M}^2$

$$=(\underline{\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2+\hat{M}_z^2})\hat{M}_z-\hat{M}_z(\underline{\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2+\hat{M}_z^2})$$

$$=\hat{M}_x\hat{M}_x\hat{M}_z+\hat{M}_y\hat{M}_y\hat{M}_z+\cancel{\hat{M}_z^3}-\hat{M}_z\hat{M}_x\hat{M}_x-\hat{M}_z\hat{M}_y\hat{M}_y-\cancel{\hat{M}_z^3}$$

$$=\hat{M}_x\hat{M}_x\hat{M}_z+\hat{M}_y\hat{M}_y\hat{M}_z-\hat{M}_z\hat{M}_x\hat{M}_x-\hat{M}_z\hat{M}_y\hat{M}_y$$
$$\underline{-\hat{M}_x\hat{M}_z\hat{M}_x}\underline{-\hat{M}_y\hat{M}_z\hat{M}_y}+\underline{\hat{M}_x\hat{M}_z\hat{M}_x}+\underline{\hat{M}_y\hat{M}_z\hat{M}_y}$$

$$=\hat{M}_x[\hat{M}_x,\hat{M}_z]+\hat{M}_y[\hat{M}_y,\hat{M}_z]+[\hat{M}_x,\hat{M}_z]\hat{M}_x+[\hat{M}_y,\hat{M}_z]\hat{M}_y$$

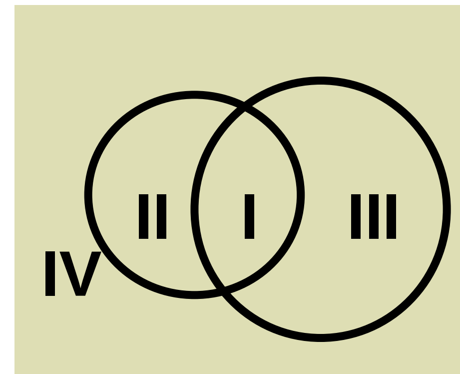
$$= \hat{M}_x\underline{[\hat{M}_x,\hat{M}_z]}+\hat{M}_y\underline{[\hat{M}_y,\hat{M}_z]}+\underline{[\hat{M}_x,\hat{M}_z]}\hat{M}_x+\underline{[\hat{M}_y,\hat{M}_z]}\hat{M}_y$$

$$= \underline{\hat{M}_x(-i\hbar\hat{M}_y)}+\underline{\hat{M}_y(i\hbar\hat{M}_x)}+\underline{(-i\hbar\hat{M}_y)\hat{M}_x}+\underline{(i\hbar\hat{M}_x)\hat{M}_y}$$

$$=0$$

综上： $[\hat{M}^2,\hat{M}_z]=0$

同理： $[\hat{M}^2,\hat{M}_y]=0$ ； $[\hat{M}^2,\hat{M}_x]=0$



三个角动量分量算符分别与角动量平方算符存在共同的本征函数完备集。

角动量平方和某分量同时有确定值或只有一个确定值或两个都没有确定值。

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar \hat{M}_z \qquad [\hat{M}^2, \hat{M}_x] = 0$$

$$[\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar \hat{M}_x \qquad [\hat{M}^2, \hat{M}_y] = 0$$

$$[\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar \hat{M}_y \qquad [\hat{M}^2, \hat{M}_z] = 0$$

角动量平方M^2和z方向分量M_z同时有确定值或只有一个确定值或两个都没有确定值.

(3) 三个角动量分量及角动量平方可能取值

	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦	⑧
M^2	√	√	√	√	×	×	×	×
M_x	√	×	×	×	√	×	×	×
M_y	×	√	×	×	×	√	×	×
M_z	×	×	√	×	×	×	√	×

$\underbrace{① ② ③}_{\mathrm{I}}$ ④ II $\underbrace{⑤ ⑥ ⑦}_{\mathrm{III}}$ ⑧ IV

跳至13

例1: $\hat{H}, (\Psi_{3d_{+2}})^1 \quad l=2, m=2$

$$M_l^2 = 6\hbar^2; \quad M_{lz} = 2\hbar$$ 两者同时有确定值

例2: $\hat{H}, (\Psi_{2p_x})^1 \quad l=1, m=+1,-1$

$$M_l^2 = l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$$ 有确定值

$$M_{lz} = \hbar \ \ or -\hbar$$ 没有确定值

例3: $$\Psi = c_1\Psi_{3d_{-1}} + c_2\Psi_{3p_{-1}}$$

***H*,**

$$M_l^2 = 6\hbar^2 \ \ or\ 2\hbar^2$$ 无确定值

$$M_{lz} = -\hbar$$ 有确定值

例4: $\Psi = c_1\Psi_{2s} + c_2\Psi_{3p_{-1}}$

$$\left.\begin{aligned} M_l^2 &= 0 \ \ or \ 2\hbar^2 \\ M_{lz} &= 0 \ \ or -\hbar \end{aligned}\right\} \text{均无确定值}$$

综上分析，对于H原子体系，电子处于不同的状态，相应的M_l^2和M_{lz}的取值出现了四种状态：

①M_l^2和M_{lz}同时有确定值；

②仅M_{lz}有确定值；

③仅M_l^2有确定值；

④两者均无确定值。

$[\hat{M}_l^2, \hat{M}_{lz}] = 0$

4.1.5 角动量算符的本征值和本征函数

(1) $\hat{M}^2$ 的本征值和本征函数

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2$$

$$= -\hbar^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right]$$

在球极坐标系中，类氢离子体系中的电子绕核运动的**轨道角动量平方的算符形式**为：

$$\boxed{\hat{M}_l^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]}$$

$$\hat{M}_l^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

显然, 只与 θ,φ 相关，与 r 无关。

$$\hat{M}_l^2 Y_{l,m}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

由此可知 $\hat{M}_l^2$ 的本征值为 $l(l+1)\hbar^2$，本征函数为 $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

l = 0, 1, 2, ….,　　　m = 0,±1,±2,±3,…

$$\hat{M}_l^2 Y_{l,m}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

角度波函数

上述方程两边各乘$R(r)$，则得：

$$\hat{M}_l^2 \Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 \Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$$

轨道波函数

自旋波函数

上述方程两边各乘$\eta(m_s)$，则得：

$$\hat{M}_l^2 \Psi_{n,l,m,m_s}(r,\theta,\varphi,q) = l(l+1)\hbar^2 \Psi_{n,l,m,m_s}(r,\theta,\varphi,q)$$

完全波函数

结论： $\Psi_{n,l,m,m_s}(r,\theta,\varphi,q)$、$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$、$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

都是$\hat{M}_l^2$的本征函数，本征值为$l(l+1)\hbar^2$

$$\Phi_{|m|}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i|m|\varphi}$$

(2) $\hat{M}_z$ 的本征值和本征函数

$$\hat{M}_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

在球极坐标系中，类氢离子体系中的电子绕核运动的**轨道角动量在z轴分量的算符**形式为：$\boxed{\hat{M}_{lz}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}}$

显然, 只与 φ 相关, 与 r,θ 无关.

$$\boxed{\hat{M}_{lz}\Phi_m(\varphi)=m\hbar\Phi_m(\varphi)}$$

由此可知 $\hat{M}_{lz}$ 的本征值为 $m\hbar$ ，本征函数为 $\Phi_m(\varphi)$

m = 0, ±1, ±2, ±3,…

$$\boxed{\hat{M}_{lz}\Phi_m(\varphi)=m\hbar\,\Phi_m(\varphi)}$$

两边乘上与 φ 无关的 $\Theta(\theta)$ 函数得到 $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ 也是 $\hat{M}_{lz}$ 的本征函数,

$$\boxed{\hat{M}_{lz}Y_{l,m}(\theta,\varphi)=m\hbar\,Y_{l,m}(\theta,\varphi)}$$

两边各乘 $R(r)$，则 $\boxed{\hat{M}_{lz}\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)=m\hbar\,\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)}$

两边各乘 $\eta(m_s)$，则 $\boxed{\hat{M}_{lz}\Psi_{n,l,m,m_s}(r,\theta,\varphi,q)=m\hbar\,\Psi_{n,l,m,m_s}(r,\theta,\varphi,q)}$

结论： $\Psi_{n,l,m,m_s}(r,\theta,\varphi,q)$、$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$、$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$、$\Phi_m(\varphi)$

都是 $\hat{M}_{lz}$ 的本征函数，本征值为 $m\hbar$

(3)对于**轨道波函数** $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$ 而言，存在以下本征方程:

$$\hat{H}\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = E\,\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = -13.6\frac{z^2}{n^2}\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$$

$$\hat{M}_l^2\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$$

$$\hat{M}_{lz}\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = m\hbar\,\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$$

结论: $\{\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)\}$ 则是 $\hat{H},\hat{M}_l^2,\hat{M}_{lz}$ 共同的本征函数完备集.

推测一下，三个算符间的对易关系?

目录

4.2 角动量的阶梯算符法

以 $\hat{M}$ 代表任一角动量算符,

$\hat{M}_x$ 、$\hat{M}_y$ 和 $\hat{M}_z$分别代表 *x*, *y*, *z* 方向的分量算符,

则: $\hat{M}^2=\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2+\hat{M}_z^2$

无论是轨道角动量还是自旋角动量，它们的分量算符两两不对易,

但分量算符与角动量平方算符都对易。

$$\boxed{\begin{aligned}\left[\hat{M}_x,\hat{M}_y\right]&=i\hbar\hat{M}_z\\ \left[\hat{M}_y,\hat{M}_z\right]&=i\hbar\hat{M}_x\\ \left[\hat{M}_z,\hat{M}_x\right]&=i\hbar\hat{M}_y\end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\left[\hat{M}^2,\hat{M}_x\right]&=0\\ \left[\hat{M}^2,\hat{M}_y\right]&=0\\ \left[\hat{M}^2,\hat{M}_z\right]&=0\end{aligned}}$$

后21

如果 $\vec{M}$ 指的是**轨道角动量**，

大小 $\lvert\vec{M}_l\rvert=\sqrt{l(l+1)}\hbar$； z方向的分量 $M_{lz}=m\hbar$

l **–角量子数**

m **–磁量子数**

(*m* = -*l*, … +*l*)

如果 $\vec{M}$ 指的是**自旋角动量**，

大小 $\lvert\vec{M}_S\rvert=\sqrt{s(s+1)}\hbar$； z方向的分量 $M_{S_Z}=m_S\hbar$

s **–自旋量子数**

m_s **–自旋磁量子数**

对单个单子， S=1/2

m_s= -1/2, 1/2

角动量的大小及其在z方向的分量的取值规律是一样的。

$\vec{M}$为任一角动量，则其大小及z方向的分量为：

$$|\vec{M}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar \qquad M_z = m_j\hbar$$

?

j –角动量量子数

m_j –角动量磁量子数

m_j = -j, …, +j

假设体系所处状态为Ψ

$$\hat{M}^2\Psi = j(j+1)\hbar^2\Psi$$

$$\hat{M}_z\Psi = m_j\hbar\Psi$$

$$\hat{M}^2\Psi = c\Psi$$

$$\hat{M}_z\Psi = b\Psi$$

$$c = j(j+1)\hbar^2$$

$$b = m_j\hbar$$

(此乃本节要求证的目标)

4.2.1 阶梯算符的定义及性质

递升算符 $\hat{M}_+ = \hat{M}_x + i\hat{M}_y$

递降算符 $\hat{M}_- = \hat{M}_x - i\hat{M}_y$

统称“阶梯算符”

阶梯算符性质：

1）阶梯算符间不对易

2）$\hat{M}_z$ 分别与 $\hat{M}_+$ 和 $\hat{M}_-$ 不对易

自习

阶梯算符性质：

1）阶梯算符间不对易 $[\hat{M}_-,\hat{M}_+]\neq 0$

$$\hat{M}_+\hat{M}_- = (\hat{M}_x+i\hat{M}_y)(\hat{M}_x-i\hat{M}_y)$$

$$=\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2-i(\underline{\hat{M}_x\hat{M}_y-\hat{M}_y\hat{M}_x})$$

$$=\underline{\hat{M}^2-\hat{M}_z^2}-i\left[\hat{M}_x,\hat{M}_y\right]$$

$$=\hat{M}^2-\hat{M}_z^2+\hbar\hat{M}_z$$

同理：$\hat{M}_-\hat{M}_+=\hat{M}^2-\hat{M}_z^2-\hbar\hat{M}_z$

后33

2） $\boxed{\hat{M}_z \text{ 分别与 } \hat{M}_+ \text{ 和 } \hat{M}_- \text{ 不对易}}$

$$[\hat{M}_+,\hat{M}_z] = [\hat{M}_x + i\hat{M}_y, \hat{M}_z]$$

$$= [\hat{M}_x,\hat{M}_z] + [i\hat{M}_y,\hat{M}_z]$$

$$= -i\hbar\hat{M}_y - \hbar\hat{M}_x = -\hbar\hat{M}_+$$

$$\boxed{\hat{M}_+\hat{M}_z = \hat{M}_z\hat{M}_+ - \hbar\hat{M}_+} \quad \text{(a)}$$

同理： $[\hat{M}_-,\hat{M}_z] = +\hbar\hat{M}_-$

$$\boxed{\hat{M}_-\hat{M}_z = \hat{M}_z\hat{M}_- + \hbar\hat{M}_-} \quad \text{(b)}$$

后33

4.2.2 阶梯算符的作用

(1) 阶梯算符对角动量平方算符 $\hat{M}^2$ 的影响

在 $\boxed{\hat{M}^2\Psi = c\Psi}$ 基础上，用 $\hat{M}_-$ 作用 $\Psi \longrightarrow \boxed{\hat{M}_-\Psi}$

运用算符运算规则，可以得到：$\hat{M}^2(\hat{M}_-\Psi) = c(\hat{M}_-\Psi)$

类似地 $\hat{M}^2(\hat{M}_-^2\Psi) = c(\hat{M}_-^2\Psi)$ ……

结论: 用递升算符和递降算符作用于函数Ψ 后，

也是$\hat{M}^2$ 的本征函数，但本征值相同，均为c：

$$\boxed{\hat{M}^2(\hat{M}_\pm^k\Psi) = c(\hat{M}_\pm^k\Psi)}$$

$$\hat{M}^2(\hat{M}_-\Psi) = \hat{M}^2(\hat{M}_x - i\hat{M}_y)\Psi = (\hat{M}^2\hat{M}_x - i\hat{M}^2\hat{M}_y)\Psi$$

$$= (\hat{M}^2\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}^2 + \hat{M}_x\hat{M}^2 - i\hat{M}^2\hat{M}_y + i\hat{M}_y\hat{M}^2 - i\hat{M}_y\hat{M}^2)\Psi$$

$$= \{\cancel{[\hat{M}^2,\hat{M}_x]} + \hat{M}_x\hat{M}^2 - i\cancel{[\hat{M}^2,\hat{M}_y]} - i\hat{M}_y\hat{M}^2\}\Psi$$

$$= (\hat{M}_x\hat{M}^2 - i\hat{M}_y\hat{M}^2)\Psi$$

$$\boxed{\hat{M}^2\Psi = c\Psi}$$

$$= (\hat{M}_x c - i\hat{M}_y c)\Psi$$

$$= c(\hat{M}_-\Psi)$$

(2) 阶梯算符对角动量z分量算符 $\hat{M}_z$ 的影响

在 $\boxed{\hat{M}_z\Psi = b\Psi}$ 基础上，用 $\hat{M}_-$ 作用 $\Psi \longrightarrow \boxed{\hat{M}_-\Psi}$

运用算符运算规则，可以得到：

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-\Psi) = (b-\hbar)(\hat{M}_-\Psi)$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-^2\Psi) = (b-2\hbar)(\hat{M}_-^2\Psi)$$

$$\vdots$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-^k\Psi) = (b-k\hbar)(\hat{M}_-^k\Psi)$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-\Psi)=\hat{M}_z(\hat{M}_x-i\hat{M}_y)\Psi=(\hat{M}_z\hat{M}_x-i\hat{M}_z\hat{M}_y)\Psi$$

$$=(\hat{M}_z\hat{M}_x-\hat{M}_x\hat{M}_z+\hat{M}_x\hat{M}_z-i\hat{M}_z\hat{M}_y+i\hat{M}_y\hat{M}_z-i\hat{M}_y\hat{M}_z)\Psi$$

$$=\{[\hat{M}_z,\hat{M}_x]+\hat{M}_x\hat{M}_z+i[\hat{M}_y,\hat{M}_z]-i\hat{M}_y\hat{M}_z\}\Psi$$

$$=(i\hbar\hat{M}_y+\hat{M}_x\hat{M}_z-\hbar\hat{M}_x-i\hat{M}_y\hat{M}_z)\Psi$$

$$=(i\hbar\hat{M}_y+b\hat{M}_x-\hbar\hat{M}_x-ib\hat{M}_y)\Psi$$

$$\boxed{\hat{M}_z\Psi=b\Psi}$$

$$=(b-\hbar)(\hat{M}_x-i\hat{M}_y)\Psi$$

$$=(b-\hbar)(\hat{M}_-\Psi)$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_+\Psi)=(b+\hbar)(\hat{M}_+\Psi)$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_+^2\Psi)=(b+2\hbar)(\hat{M}_+^2\Psi)$$

⋮

$$\hat{M}_z(\hat{M}_+^k\Psi)=(b+k\hbar)(\hat{M}_+^k\Psi)$$

从中体现了阶梯的概念

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-\Psi)=(b-\hbar)(\hat{M}_-\Psi)$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-^2\Psi)=(b-2\hbar)(\hat{M}_-^2\Psi)$$

⋮

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-^k\Psi)=(b-k\hbar)(\hat{M}_-^k\Psi)$$

阶梯的概念

$$b_k=b\pm k\hbar$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_+^k\Psi)=(b+k\hbar)(\hat{M}_+^k\Psi)$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-^k\Psi)=(b-k\hbar)(\hat{M}_-^k\Psi)$$

用递升和递降算符作用于函数 Ψ 后，依然是 $\hat{M}_z$ 的本征函数，且给出一个本征值的阶梯，每步之差为 $\hbar$.

b_k系列的取值是否有极限呢？

对于Ψ状态，用递升或递降算符作用k次后的状态$\hat{M}_{\pm}^{k}\Psi$，考察下列方程：

$$\boxed{\begin{aligned}(\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2)(\hat{M}_{\pm}^{k}\Psi) &= (\hat{M}^2-\hat{M}_z^2)(\hat{M}_{\pm}^{k}\Psi)\\ &= [c-b_k^2](\hat{M}_{\pm}^{k}\Psi)\end{aligned}}$$

算符 $\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2$ 对应一个非负的物理量，

因而有非负的本征值，即 $c-b_k^2 \geqslant 0$

则：$\boxed{|b_k| \le \sqrt{c}, \quad k=0,1,2,\cdots}$ 该式表明 b_k是有上下限的。

令 $b_{\max}$ 和 $b_{\min}$分别表示b_k系列极大值和极小值，

对应的本征函数为Ψ_{max}和Ψ_{min}，

则：
$$\begin{cases} \hat{M}_z \Psi_{\max} = b_{\max} \Psi_{\max} \\ \hat{M}_z \Psi_{\min} = b_{\min} \Psi_{\min} \end{cases}$$

用 $\hat{M}_+$ 作用于Ψ若干次后的波函数

用 $\hat{M}_-$ 作用于Ψ若干次后的波函数

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-^k \Psi) = (b - k\hbar)(\hat{M}_-^k \Psi)$$
$$\hat{M}_z(\hat{M}_+^k \Psi) = (b + k\hbar)(\hat{M}_+^k \Psi)$$

可以证明：$\boxed{\left(\hat{M}^2-\hat{M}_z^2-\hbar\hat{M}_z\right)\Psi_{\max}=0}$

自习

则：$\left(c-b_{\max}^2-\hbar b_{\max}\right)\Psi_{\max}=0$

则：$c-b_{\max}^2-\hbar b_{\max}=0$ 显然 $\boxed{c=b_{\max}^2+\hbar b_{\max}}$ **(1)**

后

同理可以证明：$\boxed{\left(\hat{M}^2-\hat{M}_z^2+\hbar\hat{M}_z\right)\Psi_{\min}=0}$

比较

则：$\left(c-b_{\min}^2+\hbar b_{\min}\right)\Psi_{\min}=0$

则：$c-b_{\min}^2+\hbar b_{\min}=0$ 显然 $\boxed{c=b_{\min}^2-\hbar b_{\min}}$ **(2)**

$$\hat{M}_z \Psi_{\max} = b_{\max} \Psi_{\max}$$

$$\hat{M}_+ \hat{M}_z \Psi_{\max} = b_{\max} \hat{M}_+ \Psi_{\max}$$

利用(a): $\hat{M}_+ \hat{M}_z = \hat{M}_z \hat{M}_+ - \hbar \hat{M}_+$

可得： $\hat{M}_z (\hat{M}_+ \Psi_{\max}) = (b_{\max} + \hbar)(\hat{M}_+ \Psi_{\max})$

$$\hat{M}_+ \Psi_{\max} = 0$$

$$\hat{M}_- \hat{M}_+ \Psi_{\max} = 0$$

$$\left(\hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 - \hbar \hat{M}_z \right) \Psi_{\max} = 0$$

比较(1)和(2)可知，$b_{max}^2 + \hbar b_{max} = b_{min}^2 - \hbar b_{min}$

$$\Rightarrow (b_{min} + b_{max})(b_{min} - b_{max} + \hbar) = 0$$

则得两个解：
$$\begin{cases} \boxed{b_{max} = -b_{min}} & (3) \\ b_{max} = b_{min} - \hbar & \text{（不合理，去除）} \end{cases}$$

基于 b_{max}和 b_{min}的差为 $\hbar$ 的整数倍，即：

$$b_{max} - b_{min} = n\hbar \quad n = 0, 1, 2, \cdots \qquad (4)$$

$$\Rightarrow \boxed{b_{max} = \frac{1}{2} n\hbar, \quad b_{min} = -\frac{1}{2} n\hbar}$$

$$b_{\max}=\frac{1}{2}n\hbar\,,\qquad b_{\min}=-\frac{1}{2}n\hbar$$

引入量子数 $\boxed{j=n/2=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\cdots}$

则： $b_{\max}=j\hbar,\qquad b_{\min}=-j\hbar$ (5)

则： $\boxed{b=-j\hbar,(-j+1)\hbar,\cdots,(j-1)\hbar,j\hbar}$

即： $\boxed{b=m_j\hbar\qquad m_j=-j,(-j+1),\cdots,(j-1),j}$ (6)

将(5)代入(1) 或(2)，可得： $\boxed{c=j(j+1)\hbar^2}$ (7)

代表 l 或 s

$$\hat{M}^2\Psi = j(j+1)\hbar^2\Psi$$

$$\hat{M}_z\Psi = m_j\hbar\Psi$$

$$m_j = -j, (-j+1), \cdots, (j-1), j$$

角动量量子数

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$$

可能值

代表 m 或 m_s

例如：l =0,1,2,…n-1

s=1/2

综上，我们用算符间的对易关系得到了轨道或自旋角动量平方算符 $\hat{M}^2$和分量算符 $\hat{M}_z$ 的本征值，验证了前面所得的结果。

Thank you for your attentation!

目录