§8 角动量算符和角动量表象

§8.1 几种角动量算符

一、几种角动量

1. 轨道角动量

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k$$

2. 自旋角动量

自旋角动量没有经典对应，同这个粒子的位置和动量没有任何关系。人们根据自旋角动量与轨道角动量具有相类似的物理性质，作出了以下假定：

（1）分量满足相似的对易关系

$$[S_i, S_j] = i\hbar\sum_k \varepsilon_{ijk} S_k$$

（2）粒子自旋角动量各分量算符与粒子的位置及动量算符均对易

这是一个新的假设，是五条基本原理推不出来的，可以将其补充到有关对易关系的原理3中。这样就产生了总角动量概念。

3. 总角动量

两个含义： $J = L + S$ $\quad\quad J = J_1 + J_2$

设总角动量为 $J = J^{(1)} + J^{(2)}$

下面求其对易关系。

首先根据原理3，不论 $J^{(1)}, J^{(2)}$代表什么角动量，都有

$$[J^{(1)}, J^{(2)}] = 0$$

即二者的任意分量都对易。

以$J = L + S$为例证明如下：

$$[J_i, J_j] = [L_i + S_i, L_j + S_j] = [L_i, L_j] + [S_i, S_j]$$

$$= i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k + i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k$$

$$= i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} (L_k + S_k) = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} J_k$$

同样任意多角动量算符和都服从该对易关系。

二、总角动量及其z分量算符的本征值与本征函数

已知 $$[J^2, \vec{J}] = 0$$

则 $$[J^2, J_z] = 0$$

这样 J^2, J_z 有共同的本征矢量完全组，

设为 $|\lambda m>$ ，则有

$$J^2 |\lambda m> = \lambda \hbar^2 |\lambda m>$$

$$J_z |\lambda m> = m\hbar |\lambda m>$$

本征值为此形式保证了λ, m是无量纲的数。

在初等量子力学中，我们利用升降算符的定义 $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ 求得了本征值，即有

$$J^2 \mid jm >= j(j+1)\hbar^2 \mid \lambda m >$$

$$J_z \mid jm >= m\hbar \mid jm >$$

且有

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

$$m = -j, -j+1, \cdots, j-1, j$$

通常情况下，J^2, J_z的本征矢量写成 $\mid jm_j >$，L^2, L_z的本征矢量写为$\mid lm_l >$，而自旋 S^2, S_z 的本征矢量写成$\mid sm_s >$。

有时也分别写为$|jm>$, $|lm>$, $|sm>$.

而升降算符对态矢量$|jm>$的作用可以写为

$$J_{\pm}|jm>=\sqrt{(j\pm m+1)(j\mp m)}\hbar|jm\pm 1>$$

重要！后面要用到。

由于$|jm>$是一组对易的厄米算符的共同本征矢量，必须满足正交归一关系

$$<j'm'|jm>=\delta_{j'j}\delta_{m'm}$$

此式对轨道角动量、自旋角动量或其它角动量的本征矢量都成立。

#

§8.2 轨道角动量算符和方向算符

一、轨道角动量算符和方向算符的对易关系

1. 方向算符的有关定义

令方向算符

$$\vec{N} = \frac{\vec{R}}{R}$$ (单位算符)

且分量满足

$$N_x^2 + N_y^2 + N_z^2 = 1$$

定义 $$N_\pm = N_x \pm iN_y$$

则有 $$N_+N_- = N_-N_+ = N_x^2 + N_y^2$$

或 $$N_z^2 = 1 - N_+N_-$$

2. 方向算符 $\vec{N}$ 与轨道角动量算符 $\vec{L}$ 之间的关系

利用公式

$$[L_i, N_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} N_k$$

很容易得出 $[L_{\pm,z}, N_{\pm,z}]$ 的相关对易关系：

$$[L_+, N_+] = 0, \quad [L_-, N_+] = -2\hbar N_z$$

$$[L_z, N_+] = \hbar N_+$$

$$[L_+, N_-] = 2\hbar N_z, \quad [L_-, N_-] = 0$$

$$[L_z, N_-] = -\hbar N_-$$

$$[L_+, N_z] = -\hbar N_+, \quad [L_-, N_z] = \hbar N_-$$

$$[L_z, N_z] = 0$$

另外，利用前面所学的公式

$$[L^2,\vec{A}]=2i\hbar\vec{A}\times\vec{L}-2(i\hbar)^2\vec{A}$$

容易得出

$$[L^2,\vec{N}]=2i\hbar\vec{N}\times\vec{L}-2(i\hbar)^2\vec{N}$$

二、方向算符对轨道角动量本征矢量的作用

1. 对$|ll\rangle,|l,-l\rangle$的作用

利用 $L^2=L_x^2+L_y^2+L_z^2,\ N_+=N_x+iN_y$

及$[L_{\pm,z},N_{\pm,z}]$的相关对易关系，容易证明

$$[L^2,N_+]=2\hbar(N_+L_z-N_zL_+)+2\hbar^2N_+$$

$$[L_z,N_+]=\hbar N_+$$

$$[L^2, N_+] = 2\hbar(N_+ L_z - N_z L_+) + 2\hbar^2 N_+$$

$$[L_z, N_+] = \hbar N_+$$

以上两式两边作用到$|ll>$上，有　　注意：$L_+ |ll> = ?$

$$L^2 N_+ |ll> - l(l+1)\hbar^2 N_+ |ll> = 2l\hbar N_+ |ll> + 2\hbar^2 N_+ |ll>$$

$$L_z N_+ |ll> - l\hbar N_+ |ll> = \hbar N_+ |ll>$$

或

$$L^2 N_+ |ll> = (l+1)(l+2)\hbar^2 N_+ |ll>$$

$$L_z N_+ |ll> = (l+1)\hbar N_+ |ll>$$

由此可见，$N_+ |ll>$也是 L^2与 L_z 的本征矢量，本征值分别为 $(l+1)(l+2)\hbar^2$及$(l+1)\hbar$，相应的量子数为 $l' = l+1, m' = l+1$

故 $N_+|ll>$可以写为下列形式：

$$N_+|ll>=c_+|l'm'>=c_+|l+1,l+1>$$

同样考虑 $N_z|ll>, N_-|l,-l>$和 $N_z|l,-l>$ ，得

$$N_z|ll>=c_z|l+1,l>$$

$$N_-|l,-l>=c_-|l+1,-(l+1)>$$

$$N_z|l,-l>=c'_z|l+1,-l>$$

其中c都是归一化常数，与l有关。

通过推导，最后可以得到

$$N_+ |ll> = -\sqrt{\frac{2l+2}{2l+3}}\,|l+1, l+1>$$

$$N_z |ll> = \sqrt{\frac{1}{2l+3}}\,|l+1, l>$$

$$N_- |l,-l> = \sqrt{\frac{2l+2}{2l+3}}\,|l+1, -(l+1)>$$

$$N_z |l,-l> = \sqrt{\frac{1}{2l+3}}\,|l+1, -l>.$$

#

2. 对|lm>的作用

这是我们最关心的问题，为此证明公式

$$[L_-^k, N_z] = k\hbar L_-^{k-1} N_-$$

[证]用数学归纳法。

（1）当k=1时，$[L_-, N_z] = \hbar N_-$显然成立

（2）当k=n时成立，即

$$[L_-^n, N_z] = n\hbar L_-^{n-1} N_-$$

则 $$[L_-^{n+1}, N_z] = [L_- L_-^n, N_z]$$

$$= L_-[L_-^n, N_z] + [L_-, N_z]L_-^n$$

$$= L_- n\hbar L_-^{n-1} N_- + \hbar N_- L_-^n$$

$$= L_- n\hbar L_-^{n-1} N_- + \hbar N_- L_-^n$$

$$= n\hbar L_-^n N_- + \hbar N_- L_-^n \qquad \because [L_-, N_-] = 0$$

$$= (n+1)\hbar L_-^{(n+1)-1} N_-$$

即当k=n+1时也成立。

（3）综合（1）（2），原式对任何正整数k都成立，即

$$[L_-^k, N_z] = k\hbar L_-^{k-1} N_-$$

利用这个公式，可以写出

$$N_z L_-^k | ll >= L_-^k N_z | ll > -k\hbar L_-^{k-1} N_- | ll >$$

$$N_z L_-^k |ll> = L_-^k N_z |ll> - k\hbar L_-^{k-1} N_- |ll>$$

已经知道 $N_z |ll> = \sqrt{\frac{1}{2l+3}} |l+1, l>$

利用公式

$$J_\pm | jm> = \sqrt{(j \pm m+1)(j \mp m)}\hbar | jm \pm 1>$$

可以算出

$$L_-^k |ll> = \sqrt{2\cdot 3\cdot 4 \cdots\cdots k\cdot 2l \cdot (2l-1)\cdot (2l-2)\cdot}$$

$$\sqrt{\cdots\cdots (2l-k+1)}\hbar^k |lm>, \quad m = l-k$$

在第一式中，$L_-^k |l+1, l>$ 可用同样方法算出。

现在关键问题是求 $N_- |ll>$ 。

为此用 $[L_-, N_z] = \hbar N_-$ 作用于 $|ll>$ 上

$$(L_-N_z - N_zL_-)\,|\,ll> = \hbar N_-\,|\,ll>$$

得

$$\hbar N_-\,|\,ll> = L_-\sqrt{\frac{1}{2l+3}}\,|\,l+1,l> - \sqrt{2l}\,\hbar N_z\,|\,l,l-1>$$

对于新出现的 $N_z\,|\,l,l-1>$，只要再求出一个式子包含 $N_-\,|\,ll>, N_z\,|\,l,l-1>$ 就好办了。

分析发现，让 $N_z^2 = 1 - N_-N_+$ 作用于 $|\,l-1,l-1>$ 上就可以。即

$$N_z \cdot N_z\,|\,l-1,l-1> = |\,l-1,l-1> - N_-N_+\,|\,l-1,l-1>$$

$$N_z \cdot N_z\,|\,l-1,l-1> = |\,l-1,l-1> - N_- N_+\,|\,l-1,l-1>$$

利用 $\begin{cases} N_+\,|\,ll> = -\sqrt{\dfrac{2l+2}{2l+3}}\,|\,l+1,l+1> \\ N_z\,|\,ll> = \sqrt{\dfrac{1}{2l+3}}\,|\,l+1,l> \end{cases}$ 则有

$$\sqrt{\frac{1}{2l+1}}N_z\,|\,l,l-1> = |\,l-1,l-1> + \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}N_-\,|\,l,l>$$

与前面得到的式子

$$\hbar N_-\,|\,ll> = L_-\sqrt{\frac{1}{2l+3}}\,|\,l+1,l> - N_z\sqrt{2l}\hbar\,|\,l,l-1>$$

联立，得

$$N_z|l,l-1>=\sqrt{\frac{4l}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1,l-1>+\sqrt{\frac{1}{2l+1}}|l,l-1>$$

$$N_-|ll>=\sqrt{\frac{2}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1,l-1>-\sqrt{\frac{1}{2l+1}}|l-1,l-1>$$

对 $$N_zL_-^k|ll>=L_-^kN_z|ll>-k\hbar L_-^{k-1}N_-|ll>$$

现在知道了$L_-^k|ll>\sim|lm>$,

而且 $$N_z|ll>=c_z|l+1,l>$$

$$N_-|ll>=\sqrt{\frac{2}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1,l-1>-\sqrt{\frac{1}{2l+1}}|l-1,l-1>$$

则 $L_-^kN_z|ll>,L_-^{k-1}N_-|ll>$就很容易算出了(练习)。

这样就有

$$N_z|lm>=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1,m>$$

$$+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}|l-1,m>$$

下面看 $N_\pm$ 对 $|lm>$ 的作用：

由$\hbar N_\pm=\mp[L_\pm,N_z]$得

$$\hbar N_\pm|lm>=\mp(L_\pm N_z|lm>-N_zL_\pm|lm>)$$

知道了$L_\pm|lm>,N_z|lm>$ 的作用表达式，很容易得出 $N_\pm|lm>$：

$$N_\pm |lm> = \mp\sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\,|l+1, m\pm 1>$$

$$\pm\sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\,|l-1, m\pm 1>$$

上式与下式

$$N_z |lm> = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\,|l+1, m>$$

$$+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\,|l-1, m>$$

就是方向算符N对轨道角动量本征矢量|*lm*>的作用结果, 它们在以后公式推导中很有用。

§ 8.3 量子数l的升降算符

一、升降算符的寻找

根据讨论升降算符的经验，若R（不是矢径）是使$|lm>$中l改变1而m保持不变的算符，则可令

$$R|lm> = c|l\pm 1, m>,$$

这样就有

$$[L_z, R]|lm> = L_z R|lm> - RL_z|lm>$$

$$= cL_z|l\pm 1, m> - m\hbar R|lm>$$

$$= cm\hbar|l\pm 1, m> - cm\hbar|l\pm 1, m>$$

$$= 0$$

故可证明 $[\boldsymbol{L}_z, \boldsymbol{R}] = 0$ 对体系任意态矢量都成立。

同理 $[L^2, R]|lm\rangle = L^2R|lm\rangle - RL^2|lm\rangle$

$$= ca\hbar^2 |l\pm1, m\rangle \quad \text{令} \begin{cases} a = 2(l+1) & \text{if "+"} \\ a = -2l, & \text{if "−"} \end{cases}$$

$$= a\hbar^2 R|lm\rangle$$

即 L^2, L_z, R 之间 满足下列对易关系

$$[L_z, R] = 0$$

$$[L^2, R] = a\hbar^2 R$$

注意到当a=2(l+1)时，利用上式可得

$$L^2R|lm\rangle = RL^2|lm\rangle + a\hbar^2R|lm\rangle$$

$$= Rl(l+1)\hbar^2|lm\rangle + 2(l+1)\hbar^2R|lm\rangle$$

$$= (l+1)(l+2)\hbar^2R|lm\rangle$$

当a=-2l 时， $L^2R|lm\rangle = (l-1)l\hbar^2R|lm\rangle$

$$L^2 R|lm> = (l+1)(l+2)\hbar^2 R|lm> \qquad a = 2(l+1)$$

$$L^2 R|lm> = (l-1)l\hbar^2 R|lm> \qquad a = -2l$$

利用上述本征方程的意义，可以将R|*lm*>写为

$$R|lm> = \begin{cases} |l+1,m>, & \text{if } a = 2(l+1) \\ |l-1,m>, & \text{if } a = -2l \end{cases}$$

可见R对于|*lm*>的作用有关于量子数*l*上升算符和下降算符的性质。

设R的作用中上升算符部分仍记为R，下降算符部分则记为Q，由前面给出的原始R对易式

$$[L_z, R] = 0$$

$$[L^2, R] = a\hbar^2 R$$

$$[L_z, R] = 0$$

$$[L^2, R] = a\hbar^2 R$$

则有

$$[L_z, R] = 0, \quad [L^2, R] = 2(l+1)\hbar^2 R$$ 上升算符

$$[L_z, Q] = 0, \quad [L^2, Q] = -2l\hbar^2 Q$$ 下降算符

下面看R,Q到底是什么形式。

注意方向算符N与L^2的对易关系：

$$[L^2, \vec{N}] = 2i\hbar \vec{N} \times \vec{L} - 2(i\hbar)^2 \vec{N}$$

与式 $[L^2, R] = 2(l+1)\hbar^2 R$ 比较，形式上多了第一项。

说明算符R中似应该含有 $\vec{N} \times \vec{L}$ 项和 $\vec{N}$ 项。

若如此，如何处理 $\vec{L}^2$ 与 $\vec{N} \times \vec{L}$ 的对易关系？

我们发现，由式$[L^2,\vec{A}\times\vec{L}]=-2i\hbar AL^2$可得

$$[L^2,\vec{N}\times\vec{L}]=-2i\hbar\vec{N}L^2$$

现在将其与式 $[L^2,R]=2(l+1)\hbar^2 R$ 进行比较。

通过比较可以看出，若取一个矢量 $\vec{R}=b\vec{N}\times\vec{L}+c\vec{N}$

选择适当的b,c，有可能使R满足式

$$[L_z,R]=0,\quad [L^2,R]=2(l+1)\hbar^2 R$$

经试验发现 $\vec{R}(l)=\frac{i}{\hbar}\vec{N}\times\vec{L}+(l+1)\vec{N}$ 正好满足上式。

而 $\vec{Q}(l)=\frac{i}{\hbar}\vec{N}\times\vec{L}-l\vec{N}$ 正好满足

$$[L_z,Q]=0,\quad [L^2,Q]=-2l\hbar^2 Q$$

比如对 Q_z 分量，因为$\vec{Q}(l)=\frac{i}{\hbar}\vec{N}\times\vec{L}-l\vec{N}$ ，则有

$$[L_z,Q_z]=[L_z,\frac{i}{\hbar}(N_xL_y-N_yL_x)-lN_z]$$

$$=\frac{i}{\hbar}[L_z,N_xL_y]-\frac{i}{\hbar}[L_z,N_yL_x]-l[L_z,N_z]$$

$$=\frac{i}{\hbar}\{N_x[L_z,L_y]+[L_z,N_x]L_y\}-\frac{i}{\hbar}\{N_y[L_z,L_x]+[L_z,N_y]L_x\}-l[L_z,N_z]$$

$$[L_z,N_z]=0$$

$$=\frac{i}{\hbar}(-i\hbar N_xL_x+i\hbar N_yL_y-i\hbar N_yL_y+i\hbar N_xL_x)$$

$$=0$$

当然可以验证，R_x,Q_x 等不满足上式对易式。所以 R_z,Q_z 正是我们要寻找的 $|lm>$ 的量子数 l 的上升和下降算符。

#

二、算符R,Q各分量对|lm>的作用

令 $$R_{\pm}(l)=R_x(l)\pm iR_y(l),\quad Q_{\pm}(l)=Q_x(l)\pm iQ_y(l)$$

估计与升降算符有关。

很容易证明

$$[L_z,R_{\pm}(l)]=\pm\hbar R_{\pm}(l),\quad [L^2,R_{\pm}(l)]=2(l+1)\hbar^2R_{\pm}(l)$$

$$[L_z,Q_{\pm}(l)]=\pm\hbar Q_{\pm}(l),\quad [L^2,Q_{\pm}(l)]=-2l\hbar^2Q_{\pm}(l)$$

例如证明第一式

$$\begin{aligned}[L_z,R_{\pm}(l)]&=[L_z,R_x\pm iR_y]\\&=[L_z,R_x]\pm i[L_z,R_y]\\&=i\hbar R_y\pm i(-i\hbar)R_x\\&=\pm\hbar(R_x\pm iR_y)\\&=\pm\hbar R_{\pm}(l)\end{aligned}$$

同我们意料到的一样，$R_\pm(l), Q_\pm(l)$ 分别是l的上升和下降算符，而且 $R_+(l), Q_+(l)$分别是m的上升算符，$R_-(l), Q_-(l)$是m的下降算符，可用下述公式表示

$$R_z(l)|lm>=c_z|l+1,m>$$

$$R_\pm(l)|lm>=c_\pm|l+1,m\pm 1>$$

$$Q_z(l)|lm>=d_z|l-1,m>$$

$$Q_\pm(l)|lm>=d_\pm|l-1,m\pm 1>$$

以及前面所得到的公式

$$N_\pm|lm>=\mp\sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1,m\pm 1>$$

$$\pm\sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}|l-1,m\pm 1>$$

$$N_z|lm> = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1,m> + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}|l-1,m>$$

可用计算出R,Q对|*lm*>的作用结果。

特别提示：在求R,Q对|*lm*>的作用时，要用到下述已知的公式

（1）R,Q的分量表示；

（2）$L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ 以及对|*lm*>的作用公式；

（3）$N_{\pm} = N_x \pm iN_y$ 以及对|*lm*>的作用公式；

推导过程相对复杂一些，这里只给出结果：

$$R_z(l)|lm> = \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m+1)(l-m+1)}{2l+3}}\,|l+1,m>$$

$$Q_z(l)|lm> = \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)(l-m)}{2l-1}}\,|l-1,m>$$

$$R_\pm(l)|lm> = \mp\sqrt{\frac{(2l+1)(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{2l+3}}\,|l+1,m\pm 1>$$

$$Q_\pm(l)|lm> = \mp\sqrt{\frac{(2l+1)(l\mp m)(l\mp m-1)}{2l-1}}\,|l-1,m\pm 1>$$

#

§8.4 球谐函数

下面取位置表象，求轨道角动量本征矢量 $|lm>$的具体表达式。

一、位置表象中轨道角动量算符的表示

此时R，即 $\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3$ 成为相乘算符，$\hat{P} = -i\hbar\nabla$, 对 $\vec{L}$ 有

$$\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y = i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\hat{L}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z = i\hbar(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

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

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

方向算符N对态函数的作用是一个相乘算符

$$\hat{N}_x = \sin\theta\cos\varphi$$

$$\hat{N}_y = \sin\theta\sin\varphi$$

$$\hat{N}_z = \cos\theta$$

而 $$\hat{N}_\pm = \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

注意：以上这些算符等式，只有左右双方作用在任意态函数上才成立，而且都是对θ,φ部分作用的,与r无关；方向算符是相乘算符，作用起来很方便。

二、轨道角动量本征函数的计算

1. 本征函数所满足的基本方程

轨道角动量本征函数在位置表象中记为

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = <\theta\varphi \mid lm>$$

(L^2, L_z) 所满足的方程可记为

$$-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

通常方法是解上述微分方程得到 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$。但实际上知道了一个具体的 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$，利用升降算符作用即可得到其它了。

2. 本征函数的求解

（1）求 $Y_{00}(\theta,\varphi)$

取$l=m=0$, (L^2, L_z)所满足的方程就写为

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)Y_{00}(\theta,\varphi)=0$$

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{00}(\theta,\varphi)=0$$

容易看出第二式的通解为

$$Y_{00}(\theta,\varphi)=g(\theta)$$ （只对φ求导）

将此式代入第一式得

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}g(\theta)=0$$

此方程的通解为

$$g(\theta) = c_1 \ln(\mathrm{tg}\frac{\theta}{2}) + c_2$$

因为$Y(\theta,\varphi)$ 在$\theta = 0, \pi$ 附近有限，必须取 $c_1 = 0.$

所以 $g(\theta) = c_2$ ，即

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = c_2$$

利用归一化条件

$$\int_0^{\pi} \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} |Y_{00}(\theta,\varphi)|^2 \, \mathrm{d}\varphi = 1$$

很容易得到

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = c_2 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

利用方向算符$\hat{N}_+$可依次得出

$$Y_{11}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{2}}\hat{N}_+ Y_{00}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta e^{i\varphi}$$

$$Y_{22}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{5}{4}}\hat{N}_+ Y_{11}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}\sqrt{\frac{3\cdot 5}{2\cdot 4}}\sin^2\theta e^{2i\varphi}$$

$$Y_{33}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{7}{6}}\hat{N}_+ Y_{22}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\sqrt{\frac{3\cdot 5\cdot 7}{2\cdot 4\cdot 6}}\sin^3\theta e^{3i\varphi}$$

……

$$Y_{ll}(\theta,\varphi) = (-)^l\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(2l+1)!!}{(2l)!!}}\sin^l\theta e^{il\varphi}$$

$$= (-)^l\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\frac{1}{2^l l!}\sqrt{(2l+1)!}\sin^l\theta e^{il\varphi}$$

下面举例证明第一式。

利用
$$N_{\pm}|lm>=\mp\sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1,m\pm1>$$
$$\pm\sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}|l-1,m\pm1>$$

有
$$\hat{N}_{+}|00>=-\sqrt{\frac{2}{3}}|11>$$

所以
$$Y_{11}(\theta,\varphi)=|11>=-\sqrt{\frac{3}{2}}N_{+}|00>$$
$$=-\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta e^{i\varphi}\cdot\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$
$$=-\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta e^{i\varphi}\cdot$$

与此类似，利用 $\hat{N}_- | l,-l >= \sqrt{\frac{2l+2}{2l+3}} | l+1,-(l+1) >$

可由 $Y_{00}(\theta,\varphi)$ 得出

$$Y_{l,-l}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\sqrt{(2l+1)!}\sin^l\theta e^{-il\varphi}$$

得到了 $m=\pm l$ 这两个公式之后，只要用 $\hat{L}_-$ 依次对 Y_{ll} 作用，或用 $\hat{L}_+$ 依次对 $Y_{l,-l}$ 作用，就可得出 l 固定的全部 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$。这样

$$Y_{l,l-1} = \frac{1}{\sqrt{(l+l)(l-l+1)}\hbar}\hat{L}_- Y_{ll}$$

$$Y_{l,l-2} = \frac{1}{\sqrt{(l+l-1)(l-l+2)}\hbar}\hat{L}_- Y_{l,l-1}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2l(2l-1)\cdot 1\cdot 2}\hbar^2}\hat{L}_-^2 Y_{l,l}$$

$$= \sqrt{\frac{(2l-2)!}{\sqrt{(2l)!2!}}}\hbar^{-2}\hat{L}_-^2 Y_{l,l}$$

$$\cdots\cdots$$

$$Y_{l,m} = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}}h^{-l+m}\hat{L}_-^{l-m} Y_{ll}$$

$$= (-1)^l \frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}h^{-l+m}\hat{L}_-^{l-m}(\sin^l \theta e^{il\varphi})$$

类似地，用 $\hat{L}_+$ 依次对 $Y_{l,-l}$ 作用，可得

$$Y_{l,m} = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}} h^{-l-m} \hat{L}_+^{l+m} Y_{l,-l}$$

$$= \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} h^{-l-m} \hat{L}_+^{l+m} (\sin^l \theta e^{-il\varphi})$$

利用教材中所证明的公式（这里不再证明）

$$(\mp\hbar)^{-(l\pm m)} \hat{L}_\pm^{l\pm m} (\sin^l \theta e^{\mp il\varphi}) = (\sin\theta)^{\pm m} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\theta}\right)^{l\pm m} \sin^{2l}\theta e^{im\varphi})$$

可把 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 写成两种形式（前面已经用 $\hat{L}_\pm$ 分别得出）

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}e^{im\varphi}\times$$

$$\times\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\theta}\right)^{l-m}\sin^{2l}\theta$$

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}e^{im\varphi}\times$$

$$\times\sin^m\theta\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\theta}\right)^{l+m}\sin^{2l}\theta$$

它们是轨道角动量$(\hat{L}^2,\hat{L}_z)$ 的共同本征函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的普遍表达式。

由于以上两式是从l=0出发得出的，所以式中l只能取零及所有整数，故m也只能取整数，即

$$l = 0,1,2,3,\cdots$$
$$m = -l,-l+1,\cdots,0,\cdots,l-1,l$$

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 在数学上称为球谐函数，全部球谐函数在单位球面上对于单值有限的任何函数$f(\theta,\varphi)$构成完全函数组。

前几个球谐函数是

$$
\begin{cases}
Y_{00} = \sqrt{\dfrac{1}{4\pi}} \\
Y_{10} = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}} \cos\theta \\
Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} \\
Y_{20} = \sqrt{\dfrac{5}{4\pi}}\sqrt{\dfrac{1}{4}}(3\cos^2\theta - 1) \\
Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\dfrac{5}{4\pi}}\sqrt{\dfrac{3}{2}} \cos\theta \sin\theta e^{\pm i\varphi} \\
Y_{2,\pm2} = \sqrt{\dfrac{5}{4\pi}}\sqrt{\dfrac{3}{8}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}
\end{cases}
$$

#

§ 8.6 自旋和自旋波函数

一、自旋空间

1. 自旋

粒子的自旋态是粒子的内禀状态，与经典的“旋”是两个概念。

2. 自旋空间：

自旋无法用以前全基于位形空间Hilbert空间的矢量来描述，必须另外建立一个描述自旋态的矢量空间，这个空间我们称之为自旋空间。

而以前讨论的抽象的Hilbert空间或函数空间可以称之为位置Hilbert空间或位置空间。完整地描述单粒子态的Hilbert空间是这两者的直积空间。

3. 自旋角动量算符S：

S是个矢量厄米算符，其分量服从角动量的对易关系：

$$[S_i, S_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k$$

通常取(S^2, S_z)作为对易算符的完备组，其共同本征矢量为$|sm>$，即有

$$S^2 | sm >= s(s+1 > \hbar^2 | sm >$$

$$S_z | sm >= m\hbar | sm >$$

其中　$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots;\quad m = -s, -s+1, \cdots, s-1, s$

4. 自旋量子数的取值

自旋与轨道角动量量子数在数值上有不同的特点：

（1）非复合粒子

自旋量子数s只能取一个值，比如

1）电子 s=1/2

2）在基本稳定的粒子态中，所有的轻子和 Ω^-以外的所有重子s=1/2

3）Ω^-　s=3/2

4）介子　s=0

5）光子　s=1

（2）复合粒子

1）α 粒子基态　s=0

2）氘核基态　s=1

3）Li核基态　s=3/2

复合粒子自旋量子数有时可以发生变化。

5. 自旋空间的维数

对于s=0的粒子，完全不用讨论自旋，或者说其自旋空间是一个 1D 空间，其中只有一个自旋态（s=0, m=0）。

对非相对论量子力学的主要对象—电子来说，s=1/2，m只能取$\pm 1/2$两值，自旋空间是2D的。一般情况下自旋空间维数是2s+1维。（为什么？）

基矢个数确定维数，与自由度要区分开

二、自旋算符的对易及反对易关系

讨论s=1/2的粒子，以电子为例。

其突出特点是，自旋在任意方向上的分量只能取 $\pm\hbar/2$ ，即

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4},$$

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

即角动量平方及各分量平方算符是一个数算符，这可以导致一个特有的关系。

由 $[S_i, S_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k$ 得

$$S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z$$

将此式两边左乘和右乘 S_x ，得

$$S_x^2 S_y - S_x S_y S_x = i\hbar S_x S_z$$

$$S_x S_y S_x - S_y S_x^2 = i\hbar S_z S_x$$

两式相加，得

$$[S_x^2, S_y] = i\hbar (S_x S_z + S_z S_x)$$

由前面的讨论可知，S_x^2 是带有量纲的数 $\frac{\hbar^2}{4}$，它与任何算符都对易，

$$\therefore \quad S_x S_z + S_z S_x = 0$$

一般地有

$$S_i S_j + S_j S_i = 0, \quad i \neq j$$

或写成

$$S_i S_j + S_j S_i = \frac{1}{2}\hbar^2 \delta_{ij}$$

即自旋三个分量的算符彼此是反对易的。这是自旋1/2粒子所特有的关系。

#

三、自旋算符和自旋态矢量

1. S_z 表象

在单电子的2D自旋空间中，通常采用 S_z 表象，即取 (S^2, S_z) 的共同本征矢量 $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}>,|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>$ 为基矢，将算符和态矢量分别写成 2×2 矩阵和一列矩阵形式。

此时基矢矩阵形式可以写为

$$|\frac{1}{2},\frac{1}{2}>=|z,+>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\alpha$$

$$|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>=|z,->=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\beta$$

任意自旋矢量$|\chi>$可以写为

$$|\chi>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\chi_+ + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\chi_- = \begin{pmatrix}\chi_+\\\chi_-\end{pmatrix}$$

归一化要求　　$\chi_+^*\chi_+ + \chi_-^*\chi_- = 1$

此时左边第一项为处于$|\chi>$态的电子$S_z=+\hbar/2$的概率，第二项为 $S_z=-\hbar/2$ 的概率。

2. 泡利矩阵（自旋算符）

在 S_z 表象中，S_z 本身是一个对角矩阵，即

$$S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$$

与 S_z 满足对易关系的 S_x, S_y 的最一般形式为

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\delta} \\ ie^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}$$

δ 是任意实数，习惯上取δ =0，称为国际通用的自旋矩阵

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

若令 $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$，则

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\vec{\sigma}$ 称为泡利矩阵，显然其分量算符满足关系

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1,$$

$$\mathrm{tr}\,\sigma_x = \mathrm{tr}\,\sigma_y = \mathrm{tr}\,\sigma_z = 0$$

$$\det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1$$

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta\sigma_{ij}$$

$$\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2i\sum_k \varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

3. 自旋态矢量

单电子的态矢量 $|\psi>$ 可以写成直积形式

$$|\psi> = |\psi_+>|z,+> + |\psi_->|z,->$$

$$= \begin{pmatrix} |\psi_+> \\ |\psi_-> \end{pmatrix}$$

或者写成$xyzS_z$表象的函数形式

$$\psi(x,y,z;S_z) = \psi_+(x,y,z)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \psi_-(x,y,z)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \psi_+(x,y,z) \\ \psi_-(x,y,z) \end{pmatrix}$$

式中 $$\psi_+(x,y,z) = \psi_+(x,y,z;+\frac{\hbar}{2})$$

$$\psi_-(x,y,z) = \psi_+(x,y,z;-\frac{\hbar}{2})$$

归一化条件是

$$\sum_{S_z}\int \psi^*(x,y,z;S_z)\psi(x,y,z;S_z)\,\mathrm{d}\tau = 1$$

亦即

$$\int \psi_+^*(x,y,z)\psi_+(x,y,z)\,\mathrm{d}\tau + \int \psi_-^*(x,y,z)\psi_-(x,y,z)\,\mathrm{d}\tau = 1$$

此式左方第一个积分是电子不问位置，自旋取正的概率，第二项是自旋取负的概率。

#