角动量

*) 1925年Heisenberg和Jordan使用代数解法求解
但在1913年数学家Eric Cartan已经给出了答案。

*) 角动量对易关系

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

- $\hbar$没有任何用处，仅仅提供一个量纲而已

  定义 $J_i' = J_i/\hbar \Longrightarrow [J_i', J_j'] = i J_k'$

- $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$

  J^2并不依赖于系统的轴向，因为体系的三维旋转不变性使得我们无法区分$J_{x,y,z}$分量。

- 定义 $J_\pm = J_x \pm i J_y$，升降算符

$$J_+ = (J_x - iJ_y)^+ = (J_-)^+$$

$$[J_\pm, J_z] = [J_x \pm iJ_y, J_z] = [J_x, J_z] \mp i[J_y, J_z]$$

$$= -i\hbar J_y \mp i(i\hbar)J_x = -i\hbar J_y \pm \hbar J_x$$

$$= \pm\hbar[J_x \mp iJ_y] = \pm\hbar J_\mp$$

$$[J_-, J_+] = [J_x - iJ_y, J_x + iJ_y] = -i[J_y, J_x] + i[J_x, J_y]$$

$$= 2i[J_x, J_y] = 2i(i\hbar)J_z = -2\hbar J_z$$

$$[J^2, J_\pm] = 0$$

*) $[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$ 其中 $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$

$$[J^2, J_z] = [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_z] = [J_x^2 + J_y^2, J_z]$$

$$[J_y^2, J_z] = J_y[J_y, J_z] + [J_y, J_z]J_y = J_y(i\hbar J_x) + (i\hbar)J_xJ_y = i\hbar(J_yJ_x + J_xJ_y)$$

$$[J_x^2, J_z] = J_x[J_x, J_z] + [J_x, J_z]J_x = -i\hbar(J_xJ_y + J_yJ_x)$$

$$\Rightarrow [J_x^2 + J_y^2, J_z] = 0$$

$\Rightarrow [J^2, J_z] = 0$ 同理可得 $[J^2, J_x] = [J^2, J_y^2] = 0$

*) J^2 和 J_z 共同本征函数

① $[L] =$ 能量 × 时间 $= [\hbar]$，所以我们定义

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = \eta_j \hbar^2 |jm\rangle$$

$$\hat{J}_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle$$

其中 η_j 和 m 为无量纲数

所以 $(J^2 - J_z^2)|jm\rangle = (\eta_j - m^2)\hbar^2 |jm\rangle$

因为 $J^2 - J_z^2 = J_x^2 + J_y^2$，且 $\overline{J_x^2 + J_y^2} \geq 0$

$\Rightarrow \eta_j \geq m^2$ 或 $|m| \leq \sqrt{\eta_\ell}$

② 因为 $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$，所以

$$J_z \underline{J_- |jm\rangle} = (J_- J_z - \hbar J_-)|jm\rangle = J_-(J_z - \hbar)|jm\rangle = (m-1)\hbar \underline{J_- |jm\rangle}$$

$\Rightarrow \hat{J}_- |jm\rangle$ 也是 J^2 和 J_z 的本征函数，本征值为 $\eta_j \hbar^2$ 和 $(m-1)\hbar$

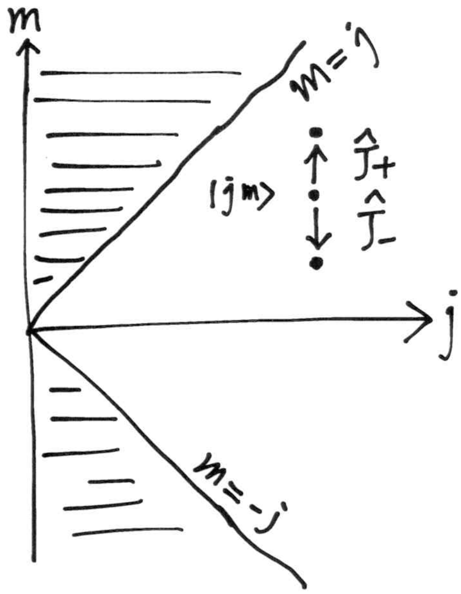
$\Rightarrow J_-$ 为降标符

③ 同理：$\hat{J}_z \hat{J}_+ |jm\rangle = \hat{J}_+ (\hat{J}_z + \hbar)|jm\rangle = (m+1)\hbar \hat{J}_+ |jm\rangle$

$\Rightarrow \hat{J}_+$ 为升标符

*) 升降算符图示

从上面讨论可知，由任意一个$\hat{J}^2$和$\hat{J}_z$的本征矢量$|jm\rangle$出发，重复使用$\hat{J}_+$或$\hat{J}_-$可得到$\hat{J}^2$算符的相同本征值j的一系列矢量，这组矢量都属于$\hat{J}_z$的本征矢，但本征值m相差整数单位。



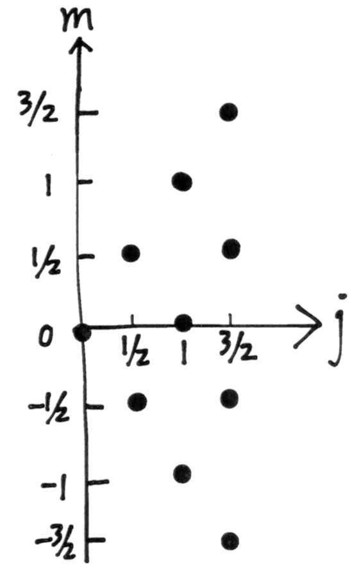
考虑 $\hat{J}_\pm|jm\rangle$ 的Norm

$$
\begin{aligned}
\hat{J}_\mp\hat{J}_\pm &= (\hat{J}_x \mp i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) \\
&= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] \\
&= \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \||\hat{J}_\pm|jm\rangle\|^2 = \langle jm|\hat{J}_\mp\hat{J}_\pm|jm\rangle = [j(j+1) - m(m\pm1)]\hbar^2
$$

选取合适的$|jm\rangle$相位使得

$$
\hat{J}_\pm|jm\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,\hbar\,|j, m\pm1\rangle
$$



当$m=j$或$-j$时，

$$\hat{J}_+|j, j\rangle = 0$$

$$\hat{J}_-|j, -j\rangle = 0$$

④ 设m的最大值为m_+，最小值为m_-，即

$$\hat{J}_+|jm\rangle=0,\quad \hat{J}_-|jm\rangle=0$$

所以 $$\hat{J}_-\hat{J}_+|jm_+\rangle=0,\quad \hat{J}_+\hat{J}_-|jm_-\rangle=0$$

$$\Rightarrow (\hat{J}^2-\hat{J}_z^2-\hbar\hat{J}_z)|jm_+\rangle=(\eta_j-m_+^2-m_+)\hbar^2|jm_+\rangle=0$$

$$(\hat{J}^2-\hat{J}_z^2+\hbar\hat{J}_z)|jm_-\rangle=(\eta_j-m_-^2+m_-)\hbar^2|jm_-\rangle=0$$

$$\Rightarrow \eta_j=m_+(m_++1)=m_-(m_--1)$$

$$m_+^2+m_+=m_-^2-m_- \Rightarrow (m_++m_-)(m_+-m_-)+(m_++m_-)=0$$

$$\Rightarrow (m_++m_-)(m_+-m_-+1)=0 \Rightarrow \underline{m_+=-m_-} \text{ 或者 } \underline{m_+=m_--1}$$

×

记$m_+\equiv j$，则有$\eta_j=j(j+1)$

⑤ 因为$\hat{J}_\pm$杯符使我们可以走遍$\hat{J}_z$杯符的完整希尔伯特空间，所以将$\hat{J}_z$杯符作用N次后我们可以从$m_+\to m_-$，此即

$$j-N=-j \Rightarrow j=\frac{N}{2} \quad (\text{其中}N\text{是整数})$$

此时$\hat{J}_z$杯符张开的希尔伯特空间的维数为$2j+1=N+1$

$$m\in\{-j,-j+1,\cdots,j-1,j\}$$

（j为整数或半整数）

轨道角动量(L)

波函数的周期性边界条件要求 m 为整数

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

*) $l=0$ 态:

经典物理中 $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \Longrightarrow \vec{r} \,/\!/\, \vec{p}$ (此即为粒子沿一条通过原点的直线振荡)

量子物理中,"轨道"的概念被摈弃,但有些术语名词,例如轨道角动量,轨道磁矩等名词仍然继续使用,只不过是为了方便而已。

*) 经典物理认为:一个矢量在某方向上最大的投影就是它的大小,该矢量平方为 l^2;而量子理论告诉我们:角动量 l 在某方向投影为 $m=l$,但它的平方却是 $l(l+1)$。

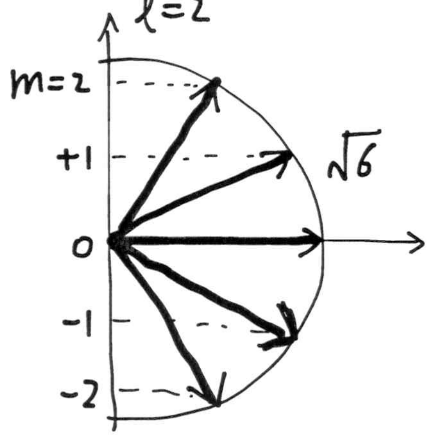
Feynman 将之解释为空间量子化:

$\hat{l}_z$ 的 $(2l+1)$ 维本征矢量构成 $\hat{l}^2$ 的子空间,

m 可取 $2l+1$ 个离散值 $-l, -l+1, \cdots, l-1, l$

从而 $\hat{l}_z^2$ 的平均值为

$$\overline{l_z^2} = \frac{1}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} m^2 = \frac{1}{3}l(l+1)$$



$\left(\sum_{n=1}^{N} n^2 = \frac{1}{6}N(N+1)(2N+1)\right)$

由各向同性而知

$$\overline{l^2} = 3\overline{l_z^2} = l(l+1)$$

$\Longrightarrow$ 如图所示,球半径为 $\sqrt{l(l+1)}$,其在 z 方向的整数投影最大值仅为 $\pm l$ ($l=0$ 情况例外)

*) 问：为何我们不能选取角动量矢量方向作z轴呢？

这时应该有 $m_{+}=\sqrt{l(l+1)}$

答：因为一个自由粒子根本没有一个确定的角动量矢量，因为 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 不对易，所以它们无法同时确定，就象自由粒子没有同时确定的坐标和动量一样。

*) 不确定关系解释

如果角动量矢量 $\vec{l}$ 完全沿着某个固定方向，那么我们可以选取此方向为量子化的轴（例如z），那么沿着这个轴的测量操作可得到最大值为 $\sqrt{l^2}$。但测不准关系告诉我们，不存在这样的矢量。

现在我们有 $\hat{L}_z$ 和方位角 φ，类似于 $\hat{P}_x$ 和 x。我们期待

$$\Delta(\hbar l_z)\cdot\Delta\varphi \sim \hbar$$

$\Rightarrow$ 角动量完全沿着z方向 $\longleftrightarrow$ 具有精确到的动量的平面波

$\Rightarrow$ $\Delta\varphi$ 应该为不确定的

但 $\Delta\varphi$ 不可能为无穷大，因为 $\varphi\in(0,2\pi)$，事实上 $\Delta\varphi=\frac{\pi}{\sqrt{3}}$。

其次，如果角动量分量完全沿着z方向，则 $\hat{L}_x=\hat{L}_y=0$，$\hat{L}_z=\sqrt{l(l+1)}\hbar$

$\Rightarrow$ $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 可同时确定，违背不确定关系。

注意：三维时空中旋转操作是非阿贝尔的（non-abelian）

本征值 l_x, l_y, l_z 中只要有1个不等于0，$\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 就没有共同本征函数

*) 量子"涨落"

在 $\hat{L}_z$ 本征态中，$\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 不确定，其涨落为

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \langle \hat{L}_y^2 \rangle = \frac{1}{2}\langle \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \rangle = \frac{1}{2}\left[l(l+1) - m^2 \right]\hbar^2 \geqslant 0$$

(其中等号仅在 $l=m=0$ 时成立)

$$\Delta L_x = \sqrt{\langle L_x^2 \rangle}, \quad \Delta L_y = \sqrt{\langle L_y^2 \rangle}, \quad \langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$

- 当体系处于 $\hat{L}_z$ 本征值态时，

$$\Delta L_x \cdot \Delta L_y = \sqrt{\langle L_x^2 \rangle}\sqrt{\langle L_y^2 \rangle} \geqslant \frac{\hbar}{2}\left|\langle L_z \rangle\right| = \frac{1}{2} m \hbar^2$$

$$\Rightarrow \Delta L_x \cdot \Delta L_y = \frac{1}{2}\left[l(l+1) - m^2 \right]\hbar^2 \geqslant \frac{1}{2} m \hbar^2$$

(因为 $m \leq l$，所以上式成立；当 $m=l$ 时，等式成立)

- 此时 $\Delta \hat{L}_z = 0$，但 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的不确定度为有限

- 在 l_z 的 $m=l$ 本征态中，$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \frac{1}{2}\hbar^2$

因为 $L_{x,y}^2$ 与体系能量相关，所以不确定关系告诉我们

在 $\hat{L}_z$ 本征态中，虽然 $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$，

但在 x-y 方向上仍有不为 0 的能量。

*) 角动量量子化

问：角动量对易关系并不依赖于ħ，那么角动量是如何量子化的？

角动量的量子化并不需要粒子是束缚的。因为动量本征态可由角动量的本征态叠加而成。

$$[\hat{T},\hat{L}^2]=0,\ [\hat{T},\hat{L}_z]=0 \qquad \left(\hat{T}=\frac{p^2}{2m}\right)$$

⟹ 各个角动量本征态的概率幅不随时间变化，是守恒的。

例如，平面波可以按照球谐函数展开为

$$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,i^l j_l(kr)\,P_l(\cos\theta)$$

当 $r\to\infty$ 时，$j_l(kr)\sim\frac{\sin(kr-l\pi/2)}{kr}$

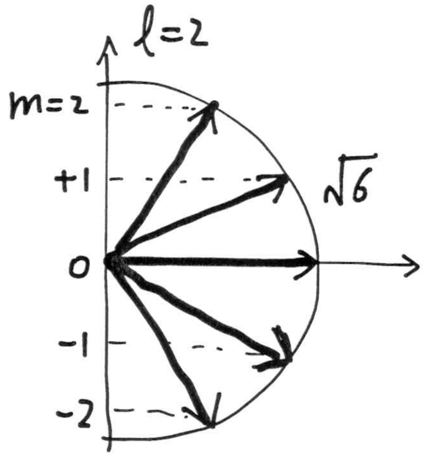
（在处理散射问题时要用到此式）

一个封闭体系由于各向同性而导致的守恒量——该系统的角动量

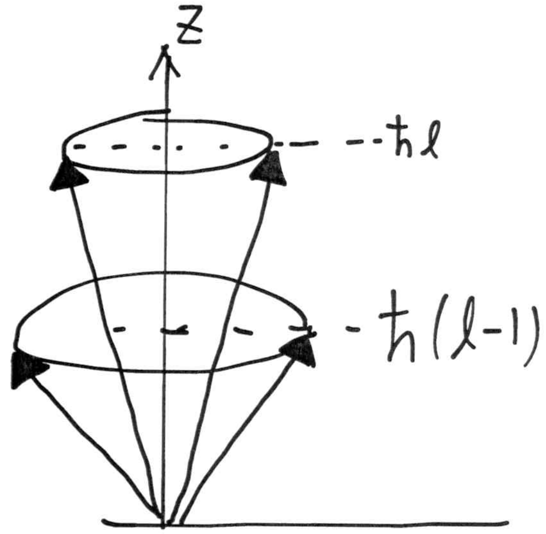
处于外场中的一个系统的角动量一般是不守恒的，但如果外场具有某种对称性，则角动量也可能是守恒的。

- 角动量是全空间的概念，也告诉我们物理体系在空间中几率分布的对称性质。非束缚粒子将充满整个空间。
- 角动量是3维空间中才具有的。

*) 经典极限



进动图像



因为矢量 $\vec{l}$ 的方向无法确定，而且其"长度"要比其在某个方向上投影的最大值要大，所以在经典物理中与其最类似的图像是角动量矢量围绕量子化轴方向(z)进动，且进动锥角固定在 l_z 投影上。当 $\hbar\to 0$ 时，不确定关系将不再限制任何物理可观测量。波包将停止扩散，所有物理量都可以同时具有确定值。

回到经典物理的具体操作是

(1) $l\to\infty$（宏观尺度下物理自由度无限多）

$\Longrightarrow l(l+1)\simeq l^2=(l_z)_{max}$ （此为经典矢量图像）

(2) $\hbar\to 0$ 但保证 $l\hbar$ 有限

但自旋角动量 S 无法取为 ∞，所以当 $\hbar\to 0$ 时自旋无经典对应。

$$S^2=s(s+1)=\frac{3}{4}\ ,\quad S_z=\pm\frac{1}{2}$$

*) 角动量算符的本征函数

因为角动量 $\vec{L}$ 在体系膨胀时不变，所以它仅仅作用在角度上。

在19世纪角动量的本征函数和本征值由Legendre和Fourier给出。

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

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

其共同本征函数为球谐函数(spherical harmonics) $Y_l^m(\theta,\varphi)$

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\varphi)$$

其中 $Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,\underline{P_l^m(\cos\theta)}\,e^{im\varphi}$

$$P_l^m(\cos\theta) = (-1)^{l+m}\frac{1}{2^l l!}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\frac{1}{\sin^m\theta}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{l-m}\sin^{2l}\theta$$

(associated Legendre function)

- 平方可积的球谐函数形成了一个希尔伯特空间 (radius=1)

① 正交归一

$$\iint \left(Y_l^m(\theta,\varphi)\right)^* Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

② 封闭性

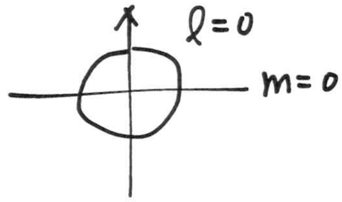
$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_l^m(\theta,\varphi)\left(Y_l^m(\theta',\varphi')\right)^* = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')$$

③ 递推关系

$$\hat{L}_\pm Y_l^m = \sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\,\hbar Y_l^{m\pm1}$$

$$= \sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,\hbar Y_l^{m\pm1}$$

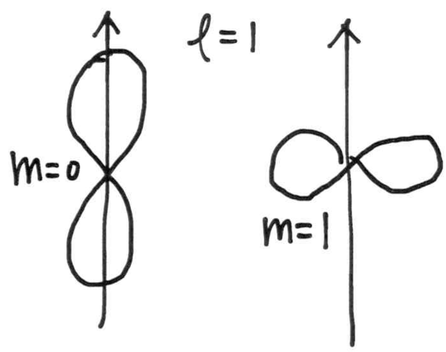
④ $l=0$: $Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$



$l=1$: $Y_1^1(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}$

$Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$

$Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$



容易验证：

$\sum_{m=-1}^{1} |Y_1^m(\theta,\varphi)|^2$ 不依赖于 θ 和 φ 角，各向同性

任意定态波函数中角动量平均值为0，即各向同性。

定态 $\Rightarrow$ 波函数在时间反演下保持不变

$$\psi(\vec{r},t) \longrightarrow \psi(\vec{r},-t) = \psi(\vec{r},t)$$

但角动量 $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} \longrightarrow -\vec{L}$

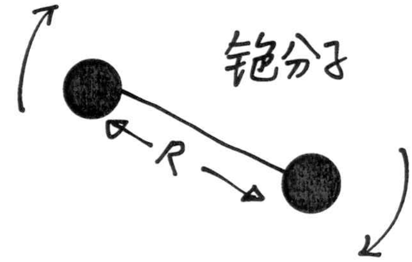
所以 $\langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle = \langle\psi|-\hat{L}|\psi\rangle$

$$\Rightarrow \langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle = 0$$

*) 实验验证(双原子分子 Cs_2 旋转能)

Diatomic Molecule

两体问题



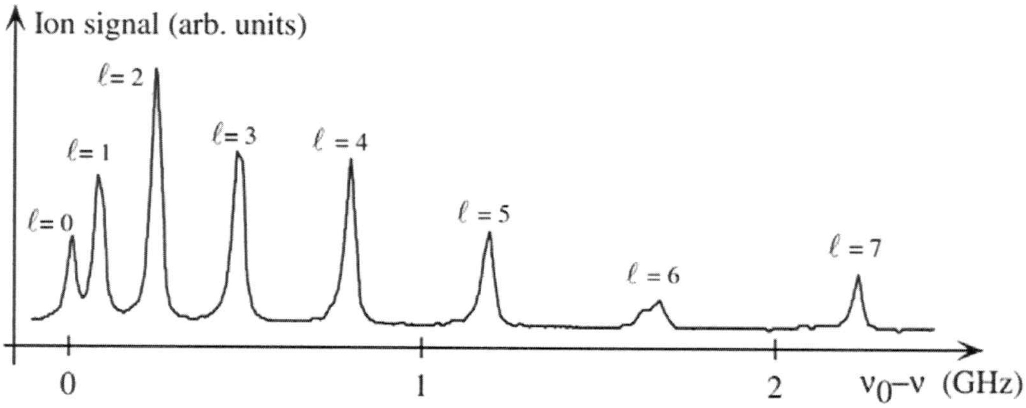
$$E_{rot} = \frac{L^2}{2I}, \quad I = \frac{1}{2}MR^2$$

R为两原子处于平衡态时间距，$R \simeq 1.3\ nm$

$$\Rightarrow E_{rot} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

$$E_{rot}(l) - E_{rot}(l-1) = \frac{\hbar^2}{I} l$$

$\Rightarrow$ 能级差越来越大



将一束固定能量($h\nu$)的激光射向铯双原子分子组成的冷气体系统，当入射激光能量等于 Cs_2 分子的旋转能时，Cs_2 分子将吸收能量从而离子化。上图为离子化 Cs_2 分子数目和入射激光频率间的关联。

注意：一般三维转动能量为 $\hat{H} = \frac{L_x^2}{2I_x} + \frac{L_y^2}{2I_y} + \frac{L_z^2}{2I_z} = \frac{(L_x^2+L_y^2)}{2I} + \frac{L_z^2}{2I_z}$，(取 $I_x = I_y$)

$$\Rightarrow E_{l,m} = \hbar^2\left[\frac{l(l+1)-m^2}{2I} + \frac{m^2}{2I_z}\right]$$

因为 $I_x = I_y = I \gg I_z \sim 0$，所以 z 方向激发能很高，我们可以取 $m=0$ (z方向基态)