链滴

转子 笔记

作者：Roseleaves
原文链接：https://ld246.com/article/1633733037695
来源网站：链滴

角动量的代数结构

经典的质点的角动量定义为

$$\bf L=r\times p$$

所以量子的角动量依其精神，在直角坐标中定义为

$$\begin{aligned}
\hat L_z &= \hat r_x \hat p_y - \hat r_y \hat p_x\\
\hat L_x &= \hat r_y \hat p_z - \hat r_z \hat p_y\\
\hat L_y &= \hat r_z \hat p_x - \hat r_x \hat p_z\\
\end{aligned}$$

在球坐标中，因为经度φ正好是绕z轴旋转的角度，所以利用非交换的平方差公式，定义升子和子

$$\begin{aligned}
\hat L_+ &= \hat L_x + \mathrm i \hat L_y&
\hat L_- &= \hat L_x - \mathrm i \hat L_y
\end{aligned}$$

使得z轴向的角动量，模方角动量分别表示为

$$\begin{aligned}
\hat L_z &= -\mathrm i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}\\
\hat L^2 &= \hat L_x^2 + \hat L_y^2 + \hat L_z^2\\
&= \hat L_z^2 + \frac12\left(\hat L_+ \hat L_- + \hat L_- \hat L_+\right)
\end{aligned}$$

1. 对易关系

任何两个轴向的角动量都不可交换。利用交换子对加法的分配律，以及不属于同一分量的位置和动量可交换性，有

$$
\begin{aligned}
\left[\hat L_x,\hat L_y\right] &= \left[
\hat r_y \hat p_z - \hat r_z \hat p_y,
\hat r_z \hat p_x - \hat r_x \hat p_z
\right]
\\&=
\left[\hat r_y \hat p_z, \hat r_z \hat p_x\right] -
\left[\hat r_y \hat p_z, \hat r_x \hat p_z\right] -
\left[\hat r_z \hat p_y, \hat r_z \hat p_x\right] +
\left[\hat r_z \hat p_y, \hat r_x \hat p_z\right]
\\&=
\hat r_y\hat p_x\left[\hat p_z, \hat r_z\right]+
\hat r_x\hat p_y\left[\hat r_z, \hat p_z\right]
\\&= \left[\hat r_z, \hat p_z\right] \left(\hat r_x \hat p_y - \hat r_y \hat p_x\right)
\\&= \mathrm i\hbar\hat L_z
\end{aligned}
$$

因此我们永远无法同时确定粒子的角动量的所有分量。但任何一个轴向的角动量可以和模方角动量交

。

\begin{aligned}

\left[\hat L^2,\hat L_z\right] &=

\left[\hat L_x^2,\hat L_z\right] +

\left[\hat L_y^2,\hat L_z\right] +

\left[\hat L_z^2,\hat L_z\right]

\\&= \hat L_x\hat L_x\hat L_z-\hat L_z\hat L_x\hat L_x

+\hat L_y\hat L_y\hat L_z-\hat L_z\hat L_y\hat L_y

+\hat L_z\hat L_z\hat L_z-\hat L_z\hat L_z\hat L_z

\\&= \hat L_x\hat L_x\hat L_z-\hat L_x\hat L_z\hat L_x

+\hat L_x\hat L_z\hat L_x-\hat L_z\hat L_x\hat L_x

\\&\ +\hat L_y\hat L_y\hat L_z-\hat L_y\hat L_z\hat L_y

+\hat L_y\hat L_z\hat L_y-\hat L_z\hat L_y\hat L_y

\\&= \hat L_x(-\mathrm i\hbar\hat L_y)+(-\mathrm i\hbar\hat L_y)\hat L_x

+\hat L_y(\mathrm i\hbar\hat L_x)+(\mathrm i\hbar\hat L_x)\hat L_y=0

\end{aligned}

因此我们总是可以同时确定粒子的模方角动量和一个轴向的角动量。

2. 升降子的对易关系

\begin{aligned}

\left[\hat L_+,\hat L_-\right] &= \left[

\hat L_x + \mathrm i \hat L_y,

\hat L_x - \mathrm i \hat L_y

\right]

\\&= \left[\hat L_x,\hat L_x\right]

-\mathrm i \left[\hat L_x,\hat L_y\right]

+\mathrm i \left[\hat L_y,\hat L_x\right]

-\mathrm i^2\left[\hat L_y,\hat L_y\right]

\\&= 2\hbar \hat L_z\\

\left[\hat L_z,\hat L_+\right] &=

\left[\hat L_z,\hat L_x\right] + \mathrm i\left[\hat L_z,\hat L_y\right]

= i\hbar \hat L_y +\hbar \hat L_x=\hbar \hat L_+\\

\left[\hat L_z,\hat L_-\right] &=

\left[\hat L_z,\hat L_x\right] - \mathrm i\left[\hat L_z,\hat L_y\right]

= i\hbar \hat L_y - \hbar \hat L_x=-\hbar \hat L_-\\

\left[\hat L^2,\hat L_+\right] &=

\left[\hat L^2,\hat L_x\right] + \mathrm i\left[\hat L^2,\hat L_y\right]

= 0 + 0 = 0

\end{aligned}

模方角动量与升降子也可交换。

升降子是它们与z轴向的角动量的交换子的特征算子。要注意它们的特征值不一样。

升降子不能相互对易，但是交换子得到z轴向的角动量，这有助于我们优化模方角动量的展开式为

$$\hat L^2 = \hat L_+ \hat L_- - \hbar\hat L_z + \hat L_z^2$$

$$= \hat L_- \hat L_+ + \hbar\hat L_z + \hat L_z^2$$

3. 升降子将特征向量映射到特征向量

设 ψ 是 $\hat L^2$ 的属于 λ 的特征向量。则 $\hat L_+\psi, \hat L_-\psi$ 也是特征向量，即

$$\hat L^2\left(\hat L_+ \psi\right) = \hat L_+\left(\hat L^2 \psi\right)$$

$$= \hat L_+\left(\lambda \psi\right) = \lambda\left(\hat L_+ \psi\right)$$

也就是说， $\hat L_+, \hat L_-$ 不改变特征值，是将特征子空间映射到它自己，是特征子空间上的变
。

设 ψ 是 $\hat L_z$ 的属于 μ 的特征向量。则 $\hat L_+\psi, \hat L_-\psi$ 也是特征向量，即

\begin{aligned}

\hat L_z\left(\hat L_+ \psi\right)

&= \left(\hat L_+\hat L_z + \hat L_z\hat L_+ - \hat L_+\hat L_z\right)\psi

\\& = \hat L_+\left(\hat L_z \psi\right) + \hbar \hat L_+\psi

\\& = \hat L_+\left(\mu \psi\right) + \hbar \hat L_+\psi

\\& = (\mu+\hbar)\left(\hat L_+ \psi\right)

\\\hat L_z\left(\hat L_- \psi\right)

&= \left(\hat L_-\hat L_z + \hat L_z\hat L_- - \hat L_-\hat L_z\right)\psi

\\& = \hat L_-\left(\hat L_z \psi\right) - \hbar \hat L_-\psi

\\& = \hat L_-\left(\mu \psi\right) - \hbar \hat L_-\psi

\\& = (\mu-\hbar)\left(\hat L_- \psi\right)

\end{aligned}

也就是说，$\hat L_+$, $\hat L_-$ 分别将特征值增加和减少 $\hbar$，不再是特征子空间上的变换。这理所然地造成正交性即

$$\left<\psi, \hat L_+\psi\right>=\left<\psi, \hat L_-\psi\right>=0$$

4. 轴向量子化的完备性；磁量子数

同一轴向的角动量和角度是共轭的算子。以z轴为例，直接解角动量特征方程

$$\begin{aligned}
\hat L_z \psi = \mu \psi
\end{aligned}$$

得到待归一的驻波函数

$$\begin{aligned}
\psi(\varphi) = A\mathrm e^{\mathrm i\mu\varphi/\hbar}
\end{aligned}$$

自变量经度 φ 的周期性，要求 $\psi(\varphi)=\psi(\varphi+2\pi)$。因此 μ 必须取 $\hbar$ 的数倍，即 $\mu=m\hbar$，也就是说，轴向角动量是等差的。

它可以解释Zeeman效应。实验观测到：原本的一条谱带，在磁场中分裂为等间距的多条谱带，而且距和磁场强度成正比。在磁场中，不同的特征轴向角动量可以表现出特征能量的差异，所以具有等差特征轴向角动量的各量子态，表现为原本相同的能级在磁场中分裂为等差的能级。因此，m 称为磁量数。

5. 升降子的核空间

我们知道，任何一个轴向角动量的平方都永远不可能超过模方角动量，这是因为其他轴向角动量的平一定是非负的。

$$\hat L^2 - \hat L_z^2 = \hat L_x^2 + \hat L_y^2 \ge 0$$

升子不改变模方角动量却能增加z轴向角动量，因此它一定存在零化向量（或者更一般的，不可归一的，因为它的范数也可能是无限大）。

设 $\psi\in\ker \hat L_+$ 即 $\hat L_+ \psi = 0$，使得这个 ψ 是 $\hat L_z$ 的属于 μ 的特征向量，$\hat L_z \psi = \mu \psi$。容易知道，μ 一定是此时z轴向角动量的最正的特征值。此时，也就是子零化时，模方角动量是可计算的：

$$
\begin{aligned}
\hat L^2 \psi &= \left(\hat L_- \hat L_+ + \hbar\hat L_z + \hat L_z^2\right)\psi
\\&= 0 + \hbar\cdot \mu \psi + \mu^2\psi
\\&= \mu(\mu+\hbar)\psi
\end{aligned}
$$

也就是说，ψ 是 $\hat L^2$ 的属于 $\mu(\mu+\hbar)$ 的特征向量。

对称地，降子也存在零化向量。设 $\psi\in\ker \hat L_-$ 使得 $\hat L_z\psi = \mu \psi$，则特征值 μ 是最负的，而且

$$
\begin{aligned}
\hat L^2 \psi &= \left(\hat L_+ \hat L_- - \hbar\hat L_z + \hat L_z^2\right) \psi
\\&= 0 - \hbar\cdot \mu \psi + \mu^2 \psi
\\&= \mu(\mu - \hbar) \psi = -\mu(-\mu + \hbar) \psi
\end{aligned}
$$

也就是说，降子核空间的 ψ 只要是 $\hat L_z$ 属于 μ 的特征向量，就是 $\hat L^2$ 的属于 $\mu(\mu-\hbar)$ 的特征向量。

因此升降子的核空间具有这样的意义，它将z轴向角动量的特征子空间和模方角动量的特征子空间联在一起。

6. 角量子数；角动量的特征子空间结构

设 $\psi_+\in\ker \hat L_+, \psi_-\in\ker \hat L_-$ 都属于 $\hat L^2$ 的同一个特征值 λ，而且别属于 $\hat L_z$ 的特征值 μ_+, μ_-。事实上，具有模方角动量且不具有特征z轴向角动量的状很多，比如那些课本上常见的实值波函数，所以不像前面能自动导出，这里需要设出来属于z轴向的征值。

根据升降子的性质，我们很容易知道 μ_+, μ_- 服从方程

$$\mu_+(\mu_++\hbar)=\lambda=-\mu_-(-\mu_-+\hbar)$$

以及 $\mu_+\ge \mu_-$ ，从而 μ_+, μ_- 互为相反数；再代入轴向量子化的完备性，则有且只唯一的自然数 l，称为角量子数，决定着模方角动量 $\lambda = l(l+1)\hbar^2$，使得

$$\begin{aligned}
\mu_+ &= l\hbar & \mu_- &= -l\hbar\\
\hat L_z\psi_+ &= l\hbar\psi_+ & \hat L_z\psi_- &= -l\hbar\psi_-\\
\hat L^2\psi_+ &= l(l+1)\hbar^2\psi_+ & \hat L^2\psi_- &= l(l+1)\hbar^2\psi_-\\
\end{aligned}$$

角量子数 l 跟随着z轴向角动量完成量子化，所以模方角动量不是等差的。

任何一个拥有模方角动量和z轴向角动量的特征值，且z轴向角动量的平方小于模方角动量的量子态，是存在的，也就是说，只要 $|m|\le l$，总可以用 $\left|l,m\right>$ 来表示转子的具有特定角动量状态的函数，$\left|l,m\right>$ 一定存在。实际体系有的势场是和角度分布无关的，只与极径有关。所以 $Y_{l m}=\left|l,m\right>$ 也可以表示此时的角度分布函数，又称球谐函数。

模方角动量的每一个属于 $l(l+1)\hbar^2$ 的特征子空间，都是 $2l+1$ 维的，而且存在这样的一组正交，基向量 $\left|l,m\right>$ 都是z轴角动量的特征向量，而且分属于不同的特征值 $m\hbar$。也就是说“对于每一个给定的 l，m 有 $2l+1$ 个不同的值。”

我们可以做一个验算：如果 ψ_+, ψ_- 是同系的，即可以经过升降子的有限次作用后相互表示，么

$$\begin{aligned}
\exists N: \hat L_+^N\psi_-&=A_+\psi_+&\hat L_-^N\psi_+&=A_-\psi_-
\end{aligned}$$

其中 A_+, A_- 是归一化系数，如果 ψ_+, ψ_- 都取单位向量。这样以后，得出来的结果是，$l=\frac12 N$ ，即角量子数是整数或者半整数。这是同系条件所得到的限制，同系条件略宽松于轴向量子化件，所以它能容纳半整数结果，并因而引出所谓的自旋。

7. 角量子数的升降子

设方向算子 $\hat N = \frac{\hat r}{|r|}$ 。然后定义角升子和角降子

$$\hat R=\frac{\mathrm i}{\hbar}\hat N\times\hat L+\hat N\frac{\sqrt{4\hat L^2+\hbar^2}+\hbar}{2\hbar}$$

$$\hat Q=\frac{\mathrm i}{\hbar}\hat N\times\hat L-\hat N\frac{\sqrt{4\hat L^2+\hbar^2}-\hbar}{2\hbar}$$

或者，把所有角动量的量纲去掉，即

$$\hat R = \mathrm i \hat N \times \hat L'+\hat N\frac{\sqrt{4\hat L'^2+1}+1}{2}$$

$$\hat Q = \mathrm i \hat N \times \hat L'-\hat N\frac{\sqrt{4\hat L'^2+1}-1}{2}$$

然后我们可以得到一些对易关系，并且进而得到

$$\hat L^2\hat R \left|l,m\right> = (l+1)(l+2)\hbar^2\hat R \left|l,m\right>$$

$$\hat L^2\hat Q \left|l,m\right> = (l-1)l\hbar^2\hat Q \left|l,m\right>$$

并且得到相应的递推关系

$$\hat R\left|l,m\right>=c_{l+}\left|l+1, m'\right>$$

$$\hat Q\left|l,m\right>=c_{l-}\left|l-1, m'\right>$$

当然，$\hat Q$ 的核空间中含有 $\left|0,0\right>$。

球谐函数的分析求解

前面取巧，用广义坐标的原理得到了 $\hat L_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial \varphi}$。可以证明？），

$$\begin{aligned}
\hat L_+&=\phantom-\hbar \mathrm e^{\mathrm i\varphi\phantom-}\left(
\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm i \cot \theta
\frac{\partial}{\partial\varphi}
\right)\\
\hat L_-&=-\hbar \mathrm e^{-\mathrm i\varphi}\left(
\frac{\partial}{\partial\theta} - \mathrm i \cot \theta
\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned}$$

\right)\\

\end{aligned}

……

1. $\left|l,l\right>$ 的波函数的取得

首先作为核空间的向量 $\left|0,0\right>$，代入零化方程 $\hat Q \left|0,0\right>=0$，然后由此出发反复用角升子作用，得到：

$$\left|l,l\right> = c_l (\sin\theta)^{|m|}\mathrm e^{\mathrm im\varphi}$$

2. 其他具有更低磁量子数的波函数的取得

从 $\left|l,l\right>$ 开始，反复用 $\hat L_-$ 作用即可。此外还有别的递推公式。从略。