## 3.11 轨道角动量

### 3.11.1 对易关系

轨道角动量的定义是

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{3.262}$$

考虑任意状态$|\alpha\rangle$, 其波函数和被$\mathbf{L}$作用后态的波函数的关系为

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{L}|\alpha\rangle = \hat{\mathbf{L}}\langle \mathbf{r}|\alpha\rangle \tag{3.263}$$

其中$\hat{L}$为

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\hat{\mathbf{r}} \times \nabla \tag{3.264}$$

在直角坐标系下, $\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$

利用基本对易式

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \tag{3.265}$$

容易证明以下对易关系:

$$[\hat{L}_x, \hat{x}] = 0, \qquad [\hat{L}_x, \hat{p}_x] = 0 \tag{3.266}$$

及其轮转公式.

$$[\hat{L}_x, y] = i\hbar z, \qquad [\hat{L}_x, \hat{p}_y] = i\hbar\hat{p}_z \tag{3.267}$$

及其轮转公式.

证明中常用的公式

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C] \tag{3.268}$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \tag{3.269}$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \tag{3.270}$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \tag{3.271}$$

最后的式子成为Jacobi identity.

下面证明两个重要的对易关系.

1. $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$. 及其轮转公式.
   证明: 从略

2. $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$ 及其轮转公式.
   证明: 从略

### 3.11.2 $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$的共同本征态

角动量是在中心力问题里常遇到的力学量, 这是因为它是守恒量。在中心力场情况下, 采用球坐标是方便的.

$$\nabla = \mathbf{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta\frac{\partial}{r\partial\theta} + \mathbf{e}_\phi\frac{\partial}{r\sin\theta\partial\phi} \tag{3.272}$$

利用Eq.(3.264), 可以导出

$$
\begin{aligned}
L^2 &= -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \\
L_z &= \mathbf{e}_e\cdot\mathbf{L} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned} \tag{3.273}
$$

(以上公式的一个很好的推导，在钱伯初《量子力学》附录）

由于$L^2, L_z$对易，我们可以寻找他们的共同本征态（或者说坐标表象下他们的共同本征函数）。设该共同本征函数为$Y(\theta,\varphi)$:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y(\theta,\varphi) = \lambda_1\hbar^2 Y(\theta,\varphi) \tag{3.274}$$

$$\hat{L}_z Y(\theta,\varphi) = \lambda_2\hbar Y(\theta,\varphi) \tag{3.275}$$

$\lambda_1\hbar^2$和$\lambda_2\hbar$分别是$L^2$和$L_z$的本征值.

分离变量: $Y = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$. 代入上式(3.275)

$$\hat{L}_z\Phi(\varphi) = \lambda_2\hbar\Phi(\varphi) \tag{3.276}$$

其解为

$$\Phi(\varphi) = Ce^{i\lambda_2\varphi}. \tag{3.277}$$

根据波函数的单值性，得到所谓自然边界条件: $\Phi(\varphi+2\pi) = \Phi(\varphi)$. 这就要求

$$\lambda_2 = 0, \pm1, \pm2, \cdots. \tag{3.278}$$

归一化要求$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. 通常写成

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \cdots. \tag{3.279}$$

把此式用到分离变量解，并代入(3.274), $\hat{\mathbf{L}}^2$的本征方程可以化成

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d}{d\theta}\Theta + \left(\lambda_1 - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0 \tag{3.280}$$

定义$\xi = \cos\theta$, 化成连带Legendre 方程

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}\Theta\right) + \left(\lambda_1 - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\Theta = 0. \tag{3.281}$$

物理解为连带Legendre函数

$$\Theta = P_l^m(\cos\theta), \text{其中}|m| \le l. \tag{3.282}$$

对应的本征值为

$$\lambda_1 = l(l+1), l = 0, 1, 2, \cdots, \tag{3.283}$$

综合起来, 共同本征函数写为球谐函数

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = N_{l,m}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{3.284}$$

系数$N_{l,m}$保证函数的正交归一性:

$$(Y_{l,m}, Y_{l',m'}) = \int \sin\theta d\theta d\varphi Y^*_{l,m}Y_{l',m'} = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}. \tag{3.285}$$

积分对立体角（或者所有方向）.

$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$是Hilbert空间矢量$|lm\rangle$对应的波函数:

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\langle\mathbf{n}|l,m\rangle \tag{3.286}$$

其中$\mathbf{n}$是球坐标系中$(\theta,\varphi)$决定的方向矢量. $|\mathbf{n}\rangle$是$\mathbf{n}$的本征矢. 因此正交归一关系也可以写成

$$\langle lm|l'm'\rangle=\delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \tag{3.287}$$

任意以$(\theta,\varphi)$为自变量的函数都可以用$Y_{lm}$展开，也就是说其完备

$$\sum_l\sum_{m=-l}^{m=l}|lm\rangle\langle lm|=1 \tag{3.288}$$

简并讨论: $l$称为轨道角动量量子数, $m$称为磁量子数(后面内容). 给定$l$, $m$有$2l+1$种可能取值. 或者说简并度为$2l+1$.

几个特别重要的球谐函数：$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, $Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$, $Y_{1\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}$.

- 例子: 考虑一个被限制在半径为$a$的球面上运动的质量为$\mu$的粒子.

系统的Hamiltonian为

$$H=\frac{\mathbf{L}^2}{2\mu a^2}. \tag{3.289}$$

能量本征方程为

$$\hat{H}\Psi(\theta,\varphi)=E\Psi(\theta,\varphi). \tag{3.290}$$

假设能量本征值$E_l=l(l+1)\hbar^2/2\mu a^2$. 容易看出方程的解，即本征函数可以是

$$\Psi(\theta,\varphi)=\sum_{m=-l}^{l}C_mY_{l,m} \tag{3.291}$$

其中$C_m$是任意常数;

在这个问题中我们看到，能量本征函数不能完全由能量本征值确定. 这是因为本征函数有简并.

我们需要另外一个力学量$L_z$与$H$构成力学量完全集.

如果我们知道能量为$E_l$, 并且$l_z$为$m\hbar$, 即

$$\begin{aligned}\hat{H}\Psi(\theta,\varphi)&=E_l\Psi(\theta,\varphi).\\ \hat{L}_z\Psi(\theta,\varphi)&=m\hbar\Psi(\theta,\varphi).\end{aligned} \tag{3.292}$$

就可以完全确定波函数$\Psi(\theta,\varphi)$为$Y_{lm}$, 即完全用力学量的本征值来确定本征函数或本征态.

假设系统的状态是

$$|\alpha\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}|10\rangle+\frac{1}{\sqrt{6}}|11\rangle \tag{3.293}$$

我们先测量H, 得到0 的几率为1/2, 系统会塌缩到本征态$|00\rangle$. 接着测$L_z$, 得到$L_z=0$, 其几率是1.

如果测量H得到$\frac{\hbar^2}{\mu a^2}$, 那么系统会塌缩到什么状态? 应该是其本征函数$\frac{1}{\sqrt{3}}|10\rangle+\frac{1}{\sqrt{6}}|11\rangle$.

你可能会问: 你前面不是说$E_1=\hbar^2/\mu a^2$不能确定能量本征函数吗, 怎么现在又给我确定了一个本征函数?

不好意思，这两个‘确定’不是一个意思.

‘本征函数有简并时, 能量本征函数不能完全由能量本征值确定’ 里面，‘确定’是指本征态不能直接写成$|E\rangle$, 因为这么写是没有意义的。

‘如果测量H得到$\frac{\hbar^2}{\mu a^2}$, 那么系统会塌缩到确定的态$\frac{1}{\sqrt{3}}|10\rangle+\frac{1}{\sqrt{6}}|11\rangle$’. “确定”是由于我们给定了$|\alpha\rangle$. 再将$|\alpha\rangle$展开成$H$本征态叠加的时候，这个叠加方式是唯一确定的.

将其归一化，得到$\sqrt{2}(\frac{1}{\sqrt{3}}|10\rangle+\frac{1}{\sqrt{6}}|11\rangle)$. $|\alpha\rangle$可改写为

$$|\alpha\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}|10\rangle+\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{6}}|11\rangle) \tag{3.294}$$

也就是说出现这个测值的几率是1/2. 此时再测量$L_z$，可以得到0或者$\hbar$, 几率分别为2/3 和1/3, 分别投影到$|10\rangle$和$|11\rangle$. 注意，测量这些态的能量我们仍然得到$\frac{\hbar^2}{\mu a^2}$. 这是由于$[H,L_z]=0$.

一般地，根据量子力学的测量原理，测量得到本征值，系统的状态塌缩到对应的本征态. 如果本征态简并，系统塌缩到什么状态?

假设系统的状态是

$$|\alpha\rangle=c_{00}|00\rangle+c_{10}|10\rangle+c_{11}|11\rangle \tag{3.295}$$

如果测量A得到$a_0$ (几率为$|c_{00}|^2$, $c_{00}=\langle 00|\alpha\rangle$), 系统会塌缩到A的本征态$|00\rangle$.

如果测量A得到$a_1$, 那么系统会塌缩到A的本征态$|\beta\rangle=(c_{10}|10\rangle+c_{11}|11\rangle)/N$, 其中我们引入归一化因子

$$1/N=\frac{1}{\sqrt{|c_{10}|^2+|c_{11}|^2}} \tag{3.296}$$

保证$\langle\beta|\beta\rangle=1$. 我们可以改写Eq.(3.295)

$$|\alpha\rangle=c_\beta|\beta\rangle+c_{00}|00\rangle \tag{3.297}$$

计算出$c_\beta=\langle\beta|\alpha\rangle=N$. 它的模方$|c_{10}|^2+|c_{11}|^2$就是测得$a_1$的几率.

如果测量A得到$a_1$, 接着测量B, 得到$b_0$, 则系统$|\beta\rangle$ 必接着塌缩到B的本征态: $|10\rangle$. 这个态是唯一确定的, 发生几率为$|\langle 10|\beta\rangle|^2=|c_{10}|^2/N^2$.

总体而言测得A为$a_1$并且测B为$b_0$的几率为$|c_{10}|^2$. 同样，测得A为$a_1$并且测B为$b_1$的几率为$|c_{11}|^2$.

实际上，测A得$a_1$的几率$|c_{10}|^2+|c_{11}|^2$是测A得$a_1$并且测B得$b_0$与得$b_1$的几率之和.