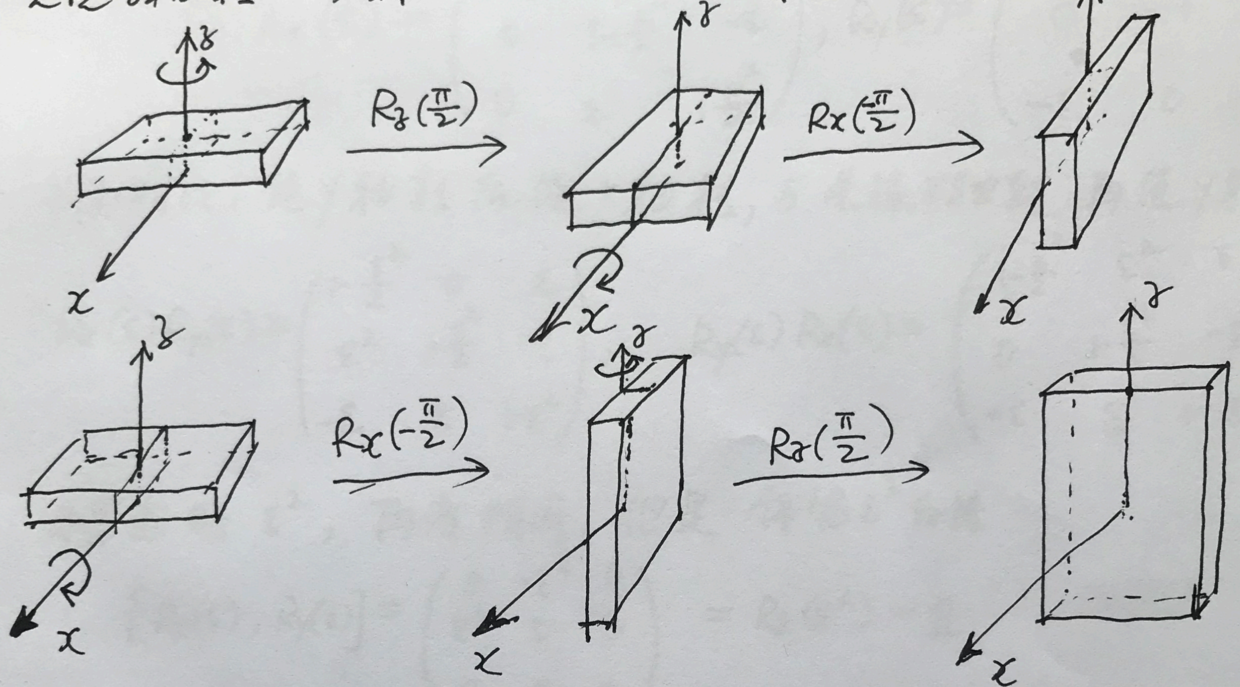
第十八讲

从这讲开始，我们来研究角动量理论.

§1. 旋转与角动量对易关系

有些转动可以"对易"：绕z轴转60°，再转30°，等效于先绕z轴转30°，再绕z轴转60°. 有些不能对易：



• 绕不同轴的转动不对易.

我们来定量地弄清这一点。考虑一个矢量 $\vec{V} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \xrightarrow{转动} \begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \\ V_z' \end{pmatrix}$

可写为 $\begin{pmatrix} V_x' \\ V_y' \\ V_z' \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$ R是3×3正交矩阵，满足 $RR^T = R^TR = 1$

这是因为 $\vec{V}$ 的长度转动不变！

$$|\vec{V}|^2 = \vec{V}^T\vec{V} = (R\vec{V})^T\cdot(R\vec{V}) = \vec{V}^T R^T R\vec{V} = |\vec{V}|^2$$

我们来具体看一个绕z轴逆时针旋转φ角的转动 $R_z(\phi)$

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

注意：有的书会把坐标轴顺时针转动φ角，称为"被动"旋转. 我们的讲法称为"主动"旋转. 两者等价

假设转动"无穷小"：$\phi \to \varepsilon \to 0$，忽略 ε^3 以上阶.

$$R_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

类似地：（利用轮换 $x \to y,\ y \to z,\ z \to x$）

$$R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix},\quad R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix}$$

下面对比：绕y轴转后绕x轴转，与先绕x轴转再绕y轴转

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ \varepsilon^2 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1-\varepsilon^2 \end{pmatrix},\quad R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon^2 & \varepsilon \\ 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1-\varepsilon^2 \end{pmatrix}$$

如果忽略 ε^2，两者相同. 但是保留 ε^2 的话

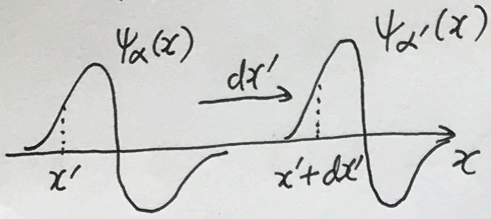
$$[R_x(\varepsilon), R_y(\varepsilon)] = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\varepsilon^2) - \mathbb{1}$$

$$\mathbb{1} = R_{any}(0)$$

我们可以把上面的"转动"推广到Hilbert空间！

§ 量子力学中的无穷小转动.

• 空间平移：把波函数向右移动 dx'.



$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle$ 是 $|\alpha\rangle$ 态的波函数.

平移导致 $|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha'\rangle$

$|\alpha\rangle$在x'的波函数值 $=$ $|\alpha'\rangle$ 在$x'+dx'$处的函数值

$$\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle = \langle x'+dx'|\alpha'\rangle = \psi_{\alpha'}(x'+dx')$$

写成态矢变换形式： $T(dx')\,|x'\rangle = |x'+dx'\rangle$

$$|\alpha'\rangle = T(dx')|\alpha\rangle = T(dx')\cdot\int dx'\,|x'\rangle\langle x'|\cdot|\alpha\rangle$$
$$= \int dx'\,|x'+dx'\rangle\langle x'|\cdot|\alpha\rangle$$

[或者，等价地，令 $x'+dx'=x''$，则 $x'=x''-dx'$

$|\alpha'\rangle = \int dx'\,|x'\rangle\langle x'-dx'|\alpha\rangle$，即 $\psi_{\alpha'}(x') = \psi_\alpha(x'-dx')$]

由于 $\langle x'|\alpha'\rangle = \int dx\,\langle x'|x+dx'\rangle\langle x|\alpha\rangle$，所以 $\langle x'|x+dx'\rangle$ 可视为T的矩阵元. 下面是T的性质:

1. 由于 $\langle\alpha|\alpha\rangle=1$，同时$\langle\alpha'|\alpha'\rangle=1$ 所以 T 是"转动"

$\langle\alpha'|\alpha'\rangle=\langle\alpha|T^+\cdot T|\alpha\rangle=1$ $\quad\therefore\ T^+T=1$ 亦即平移算符幺正

2. 两次相继操作满足: $T(dx'')\,T(dx') = T(dx'+dx'')$

3. 存在逆操作: $T^{-1}(dx') \equiv T(-dx')$

$T^{-1}(dx')T(dx')|\alpha\rangle = T^{-1}(dx')\,T(dx')|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \Rightarrow T^{-1}(dx')\,T(dx')=\mathbb{1}$

4. 当 $dx'\to 0$，$T(dx')$ 应当成为单位算符.

$$\lim_{dx'\to 0} T(dx') = \mathbb{1}$$

以上性质实际说明所有的T操作构成了一个群 Group.

如果无穷小变换可以写为 $T(d\vec{x}')=1-i\vec{K}\cdot d\vec{x}'$，其中 $\vec{K}=(K_x,K_y,K_z)$ 是厄密算符：$K_i^+=K_i$

那么以上4条性质都自动满足.

证明：① $T^+T=(1+i\vec{K}^+\cdot d\vec{x}')(1-i\vec{K}\cdot d\vec{x}')$

$$=1-i(\vec{K}-\vec{K}^+)\cdot d\vec{x}'+O(dx^2)=1$$

这里利用了 $K_i^+=K_i$

② $T(d\vec{x}'')T(d\vec{x}')=(1-i\vec{K}\cdot d\vec{x}'')(1-i\vec{K}\cdot d\vec{x}')$

$$=1-i\vec{K}\cdot(d\vec{x}''+d\vec{x}')=T(d\vec{x}'+d\vec{x}'')$$

③ 与 ④ 同样可证.

我们接受这个假设，就可以导出基本对易式.

$\hat{\vec{x}}\,T(d\vec{x}')|\vec{x}'\rangle=\hat{\vec{x}}\,|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle=(\vec{x}'+d\vec{x}')|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle$

$T(d\vec{x}')\hat{\vec{x}}\,|\vec{x}'\rangle=\vec{x}'\,T(d\vec{x}')|\vec{x}'\rangle=\vec{x}'\,|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle$

因此 $[\hat{\vec{x}},T(d\vec{x}')]|\vec{x}'\rangle=d\vec{x}'\,|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle\approx d\vec{x}'\,|\vec{x}'\rangle$

由于 $|\vec{x}'\rangle$ 是任意的，所以 $[\hat{\vec{x}},T(d\vec{x}')]=d\vec{x}'$

代入 $T(d\vec{x}')=1-i\vec{K}\cdot d\vec{x}'$，有 $-i\hat{\vec{x}}\,\hat{\vec{K}}\cdot d\vec{x}'+i(\hat{\vec{K}}\cdot d\vec{x}')\hat{\vec{x}}=d\vec{x}'$ II

观察第 j 个分量 $-i\hat{x}_j(K_1dx_1'+K_2dx_2'+K_3dx_3')$

$$+i(K_1dx_1'+K_2dx_2'+K_3dx_3')\hat{x}_j=dx_j'$$

可得 $[\hat{x}_j,\hat{K}_i]=i\delta_{ij}$

由于T本身无量纲，$\vec{K}$ 的量纲应是 $\frac{1}{L}$，因此是波矢

$T(d\vec{x}')=1-i\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot d\vec{x}'$，$\Rightarrow[x_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}$

$\vec{p}$ 子是动量算符.

进一步考虑有限的平移：沿 x 轴移动 $\Delta x'$

$$T(\Delta x')\,|\vec{x}'\rangle = |\vec{x}' + \Delta\vec{x}'\rangle$$

$T(\Delta x') = T\left(\frac{\Delta x'}{N} \times N\right)$ 令 $N \to \infty$，$\frac{\Delta x'}{N}$ 是无穷小移动.

因此 $T(\Delta x') = T\left(\frac{\Delta x'}{N} + \cdots + \frac{\Delta x'}{N}\right) = T\left(\frac{\Delta x'}{N}\right) \cdots T\left(\frac{\Delta x'}{N}\right)$

而 $T\left(\frac{\Delta x'}{N}\right) = 1 - \frac{i p_x}{\hbar} \cdot \frac{\Delta x'}{N} = e^{-\frac{i p_x}{\hbar} \cdot \frac{\Delta x'}{N}}$

所以 $T(\Delta x') = e^{-\frac{i p_x}{\hbar} \Delta x'}$，因此 p_x 也称 x方向 平移的生成元 (generator)

任意：$T(\Delta x' \hat{e}_x + \Delta y' \hat{e}_y + \Delta z' \hat{e}_z) = e^{-i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \Delta\vec{x}'}$

由于 $T(\Delta y' e_y)\, T(\Delta x' e_x) = T(\Delta x' e_x + \Delta y' e_y) = T(\Delta x' e_x)\, T(\Delta y' e_y)$

可导出 $[T(\Delta y' e_y), T(\Delta x' e_x)] = \frac{-\Delta x' \Delta y'}{\hbar^2}[p_y, p_x] = 0$

因此 $[p_x, p_y] = 0$

当群的生成元对易，称此群为阿贝尔群 (Abelian)

利用无穷小平移 dx'

$$\left(1 - \frac{i p_x dx'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = \int dx\, T(dx')\,|x\rangle\langle x|\alpha\rangle$$

$$= \int dx\, |x\rangle\langle x - dx'|\alpha\rangle$$

$$= \int dx\, |x\rangle\, \psi_\alpha(x - dx') = \int dx\, |x\rangle\left(\psi_\alpha(x) - \frac{\partial \psi_\alpha(x)}{\partial x} dx'\right)$$

左右同时以 $\langle x''|$ 作用，

$$\psi_\alpha(x'') - \langle x''|\frac{i p_x dx'}{\hbar}|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x'') - \frac{\partial \psi_\alpha(x'')}{\partial x''} dx'$$

因此 $\langle x''|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \psi_\alpha(x'')$

我们导出了坐标表象下 $\hat{p}_x$ 的微分算符.

• 时间平移（演化）

$|\alpha(t)\rangle = U(t,t_0)|\alpha(t_0)\rangle$，由于 $\langle\alpha(t)|\alpha(t)\rangle = \langle\alpha(t_0)|\alpha(t_0)\rangle$

$\Rightarrow U^{+}(t,t_0)\cdot U(t,t_0) = 1 \rightarrow$ 幺正

仍然考虑无穷小移动.

$|\alpha(t_0+dt)\rangle = U(t_0+dt,t_0)|\alpha(t_0)\rangle$

显然 $\lim\limits_{dt\to 0} U(t_0+dt,t_0) = \mathbb{1}$ 单位算符.

又有 $U(t_0+dt+dt', t_0+dt)U(t_0+dt,t_0) = U(t_0+dt+dt', t_0) \leftarrow$ 乘法

令 $U(t_0+dt,t_0) = 1 - i\Omega\, dt$，其中 $\Omega^{+} = \Omega$，可保证上面的性质.

Ω 具有 $\frac{1}{t}$ 的量纲. 我们知道 $[\hbar\Omega]$ = 能量.

自然地：$\Omega = \frac{H}{\hbar}$ 因此 $U(t_0+dt,t_0) = 1 - \frac{iHdt}{\hbar}$.

承认这一点，我们就可以导出 Schrödinger Eq!

$U(t+dt,t_0) = U(t+dt,t)\,U(t,t_0) = (1 - \frac{iH}{\hbar}dt)\,U(t,t_0)$

这里 $t-t_0$ 不一定无穷小. 因此

$U(t+dt,t_0) - U(t,t_0) = -i\frac{H}{\hbar}dt\; U(t,t_0)$

$= U(t,t_0) + \frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)\,dt - U(t,t_0)$

$\therefore\; i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = H\,U(t,t_0)$ 这就是演化算符

形式的 S-eq. 作用到 $|\alpha(t_0)\rangle$

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)|\alpha(t_0)\rangle = H\,U(t,t_0)|\alpha(t_0)\rangle$

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha(t)\rangle = H|\alpha(t)\rangle \leftarrow$ Seq

进一步：$U(t,t_0) = e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}$，$\therefore$ H 是时间演化生成元