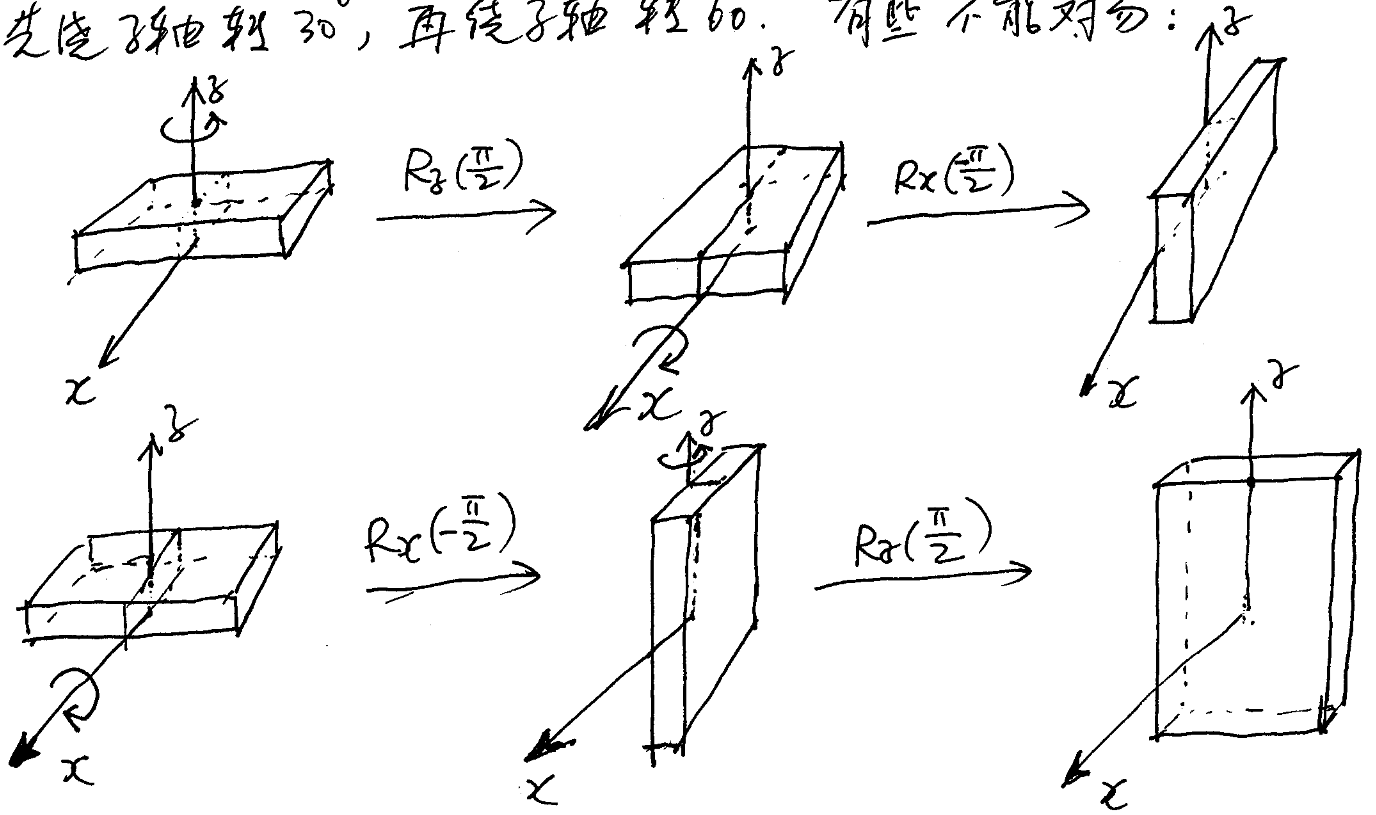
第十八讲

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 $\boxed{RR^T = R^TR = 1}$

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：有的书会说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：（利用轮转 $x \to y$, $y \to z$, $z \to x$）

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

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

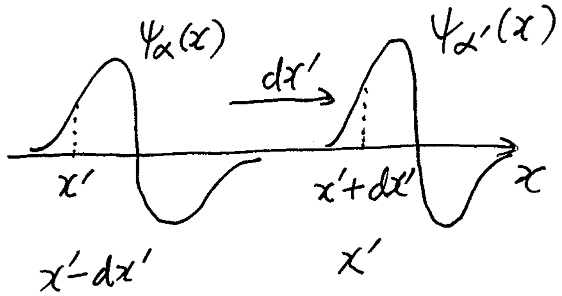
$$[R_x(\varepsilon), R_y(\varepsilon)] = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\varepsilon^2) - \mathbb{1}$$

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

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"：推广到Hilbert空间

• 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 $|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha'\rangle$

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

• $\psi_\alpha(x')=\langle x'|\alpha\rangle = \langle x'+dx'|\alpha'\rangle = \psi_{\alpha'}(x'+dx')$ (1) ← 实空间平移

可证明 $\langle\alpha'|x|\alpha'\rangle=\langle\alpha|x|\alpha\rangle+dx'$

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

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

对应 $\vec{V}'=R\vec{V}$

$$= \int dx'\,|x'+dx'\rangle\langle x'|\cdot|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{导出}} (1)\text{式}$$

[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 $\boxed{\langle x'|x+dx'\rangle = \langle x'|T(dx)|x\rangle}$ 记为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" ← Hilbert空间

$\langle\alpha'|\alpha'\rangle=\langle\alpha|T^\dagger\cdot T|\alpha\rangle=1$ $\therefore$ $\boxed{T^\dagger T=1}$ 即平移算符幺正

群特性. 封闭性

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

结合律: $(T(dx_1)T(dx_2))T(dx_3) = T(dx_1)(T(dx_2)T(dx_3))$

3. 存在逆操作: $T^{-1}(dx')\equiv T(-dx')$

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

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：$\boxed{K_i^+ = K_i}$ 波矢量纲

那么以上4条性质都自动满足（结合律也满足）

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，认可以导出量子力学基本对易式。

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

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

因此 $[\hat{\vec{x}}, T(d\vec{x}')]\,|\vec{x}'\rangle = d\vec{x}'\,|\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle \approx d\vec{x}'\,|\vec{x}'\rangle$（准确到 dx' 一阶）

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

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 $-i\hat{x}_j(K_1 dx_1' + K_2 dx_2' + K_3 dx_3')$

$$+ i(K_1 dx_1' + K_2 dx_2' + K_3 dx_3')\hat{x}_j = dx_j'$$

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

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

而 $\vec{p}$ 是动量算符。

● 进一步考虑有限的平移：沿 x 轴移动 $\Delta x'$ ← 不是无穷小

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

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

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

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

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

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

由于 $T(\Delta y'\hat{e}_y)\,T(\Delta x'\hat{e}_x) = T(\Delta x'\hat{e}_x+\Delta y'\hat{e}_y) = T(\Delta x'\hat{e}_x)\,T(\Delta y'\hat{e}_y)$

可导出 $[T(\Delta y'\hat{e}_y), T(\Delta x'\hat{e}_x)] \underset{\uparrow}{=} \frac{-\Delta x'\Delta y'}{\hbar^2}[P_y, P_x] = 0$

展开到 Δx^2，Δy^2（设 Δx，Δy 小量）

因此 $\boxed{[P_x, P_y]=0}$

☆ 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'

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

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

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

左右同时以 $\langle x''|$ 作用，

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

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）. 时间本身不是力学量（算符）

$$|\alpha(t)\rangle = U(t,t_0)|\alpha(t_0)\rangle,$$ 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. • $U(t_2,t_0) = U(t_2,t_1)U(t_1,t_0)$ 要求

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

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!

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

这里 $t-t_0$ 不一定无穷小. 因此

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

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

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

形式的 S-eq. 作用到 $|\alpha(t_0)\rangle$

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

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

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