第八章　角动量 I

这一章的主要内容

1. 角动量是空间旋转变换的生成元, 有其特定的代数结构.
2. 角动量的代数结构决定了角动量的本征值和本征态.
3. 利用自旋角动量, 讨论了互文性问题.
4. 从旋转变换的角度重新讨论轨道角动量.
5. 向量算子, Wigner-Eckart 定理.

1. Galileo 时空变换

非相对论情形下的时空变换是 Galileo 变换:

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{r} \longrightarrow \mathbf{r}' = R\mathbf{r} + \mathbf{a} + \mathbf{v}t \\ t \longrightarrow t' = t + s \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

其中, R 描述空间旋转变换, 它是一个 3×3 的特殊正交矩阵. $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$ 表示空间平移向量. $\mathbf{v}$ 是一个惯性系相对于另一个惯性系的速度. s 是时间平移量. Galileo 变换构成 Galileo 群.

在量子力学中, 描述微观粒子状态的量不是位置或动量, 而是量子态, 而观测量则要表示为厄密算子的形式, 所以量子力学中讨论时空变换就不仅仅是 (1) 式所示的内容, 而是要关注时空变换对量子态和观测量的影响.

对于空间的变换是空间平移和空间旋转, 这将影响到量子态在位置空间中的形式, 即波函数. 所以, 下面的讨论实际上是关于位置表象中的量子态而言的, 但是, 得到的结论将推广到其它情形, 例如描述粒子的内禀属性的量子态.

2. Wigner 定理

在时空变换下, 量子态和力学量分别变为

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle, \quad A \longrightarrow A'.$$

须满足两个条件:

1. 本征值不变, 即

$$\text{如果 } A|\alpha_j\rangle = a_j|\alpha_j\rangle, \text{那么 } A'|\alpha'_j\rangle = a_j|\alpha'_j\rangle. \tag{2}$$

2. 观测结果的几率不变, 即

$$\text{如果 } |\psi\rangle = \sum_j c_j |\alpha_j\rangle \text{ 变为 } |\psi'\rangle = \sum_j c'_j |\alpha'_j\rangle, \text{那么 } |c_j|^2 = |c'_j|^2, \tag{3}$$

Wigner 定理 (参看 [1]) 与第 2 个条件密切相关.

Wigner 定理

设 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 是 Hilbert 空间中的两个向量, 在变换 U 的作用下, $|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle \to |\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle$. 如果 U 能够保证这两个向量的内积的模不变, 那么 U 是酉变换或者是反酉变换.

根据 Wigner 定理, 时空变换反映在量子态上, 要么是酉变换, 要么是反酉变换.

酉变换是我们熟悉的, 它保证两个量子态的内积在变换前后不变. 下面介绍反酉变换.

反酉变换 反酉变换属于反线性变换,

满足如下条件的算子是反线性算子, 实现反线性变换,

$$A(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1^* A|\psi_1\rangle + c_2^* A|\psi_2\rangle \tag{4}$$

反线性算子包含复共轭的操作. 对于反线性算子 A,

$$Ac = c^* A, \quad c \in \mathbb{C}$$

两个反线性算子的相乘得到一个线性算子.

如果

- A 是反线性算子,
- 存在逆 A^{-1},
- 对于任意的 $|\psi\rangle$, 有 $\|\,|\psi\rangle\,\| = \|A|\psi\rangle\,\|$,

那么 A 是反酉算子.

以下过程将证明, 在反酉算子变换前后, 两个量子态之间的内积互为复共轭.

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle, \quad |\varphi'\rangle = A|\varphi\rangle$$

$$\text{Let } |\xi\rangle = |\psi\rangle + |\varphi\rangle, \quad |\xi'\rangle = A|\xi\rangle = |\psi'\rangle + |\varphi'\rangle$$

$$\|\,|\xi\rangle\,\|^2 = \langle\xi|\xi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle + \langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\psi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\psi\rangle$$

$$\|\,|\xi'\rangle\,\|^2 = \langle\xi'|\xi'\rangle = \langle\psi'|\psi'\rangle + \langle\varphi'|\varphi'\rangle + \langle\psi'|\varphi'\rangle + \langle\varphi'|\psi'\rangle$$

$$\|\,|\xi\rangle\,\|^2 = \|\,|\xi'\rangle\,\|^2$$

$$\text{Re}\,\langle\psi|\varphi\rangle = \text{Re}\,\langle\psi'|\varphi'\rangle$$

$$\text{Let } |\eta\rangle = |\psi\rangle + i|\varphi\rangle, \quad |\eta'\rangle = A|\eta\rangle = A|\psi\rangle - iA|\varphi\rangle$$

$$\text{Im}\,\langle\psi|\varphi\rangle = -\text{Im}\,\langle\psi'|\varphi'\rangle$$

$$\therefore \quad \langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi'|\varphi'\rangle^*$$

(4) 式定义了反线性算子右矢的作用结果, 但是没有作用于左矢的定义. 此前, 我们通过考虑线性泛函定义了左矢. 对于任意的线性算子, 可以定义线性泛函. 但是现在我们面临的是反线性算子. 所以, 我们不将反线性算子作用于左矢, 也不能写 $A^\dagger$.

反西变换将被用来描述在下一章讨论的时间反演变换.

Wigner 定理的主要内容 设 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 是 Hilbert 空间中的任意两个向量. 用 ψ 表示 $|\psi\rangle$ 的等价类,

$$\psi = \left\{ |\psi'\rangle \,\middle|\, |\psi'\rangle = c\,|\psi\rangle\,,\ c \in \mathbb{C}, |c| = 1 \right\}$$

也就是说, 等价类 ψ 表示所有与 $|\psi\rangle$ 仅相差一个相因子的向量的集合. ψ 实际上是投影空间 (或者说 ray space) 中的向量, 须注意到 ψ 不属于 $|\psi\rangle$ 所在的 Hilbert 空间. 简单地, 我们可以把 ψ 视作密度算子 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$. 类似地, φ 表示 $|\varphi\rangle$ 的等价类, 简单地视作 $\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$.

考虑投影空间中的变换 T,

$$\psi \longrightarrow \psi' = \mathsf{T}\psi, \quad \varphi \longrightarrow \varphi' = \mathsf{T}\varphi$$

对于变换 T 有这样的要求,

$$(\psi, \varphi) = (\psi', \varphi') \tag{5}$$

这里 $(\cdot,\cdot)$ 表示投影空间中的内积 (而不是 Hilbert 空间中的内积). 但是, 我们还没有定义投影空间中的内积. 仍然采用简单的做法, 既然 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|, \varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, 我们就把投影空间中的内积写作

$$(\psi, \varphi) = \mathrm{Tr}(\psi\varphi) = |\langle\psi|\varphi\rangle|^2$$

于是我们希望把 (5) 改写为

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 = |\langle\psi'|\varphi'\rangle|^2 \tag{6}$$

但是, 这里有个问题, 变换 T 是作用于投影空间中的向量的, 我们并不知道相应的 Hilbert 空间中的向量该如何变化, 即

$$|\psi'\rangle = ? \quad |\varphi'\rangle = ?$$

Wigner 定理的主要内容就是: 对于任何一个满足条件 (5) 的投影空间中的变换 T, 总是存在 Hilbert 空间中的变换 U, 使得

1. 如果 $|\psi\rangle$ 属于等价类 ψ, 那么 $U|\psi\rangle$ 一定属于等价类 $\mathsf{T}\psi$.
2. $U(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = U|\psi\rangle + U|\varphi\rangle$.
3. $U(c|\psi\rangle) = \chi(c)U|\psi\rangle$, 其中 $c \in \mathbb{C}$, $\chi(c) = c$ 或者 $\chi(c) = c^*$.
4. 令 $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$, $|\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle$, 有 $\langle\psi'|\varphi'\rangle = \chi\big(\langle\psi|\varphi\rangle\big)$

一些解释:

- 上述第一个条件是对变换 U 的基本要求. 如果变换 U 满足这个条件, 那么就说它是与变换 T 相容的 (compatible with T).
- 仅仅根据述条件 2 不能说明 U 是线性的. Bargmann 将满足 $U(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = U|\psi\rangle + U|\varphi\rangle$ 的 U 称为加法性的 (additive).

- 如果具有加法性的 U 又能满足上述条件 3 和 4, 那么就是酉的或者反酉的.

因此, 投影空间中保持内积不变的变换 (在量子力学中相当于保持几率不变的变换) 体现在态空间 (Hilbert 空间) 中的变换就是酉变换或者反酉变换.

还需要考虑的是 U 变换的唯一性. 按照 Bargmann 文中的话说

> It is of course important to know to what extent U is determined by a ray mapping T which preserves inner products.

关于这个问题, 有下面的定理.

定理 设 T 是保证投影空间的向量的内积不变的变换. 如果 U_1 和 U_2 是 Hilbert 空间上的与 T 相容的并且具有加法性的 (additive) 变换, 那么它们只能相差一个恒定的单位复数, 即, $U_2 = U_1\theta$, $|\theta| = 1$. ■

注意这个定理并不要求 U_1 和 U_2 满足 Wigner 定理中的条件 3 或条件 4, 它们只要与 T 相容并且具有加法性就可以了. 因此, 结合 Wigner 定理, 有一般性的结论: 保证量子态的内积的模不变的变换是酉变换或者反酉变换.

3. 群与代数

在整个这门课中, 我们反复提到并使用 Lie 代数和 Lie 群之间的联系:

$$\boxed{\text{Lie 群} \underset{\exp}{\overset{\text{无穷小变换}}{\rightleftharpoons}} \text{Lie 代数}}$$

关于这件事, 参考 [2] 中的第 4 章和第 7 章, 并建议回顾 SU(2) 变换的生成元的推导过程.

下面抄一段该书第 4 章的摘要:

> The study of Lie groups can be greatly facilitated by linearizing the group in the neighborhood of its identity. This results in a structure called a Lie algebra. The Lie algebra retains most, but not quite all, of the properties of the original Lie group. Moreover, most of the Lie group properties can be recovered by the inverse of the linearization operation, carried out by the EXPonential mapping. Since the Lie algebra is a linear vector space, it can be studied using all the standard tools available for linear vector spaces. In particular, we can define convenient inner products and make standard choices of basis vectors. The properties of a Lie algebra in the neighborhood of the origin are identified with the properties of the original Lie group in the neighborhood of the identity. These structures, such as inner product and volume element, are extended over the entire group manifold using the group multiplication operation.

4. 空间平移变换

在讨论位置表象和动量表象的时候说过空间平移变换, 这里再重复一遍, 算是空间旋转变换的铺垫.

空间平移变换这一操作可以面向不同的对象, 有三种不同的情形:

1. 对空间位置坐标进行平移, 这就是 $\mathbf{r} \longrightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}$, 其中 $\mathbf{a}$ 是某个常矢量, 表示平移量.

2. 考虑位置坐标的函数 $f(\mathbf{r})$, 在空间平移变换下变为另一种函数形式 $f'(\mathbf{r})$, 这个函数形式是怎样的?

3. 考虑空间位置算子 $\mathbf{R}$, 在空间平移变换下变为什么?

第 1 种情形 平移变换 $T(\mathbf{a})$ 作用于向量 $\mathbf{r}$, 得到另一个向量 $\mathbf{r}' = T(\mathbf{a})\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{a}$, 或者 $\mathbf{r} = T^{-1}(\mathbf{a})\mathbf{r}' = \mathbf{r}' - \mathbf{a}$.

第 2 种情形 考虑简单的沿 x 方向的平移, 平移的对象是函数 $f(x)$. 形象地说, 将函数 $f(x)$ 的图像整体 (比如说) 向右平移一段距离 a, 于是得到另一个函数, 记作 $f'(x)$, 如图 1 所示, 显然

$$f'(x) = f(x-a)$$

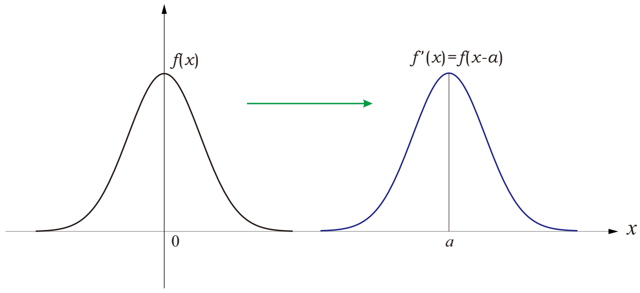


图 1: 将函数 $f(x)$ 向右平移 a.

也可以在两个参考系中描述. 设想有两个参考系, S 和 S', 它们的空间位置坐标分别用 x 和 x' 表示. 参考系 S' 在 S 的右侧, 相距 a. 在 S 中有观测者 A, 看到的函数是 $f(x)$. 在参考系 S' 中, 有观测者 B. 如果 B 在参考系 S' 中看到的函数图像 (用 $f'(x')$ 表示) 等同于 A 在参考系 S 中看到的函数图像, 那么就应该有

$$f'(x') = f(x)$$

以图 1 所示的函数为例, A 在参考系 S 的原点看到函数 $f(x)$ 的最大值, B 也应该在参考系 S' 的原点看到函数 $f'(x')$ 的最大值.

如果把这个关系放在参考系 S 中描述, 那么, $x' = x + a$, $f'(x+a) = f(x)$, 或者

$$f'(x) = f(x-a)$$

平移变换当然构成群, 平移变换的算子是 $e^{-a\frac{\partial}{\partial x}} = e^{-iaP_x/\hbar}$, 这是酉算子.

$$f'(x) = e^{-iaP_x/\hbar} f(x)$$

这就是我们常说的, 动量是平移变换的生成元.

注 1 注意区别两件事情: ① 空间平移变换, ② 在不同的参考系中观察同一个函数图像. 前者会改变量子态和力学量, 而后者只是表象的变换. 在空间平移变换下, 需要将参考系 S 中的函数图像 “推到” 参考系 S' 中, 并且满足 $f'(x') = f(x)$, 从而有 $f'(x) = f(x-a)$, 或者 $f'(x) = e^{-iaP_x/\hbar} f(x)$.

如果在不同的参考系中观察同一个函数, 那么对于空间中的某一点, A 在 S 系中的坐标 (比如说) 是 x_0, 而 B 在 S' 系中的坐标是 $x_0' = x_0 - a$. 两个观测者 A 和 B 应该给出相同的函数值, 即 $f(x_0) = f'(x_0')$, 或者 $f'(x_0 - a) = f(x_0)$, 也就是 $f'(x_0) = f(x_0 + a)$, 一般地,

$$f'(x) = f(x+a), \quad \text{或者 } f'(x) = e^{iaP_x/\hbar} f(x)$$

■

注 2 一般地, 对空间位置坐标作变换,

$$\mathbf{r} \xrightarrow{\mathsf{T}} \mathbf{r}' = \mathsf{T}\mathbf{r}$$

其中 T 泛指一般意义上的空间变换, 可以是平移, 也可以是将要讨论的空间旋转变换.

f 是空间位置的函数, $f = f(\mathbf{r})$. 空间位置变换体现在函数 f 上, 表示为 $f \xrightarrow{\mathcal{T}} f' = \mathcal{T} f$, 其效果是,

$$f'(\mathbf{r}') = f(\mathbf{r})$$

由于 $\mathbf{r}' = \mathsf{T}\mathbf{r}$, 所以

$$f'(\mathsf{T}\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})$$

或者表示为

$$f'(\mathbf{r}) = f(\mathsf{T}^{-1}\mathbf{r}) \tag{7}$$

■

类似地, 在空间平移变换下, 波函数 $\psi(x)$ 变为

$$\psi'(x) = \psi(x-a) \tag{8}$$

注意到

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle, \quad \psi'(x) = \langle x|\psi'\rangle, \quad \psi(x-a) = \langle x-a|\psi\rangle$$

于是空间平移变换可以表示为

$$\langle x|\psi\rangle \longrightarrow \langle x|\psi'\rangle = \langle x-a|\psi\rangle \tag{9}$$

上式有两种阅读方式: 如果认为 $\langle x|\psi\rangle \longrightarrow \langle x|\psi'\rangle$, 那么是主动观点, 量子态从 $|\psi\rangle$ 变为 $|\psi'\rangle$; 如果认为 $\langle x|\psi\rangle \longrightarrow \langle x-a|\psi\rangle$ 那么是被动观点, 左矢形式的基向量从 $\langle x|$ 变为 $\langle x-a|$.

可以证明, 在被动观点中,

$$\langle x|\, e^{-iaP_x/\hbar} = \langle x-a| \tag{10}$$

证明 (10)

$\langle x|$ 是位置算子 X 的左矢形式的本征态, $\langle x|\, X = x\,\langle x|$.

$$\left[X, e^{-iaP_x/\hbar}\right] = a e^{-iaP_x/\hbar}$$

$$\langle x|\left[X, e^{-iaP_x/\hbar}\right] = a\,\langle x|\, e^{-iaP_x/\hbar}$$

$$\langle x|\, x e^{-iaP_x/\hbar} - \langle x|\, e^{-iaP_x/\hbar} X = a\,\langle x|\, e^{-iaP_x/\hbar}$$

$$\left(\langle x|\, e^{-iaP_x/\hbar}\right) X = (x-a)\left(\langle x|\, e^{-iaP_x/\hbar}\right)$$

表明 $\langle x|\, e^{-iaP_x/\hbar}$ 是 X 的本征态, 对应的的本征值是 $x-a$, 不考虑相因子的差异, 认为

$$\langle x|\, e^{-iaP_x/\hbar} = \langle x-a|$$

用右矢形式表示,

$$e^{iaP_x/\hbar}\,|x\rangle = |x-a\rangle$$

回来看 (9), 有

$$\langle x|\psi'\rangle = \langle x-a|\psi\rangle = \langle x|e^{-iaP_x/\hbar}|\psi\rangle \tag{11}$$

这就是说, 在主动观点中,

$$|\psi'\rangle = e^{-iaP_x/\hbar}|\psi\rangle \tag{12}$$

这本是以前说过空间平移变换对量子态的作用, 这里又说了一遍, 其间的过程是:

1. 空间平移变换将函数 $f(x)$ 变为 $f'(x) = f(x-a)$, 对于波函数也是如此, 即 (8) 式.
2. 引入位置表象的基向量 $|x\rangle$, 得到 (9), 继而 (10), 这相当于用被动观点描述.
3. 被动观点和主动观点可以统一地体现在 (11) 中, 最后 (12) 式给出空间平移变换作用于量子态的抽象形式.

第 3 种情形 空间平移变换作用于位置算子 X, 将其变为 X'. 为了考虑 X 的形式, 需要用到时空变换应满足的条件 (2).

在参考系 S 中, 观测者 A 有观测量 X, 即位置算子. 本征值和本征态分别是 x 和 $|x\rangle$. 作空间平移变换, 在参考系 S' 中, 观测者 B 有观测量 X', 本征值和本征态分别是 x' 和 $|x'\rangle$. 现在, X', x' 和 $|x'\rangle$ 的形式都不清楚.

条件 (2) 要求 $x = x'$, 听起来有些奇怪, 需要稍作分析. 假设粒子的状态是位置算子 X 的本征函数, 即 δ 函数, $\psi(x) = \delta(x-x_0)$. 在此状态中观测者 A 测量位置算子 X, 得到的结果是本征值 x_0. 空间平移变换之后, 在参考系 S' 中, 观测者 B 面临的粒子的状态是 $\psi'(x')$. 在 B 看来, 这也是一个 δ 函数, 而且也是在与原点距离为 x_0 的地方有一个无穷大的峰值. B 测量位置算子 X', 得到的结果也一定是 x_0, 不可能是 $x_0 + a$. 观测者 B 必须把探测器放在参考系 S' 中位置 $x' = x_0$ 的地方, 才能观测到响应, 放在其它地方则一无所获. 因此, 本征值是算子 (这里是 X) 数学意义上固有的性质, 把算子移动到另一个参考系中, 本征值不改变.

现在有下面两个本征方程,

$$X|x\rangle = x|x\rangle\,, \quad X'|x'\rangle = x|x'\rangle$$

基向量 $|x\rangle$ 和 $|x'\rangle$ 之间的关系仍不清楚, 再去关注 $\psi'(x') = \psi(x)$, 即

$$\langle x|\psi\rangle = \langle x'|\psi'\rangle$$

因为 $|\psi'\rangle = e^{-iaP_x/\hbar}|\psi\rangle$, 所以

$$\langle x|\psi\rangle = \langle x'|e^{-iaP_x/\hbar}|\psi\rangle$$

这意味着

$$\langle x| = \langle x'|\,e^{-iaP_x/\hbar}$$

也就是

$$|x'\rangle = e^{-iaP_x/\hbar}|x\rangle = |x+a\rangle$$

把这个关系代入 $X'|x'\rangle = x|x'\rangle$,

$$X'e^{-iaP_x/\hbar}|x\rangle = xe^{-iaP_x/\hbar}|x\rangle$$

$$e^{iaP_x/\hbar}X'e^{-iaP_x/\hbar}|x\rangle = x|x\rangle$$

表明 $e^{iaP_x/\hbar}X'e^{-iaP_x/\hbar} = X$, 于是有

$$X' = e^{-iaP_x/\hbar}Xe^{iaP_x/\hbar} = X - a\mathbb{1}$$

其中用到了 Baker-Hausdorff 公式.

或者, 不使用 Baker-Hausdorff 公式, 考虑 $X'|x'\rangle = x|x'\rangle$, 也就是

$$X'|x+a\rangle = x|x+a\rangle$$

可以直接看出

$$(X - a\mathbb{1})|x+a\rangle = (x+a)|x+a\rangle - a|x+a\rangle = x|x+a\rangle$$

所以

$$X' = X - a\mathbb{1}.$$

推广到三维情形, 平移量为 $\mathbf{a}$ 的空间平移变换是酉变换 $e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}$, 将量子态 $|\psi\rangle$ 变为 $e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}|\psi\rangle$, 将位置表象的基向量 $|\mathbf{r}\rangle$ 变为 $e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}+\mathbf{a}\rangle$, 将位置算子 $\mathbf{R}$ 变为

$$e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}\mathbf{R}e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar} = \mathbf{R} - \mathbf{a}\mathbb{1}$$

5. 空间旋转变换

我们将沿两种途径分析空间旋转变换.

途径一 仿照空间平移变换的讨论, 考虑以下几种情形:

1. 对三维实空间中的向量 $\mathbf{r}$ 进行旋转变换.
2. 对函数 $f(\mathbf{r})$ 或者波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 进行旋转变换, 得到生成元的具体形式, 并称之为角动量.
3. 根据时空变换应满足的条件 (2), 以及角动量的具体形式和相关的对易子, 分析旋转变换对位置以及其它力学量的改变.

途径二

1. 直接认为角动量是空间旋转变换的生成元, 但是不清楚它的具体形式, 也不知道角动量与位置算子或动量算子的对易关系.
2. 分析无穷小旋转变换, 依据条件 (2), 推导与角动量相关的对易子.
3. 尽量避免指明角动量的具体形式, 因而不得不借助经典力学的素材进行类比和推广.

途径一的过程是在位置表象中展开的, 因而其结论似乎局限于轨道角动量. 途径二的主要过程也是在位置表象中进行的, 但是没有用到轨道角动量的具体形式, 因而可以认为在某种程度上讨论了一般意义的角动量. 也正是因为缺少了角动量的具体表示, 使得在推导过程中需要参考一些已有知识进行类比.

5.1. 途径一

考虑简单的情形, 绕 z 轴旋转角度 ϕ, 向量 $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ 变为

$$\mathbf{r} \longrightarrow \mathbf{r}' = R(z,\phi)\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\mathbf{r}$$

也就是

$$\left.\begin{aligned} x' &= x\cos\phi - y\sin\phi \\ y' &= x\sin\phi + y\cos\phi \\ z' &= z \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

接着讨论对函数的旋转变换, 我们直接说波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 的变化. 需要注意的是, 要讨论的是波函数的旋转, 而不是在另一个旋转了的参考系中描述同一个波函数.

相对于参考系 S, 参考系 S' 有一个绕 z 轴 ϕ 角度的旋转. 两个参考系的空间位置坐标分别是 (x, y, z) 和 (x', y', z'), 它们之间的联系是

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R(z, \phi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

将波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 旋转到参考系 S' 中, 在 S' 系中看来, 波函数的形式是 $\psi'(\mathbf{r}')$, 并且

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r})$$

由此得到

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi\big(R^{-1}(z,\phi)\mathbf{r}\big) = \psi\big(x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z\big) \tag{14}$$

考虑无穷小变换, $\phi \to \delta\phi$, 将 $\psi\big(x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z\big)$ 展开到 $\delta\phi$ 的一级项, 得到生成元

$$-x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x}$$

反过来, 用 Exp 形式表示有限大小的旋转变换,

$$\psi'(x, y, z) = \exp\left\{\phi\left(-x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\}\psi(x, y, z)$$

令

$$L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

将 L_z 称为角动量的 z 分量在位置表象中的表示. 旋转变换表示为

$$\psi'(x, y, z) = e^{-i\phi L_z/\hbar}\psi(x, y, z) \tag{15}$$

类似地, 考虑绕 x 轴和 y 轴的旋转变换, 得到角动量的 x 分量和 y 分量在位置表象中的表示,

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

注 3 这里并不是通过 $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ 引入角动量的, 而是考虑了旋转变换以及无穷小旋转变换, 将其生成元视作角动量, 由此得到的 $L_{x,y,z}$ 与 $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ 是一致的. ■

得到了角动量的具体形式之后, 自然有相关的对易关系,

$$\begin{aligned} &[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad \cdots\cdots \\ &[L_z, X] = i\hbar Y, \quad [L_z, Y] = -i\hbar X, \quad [L_z, Z] = 0, \quad \cdots\cdots \\ &[L_z, P_x] = i\hbar P_y, \quad [L_z, P_y] = -i\hbar P_x, \quad [L_z, P_z] = 0, \quad \cdots\cdots \end{aligned}$$

现在引入位置表象的基向量 $|\mathbf{r}\rangle = |x, y, z\rangle$, 将波函数经历的旋转变换表示为

$$\begin{aligned}\langle x, y, z|\psi\rangle \longrightarrow \langle x, y, z|\psi'\rangle &\xlongequal{\text{Using (14)}} \psi\big(x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z\big)\\ &= \langle x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z|\psi\rangle\end{aligned}$$

如果用被动观点阅读上式, 就有基向量的变换,

$$\langle x, y, z| \longrightarrow \langle x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z|$$

可以证明,

$$\langle x, y, z|\, e^{-i\phi L_z/\hbar} = \langle x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z| \tag{16}$$

证明 (16)

这里不得不借助 Baker-Hausdorff 公式,

$$e^{-i\phi L_z/\hbar} X e^{i\phi L_z/\hbar} = X\cos\phi + Y\sin\phi$$

$$e^{-i\phi L_z/\hbar} Y e^{i\phi L_z/\hbar} = -X\sin\phi + Y\cos\phi$$

$$e^{-i\phi L_z/\hbar} Z e^{i\phi L_z/\hbar} = Z$$

利用上面第一个等式,

$$\begin{aligned}\langle x, y, z|\, e^{-i\phi L_z/\hbar} X &= \langle x, y, z|\,(X\cos\phi + Y\sin\phi) e^{-i\phi L_z/\hbar}\\ &= (x\cos\phi + y\sin\phi)\,\langle x, y, z|\, e^{-i\phi L_z/\hbar}\end{aligned}$$

这表明 $\langle x, y, z|\, e^{-i\phi L_z/\hbar}$ 是 X 的本征态, 对应的本征值是 $x\cos\phi + y\sin\phi$.

类似地, 利用第二个和第三个等式, 分别有

$\langle x, y, z|\, e^{-i\phi L_z/\hbar}$ 是 Y 的本征态, 对应的本征值是 $-x\sin\phi + y\cos\phi$.

$\langle x, y, z|\, e^{-i\phi L_z/\hbar}$ 是 Z 的本征态, 对应的本征值是 z.

因此, 把 $\langle x, y, z|\, e^{-i\phi L_z/\hbar}$ 表示为 $\langle x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z|$, 即 (16) 式.

波函数经历的旋转变换重写为

$$\langle x, y, z|\psi\rangle \longrightarrow \langle x, y, z|e^{-i\phi L_z/\hbar}|\psi\rangle$$

进而写出对量子态 $|\psi\rangle$ 的旋转变换,

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = e^{-i\phi L_z/\hbar}\,|\psi\rangle$$

这里的 L_z 脱离了的位置表象, 具有抽象意义.

继续分析旋转变换对位置算子的改变. 经过了旋转变换后, 位置算子 $\mathbf{R}$ 变为 $\mathbf{R}'$, 本征态由 $|\mathbf{r}\rangle = |x, y, z\rangle$ 变为 $|\mathbf{r}'\rangle = |x', y', z'\rangle$, 但是本征值没有改变,

$$\mathbf{R}'\,|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}\,|\mathbf{r}'\rangle$$

用分量形式表示

$$X'\,|x',y',z'\rangle = x\,|x',y',z'\rangle\,,\quad Y'\,|x',y',z'\rangle = y\,|x',y',z'\rangle\,,\quad Z'\,|x',y',z'\rangle = z\,|x',y',z'\rangle$$

至于 $|x',y',z'\rangle$, 可以考虑 $\langle x,y,z|\psi\rangle = \langle x',y',z'|\psi'\rangle$, 以及 $|\psi'\rangle = e^{-i\phi L_z/\hbar}\,|\psi\rangle$, 给出

$$\langle x,y,z| = \langle x',y',z'|\, e^{-i\phi L_z/\hbar}$$

也就是

$$|x',y',z'\rangle = e^{-i\phi L_z/\hbar}\,|x,y,z\rangle$$

将这一关系用于 $X'\,|x',y',z'\rangle = x\,|x',y',z'\rangle$, 有

$$e^{i\phi L_z/\hbar}X'e^{-i\phi L_z/\hbar}\,|x,y,z\rangle = x\,|x,y,z\rangle$$

从而认为 $e^{i\phi L_z/\hbar}X'e^{-i\phi L_z/\hbar} = X$, 即

$$X' = e^{-i\phi L_z/\hbar}Xe^{i\phi L_z/\hbar} = X\cos\phi + Y\sin\phi$$

类似地,

$$Y' = e^{-i\phi L_z/\hbar}Ye^{i\phi L_z/\hbar} = -X\sin\phi + Y\cos\phi,\quad Z' = Z$$

上述形式曾出现在 (16) 式的证明过程中, 但是在那里并没有指出 $e^{-i\phi L_z/\hbar}Xe^{i\phi L_z/\hbar}$ 就是 X'.

注 4 值得注意的是, 不能将 $\mathbb{R}^3$ 空间中对向量的旋转变换的结果直接类比于位置算子经历的旋转变换. 比较 (13) 式和上述 X', Y' 的表达式. ■

综合以上分析, 旋转变换使得

$$\mathbf{R} \longrightarrow \mathbf{R}' = e^{-i\phi L_z/\hbar}\,\mathbf{R}\,e^{i\phi L_z/\hbar}$$

5.2. 途径二

为了体现一般意义的角动量, 这里用 $\mathbf{J}$ 表示角动量, 它是一个向量算子, 有三个分量, J_x, J_y, J_z, 并且直接说, 角动量是空间旋转变换的生成元.

"角动量是旋转变换的生成元", 这句话体现为, 绕 $\mathbf{n}$ 方向转动角度 ϑ 这个操作是一个酉变换, 可以写为

$$U(\mathbf{n},\vartheta) = e^{-i\vartheta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar} \tag{17}$$

量子态 $|\psi\rangle$ 经历的旋转变换是

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = U(\mathbf{n},\vartheta)\,|\psi\rangle$$

注 5 如果在 $\mathbb{R}^3$ 空间中说 "绕 z 轴旋转角度 ϕ", 那么这就是对向量的旋转变换, 很具体, 也很形象. 如果对函数或波函数说这句话, 那么也不奇怪, 无非就是让函数图像转一下. 但是, 如果在 $\mathbb{C}^2$ 空间中说 "绕 z 轴旋转", 那么就显得难以想象. 于是这么说, 对于 $\mathbb{C}^2$ 空间中的量子态 $|\psi\rangle$, 存在一类酉变换, 构成酉群, 相应的生成元构成 Lie 代数, 这个 Lie 代数具有角动量的特征, 拥有与轨道角动量相同的对易关系, 我们把这些生成元称为自旋角动量, 其中的一个生成元 S_z 决定了 "绕 z 轴的旋转". 当然, $\mathbb{C}^2$ 空间过于简单, 其中的所有的酉变换都可以视作旋转变换. ■

现在想了解角动量与位置、动量的对易关系, 以及角动量的分量之间的对易关系. 对于轨道角动量, 途径一已经给出了这些对易关系. 现在要进行适当地推广, 因此避免使用角动量的具体形式, 比如 $\mathbf{L}=\mathbf{R}\times\mathbf{P}$, 或者 $S_z=\frac{\hbar}{2}\sigma_z$. 虽然如此, 我们还是要借助位置表象.

与位置算子的对易子 考虑绕 z 轴的旋转变换

$$U(z,\phi)=e^{-i\phi J_z/\hbar}$$

为了分析 J_z 与位置算子 $\mathbf{R}=(X,Y,Z)$ 的对易关系, 需要比较两方面的素材:

1. 在旋转变换下, 位置算子 $\mathbf{R}$ 变为 $\mathbf{R}'=e^{-i\phi J_z/\hbar}\,\mathbf{R}\,e^{i\phi J_z/\hbar}$, 这个等式可以看作是超算子对算子的作用. 由于暂不知道 J_z 和 $\mathbf{R}$ 的对易关系 —— 这正是要讨论的, 因此无法用 Baker-Hausdorff 公式继续计算下去, 但是可以考虑无穷小过程, 从中看到 (而不是得到) 对易子 $[J_z,\mathbf{R}]$.

2. 另一方面, 根据条件 (2), 给出无穷小变换下 $\mathbf{R}'$ 的形式.

将这两方面的素材结合在一起, 可以得到对易关系.

首先考虑素材 1,

$$R_j\longrightarrow R'_j=e^{-i\phi J_z/\hbar}R_je^{i\phi J_z/\hbar}.$$

这里 $R_1=X$, $R_2=Y$, $R_3=Z$. 在无穷小变换下, $\phi\to\delta\phi$,

$$R_j\to R'_j=R_j-\frac{i\delta\phi}{\hbar}[J_z,R_j]+\cdots \tag{18}$$

上式包含我们关心的对易子 $[J_z,R_j]$.

然后, 考虑素材 2. 根据条件 (2), 位置算子在变换前后本征值不变,

$$R'_j\,|\mathbf{r}'\rangle=r_j\,|\mathbf{r}'\rangle$$

其中 $r_1=x$, $r_2=y$, $r_3=z$. 至于 $|\mathbf{r}'\rangle$, 想象一下, 原来在空间 $\mathbf{r}$ 的地方有一个 δ 函数 —— 这是 $|\mathbf{r}\rangle$; 现在, 向量 $\mathbf{r}$ 绕 z 轴旋转了角度 ϕ, 变成了 $\mathbf{r}'$, 在 $\mathbf{r}'$ 的地方有一个 δ 函数 —— 这是 $|\mathbf{r}'\rangle$. 因此, $|\mathbf{r}'\rangle$ 总是 R_j 的本征向量, 本征值是 r'_j, 即

$$R_j\,|\mathbf{r}'\rangle=r'_j\,|\mathbf{r}'\rangle$$

在无穷小变换下, 参考 (13), r'_j 可以表示为

$$r'_j=(\mathbf{r}+\delta\phi\mathbf{e}_z\times\mathbf{r})_j$$

因此, 对于无穷小变换, R_j 的本征方程写为

$$R_j\,|\mathbf{r}'\rangle=r'_j\,|\mathbf{r}'\rangle=(\mathbf{r}+\delta\phi\mathbf{e}_z\times\mathbf{r})_j\,|\mathbf{r}'\rangle \tag{19}$$

再从另一个角度考察上式右端, 注意以下关系,

$$(\mathbf{R}'+\delta\phi\mathbf{e}_z\times\mathbf{R}')_j\,|\mathbf{r}'\rangle=(\mathbf{r}+\delta\phi\mathbf{e}_z\times\mathbf{r})_j\,|\mathbf{r}'\rangle \tag{20}$$

这个关系仍然是根据条件 (2) 得到的.

根据 (19) 和 (20), 有

$$R_j\,|\mathbf{r}'\rangle=(\mathbf{R}'+\delta\phi\mathbf{e}_z\times\mathbf{R}')_j\,|\mathbf{r}'\rangle$$

因为 $|\mathbf{r}'\rangle$ 构成了 Hilbert 空间的基向量, 所以有

$$R_j=(\mathbf{R}'+\delta\phi\mathbf{e}_z\times\mathbf{R}')_j$$

写成向量的形式,

$$\mathbf{R}' = \mathbf{R} - \delta\phi \mathbf{e}_z \times \mathbf{R}'$$

注意到上式右端第二项中虽然包含 $\mathbf{R}'$, 但是将 $\mathbf{R}'$ 在无穷小变换下展开后, 展开形式中的 $\delta\phi$ 的一阶项还要再乘以 $\delta\phi$, 这就变成了 $\delta\phi$ 的平方项, 是要舍去的. 因此只能保留 $\mathbf{R}$, 得到

$$\mathbf{R}' = \mathbf{R} - \delta\phi \mathbf{e}_z \times \mathbf{R} \tag{21}$$

这是绕 z 轴旋转的情况, 如果一般地, 绕 $\mathbf{n}$ 方向旋转, 在无穷小变换的情形下, 有

$$\mathbf{R}' = \mathbf{R} - \delta\phi \mathbf{n} \times \mathbf{R} \tag{22}$$

将 (18) 式也推广到绕任意方向 $\mathbf{n}$ 的无穷小旋转变换, 有

$$R_j \to R_j' = R_j - \frac{i\delta\phi}{\hbar}[\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}, R_j] \tag{23}$$

比较 (23) 和 (22) 两式, 可以得到

$$[\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}, \mathbf{R}] = -i\hbar \mathbf{n} \times \mathbf{R}$$

由此可以得到 J_k 与 R_j 之间的对易关系. 对于 $\mathbb{R}^3$ 中任意某个方向 $\mathbf{u}$, 有

$$[\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}, \mathbf{u}\cdot\mathbf{R}] = -i\hbar(\mathbf{n}\times\mathbf{R})\cdot\mathbf{u} = i\hbar(\mathbf{n}\times\mathbf{u})\cdot\mathbf{R}$$

将方向 $\mathbf{u}$ 选择为 x, y 或 z 方向, 得到

$$[J_x, X] = [J_y, Y] = [J_z, Z] = 0 \tag{24}$$

$$[J_x, Y] = i\hbar Z, \quad \cdots \tag{25}$$

角动量的分量之间的对易子

接下去需要考虑 $\mathbf{J}$ 的三个分量之间 J_x, J_y 和 J_z 之间的对易关系. 我们将采用类比的办法. 先写出 $\mathbb{R}^3$ 空间中绕 x, y 和 z 的旋转变换的矩阵,

$$R(x,\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\vartheta & -\sin\vartheta \\ 0 & \sin\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix}, \quad R(y,\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & 0 & \sin\vartheta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\vartheta & 0 & \cos\vartheta \end{pmatrix}, \quad R(z,\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\sin\vartheta & 0 \\ \sin\vartheta & \cos\vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

分别考虑它们的无穷小变换形式, 得到相应的旋转变换的生成元,

$$G_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad G_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad G_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

有限大小的旋转变换可以表示为 $R(k,\vartheta) = e^{-i\vartheta G_k}$, $k = x, y, z$.

容易得到生成元之间的对易关系

$$[G_x, G_y] = iG_z, \cdots$$

我们把这个关系以类比的形式直接推广到角动量 $\mathbf{J}$ 的分量上,

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y. \tag{26}$$

或者以简洁的形式表示为

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar \mathbf{J}. \tag{27}$$

这里我们添上了常数 $\hbar$.

与动量算子的对易子　最后, 为了得到 $\mathbf{J}$ 的分量与动量 $\mathbf{P}$ 的分量之间的对易关系, 需要考虑平移和旋转两种变换的组合, 并设法构造出对易子 $[J_x, P_y]$. 在 Hilbert 空间中绕着 x 轴的无穷小旋转变换表示为 $e^{-i\epsilon J_x}$, 沿着 y 轴的无穷小平移变换可以表示为 $e^{-i\epsilon P_y}$, 这里暂时令 $\hbar = 1$. 先旋转, 再平移, 保留到 ϵ 的平方项, 有

$$e^{-i\epsilon P_y}\, e^{-i\epsilon J_x} = \mathbb{1} - i\epsilon(P_y + J_x) - \epsilon^2\left(\frac{1}{2}P_y^2 + \frac{1}{2}J_x^2 + P_y J_x\right)$$

再考虑 $e^{i\epsilon P_y}\, e^{i\epsilon J_x}$, 保留到 ϵ^2 项, 有

$$e^{i\epsilon P_y}\, e^{i\epsilon J_x} = \mathbb{1} + i\epsilon(P_y + J_x) - \epsilon^2\left(\frac{1}{2}P_y^2 + \frac{1}{2}J_x^2 + P_y J_x\right)$$

将上面的两个结果相乘,

$$e^{i\epsilon P_y}\, e^{i\epsilon J_x} e^{-i\epsilon P_y}\, e^{-i\epsilon J_x} = \mathbb{1} + \epsilon^2[J_x, P_y] \tag{28}$$

再考虑位置坐标的改变. 从 (28) 式左端读出操作过程, 从右到左, 依次是: 绕 x 轴旋转角度 ϵ, 沿 y 方向平移 ϵ, 绕 x 轴旋转角度 $-\epsilon$, 沿 y 方向平移 $-\epsilon$. 把这些操作按次序并落实在向量上, 并保留到 ϵ 的二次项, 有

$$\begin{aligned}
(x, y, z) &\longrightarrow (x, y\cos\epsilon - z\sin\epsilon, y\sin\epsilon + z\cos\epsilon) \\
&\longrightarrow (x, y\cos\epsilon - z\sin\epsilon + \epsilon, y\sin\epsilon + z\cos\epsilon) \\
&\longrightarrow (x, y + \epsilon\cos\epsilon, z - \epsilon\sin\epsilon) \\
&\longrightarrow (x, y + \epsilon\cos\epsilon - \epsilon, z - \epsilon\sin\epsilon) \\
&\longrightarrow (x, y, z - \epsilon^2)
\end{aligned}$$

其中最后一步是 ϵ 的二级近似的结果. 上式意味着, 最终的变换效果是沿 $-z$ 方向平移 ϵ^2. 而这个操作在 Hilbert 空间中的表示是 $e^{i\epsilon^2 P_z} = \mathbb{1} + i\epsilon^2 2P_z + \cdots$. 再与 (28) 式比较, 得到

$$[J_x, P_y] = iP_z$$

最终有

$$[J_j, P_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}P_l$$

实际上, 以前得到的角动量与位置的对易关系也可以通过上述过程得到.

至此, 我们通过分析空间旋转变换得到了角动量与位置算子和动量算子的对易关系.

注 6　当谈论到角动量与位置或动量的对易子的时候, 角动量应该是轨道角动量. 自旋角动量与空间位置或动量都是对易的. ■

6. 角动量的本征值和本征向量

角动量的分量之间的对易关系 (27) 是一个特定的 Lie 代数形式, 它是角动量理论的基础, 可以根据这些对易关系获得角动量的本征值和本征向量.

首先注意到 $J^2 = \mathbf{J}\cdot\mathbf{J}$ 是一个标量算子.

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

可以验证

$$[J^2, J_k] = 0, \quad k = x, y, z$$

或者写为

$$[J^2, \mathbf{J}] = 0$$

对于任意方向上的角动量分量, $J_n = \mathbf{n}\cdot\mathbf{J}$, 有 $[J^2, J_n] = 0$.

选择 (J^2, J_z) 作为彼此对易的力学量的集合, 它们的共同本征向量记作 $|\beta, m\rangle$.

$$J^2 |\beta, m\rangle = \beta\hbar^2 |\beta, m\rangle, \quad J_z |\beta, m\rangle = m\hbar |\beta, m\rangle$$

这里, β 和 m 都是无量纲的实数. 下面来分析 $\beta, m = ?$ 首先可以肯定的是 $\beta \geqslant 0$.

注意到 J_k^2 都是半正定算子,

$$\langle\beta, m| J_x^2 |\beta, m\rangle + \langle\beta, m| J_y^2 |\beta, m\rangle + \langle\beta, m| J_z^2 |\beta, m\rangle$$

$$= \langle\beta, m|J^2|\beta, m\rangle = \beta\hbar^2$$

$$\geqslant \langle\beta, m| J_z^2 |\beta, m\rangle = m^2\hbar^2$$

因此, 对于给定的 β,

$$m^2 \leqslant \beta \tag{29}$$

这就确定了 m 的上下限.

再引入升降算子 $J_\pm$,

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y$$

有如下性质

$$J_+^\dagger = J_-, \quad J_-^\dagger = J_+$$

$$[J_z, J_+] = \hbar J_+, \quad [J_z, J_-] = -\hbar J_-$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$

即, J_z, J_+ 和 J_- 构成封闭的对易关系. 而且, 直接计算可以给出

$$J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z, \quad J_+J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \tag{30}$$

分析 J_+ 对 $|\beta, m\rangle$ 的作用效果.

$$J_z(J_+ |\beta, m\rangle) = (J_+J_z + \hbar J_+) |\beta, m\rangle$$

$$= m\hbar(J_+ |\beta, m\rangle) + \hbar(J_+ |\beta, m\rangle)$$

$$= (m+1)\hbar(J_+ |\beta, m\rangle)$$

这表明: $J_+ |\beta, m\rangle$ 是 J_z 的本征向量, 相应的本征值是 $(m+1)\hbar$, 或者 $J_+ |\beta, m\rangle = 0$.

又知道, 当 β 一定的时候, m 有上限, 记作 j. 这意谓着

$$J_+ \left|\beta, j\right\rangle = 0.$$

为了得到 β 和 j 之间的关系, 利用 (30) 式.

$$J_- J_+ \left|\beta, j\right\rangle = (\beta\hbar^2 - j^2\hbar^2 - j\hbar^2) \left|\beta, j\right\rangle = 0$$

由此得到

$$\beta = j(j+1). \tag{31}$$

再考虑用降算子 J_- 作用于 $|\beta, m\rangle$, 可以发现, $J_- |\beta, m\rangle$ 也是 J_z 的本征向量, 相应的本征值是 $(m-1)\hbar$. 当 m 减小达到下限 k 的时候, 有

$$J_- \left|\beta, k\right\rangle = 0.$$

再次利用 (30),

$$0 = J_+ J_- \left|\beta, k\right\rangle = \hbar^2(\beta^2 - k^2 + k) \left|\beta, k\right\rangle$$

于是有

$$\beta = k(k-1). \tag{32}$$

从 (31) 和 (32) 两式, 有

$$\beta = j(j+1) = k(k-1) \implies k = -j$$

从此以后, 将 β 写为 $j(j+1)$, 而 m 的取值范围是 $-j \leqslant m \leqslant j$.

因为 m 的上下限是可以达到的, 而且 m 的取值的个数是整数, 所以 $2j$ 必须是一个整数, 或者说, j 是整数或半整数. 对于固定的 j, 粒子数 m 有 $2j+1$ 个取值.

将 (J^2, J_z) 的共同本征态记作 $|j, m\rangle$,

$$J^2 \left|j, m\right\rangle = j(j+1)\hbar^2 \left|j, m\right\rangle, \quad J_z \left|j, m\right\rangle = m\hbar \left|j, m\right\rangle \tag{33}$$

以上过程只是用到了角动量算子的代数结构, 没有指明具体的表象. 得到的结论适用于轨道角动量和自旋角动量. 不过, 在随后的讨论中将看到, 轨道角动量的量子数只能取整数; 自旋角动量的量子数可以是整数, 也可以是半整数, 分别对应于玻色子和费米子.

注 7 当然也可以选择其它表象. 比如 (J^2, J_x) 表象, 与 (J^2, J_z) 表象之间的关系是酉变换 (旋转变换). 因而 J_x 的本征值还是 $m\hbar$, J_y 也是如此. ■

7. 角动量的矩阵形式

将前面得到的 $J_\pm |j, m\rangle$ 归一化.

$$\begin{aligned} J_+ \left|j, m\right\rangle &= c_+ \left|j, m+1\right\rangle \\ \langle j, m|J_+^\dagger J_+|j, m\rangle &= \langle j, m|J_- J_+|j, m\rangle \\ &= \langle j, m|(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|j, m\rangle \end{aligned}$$

$$= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 = |c_+|^2$$

将 c_+ 选为正的实数,

$$c_+ = \hbar[j(j+1) - m(m+1)]^{1/2} \tag{34}$$

类似地, $J_- |j,m\rangle = c_- |j,m-1\rangle$,

$$c_- = \hbar[j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} \tag{35}$$

至此, $\{|j,m\rangle\}$ 构成了无限维 Hilbert 空间的基向量, 满足正交归一完备关系,

$$\langle j',m'|j,m\rangle = \delta_{j,j'}\delta_{m,m'}, \quad \sum_{j,m} |j,m\rangle\langle j,m| = \mathbb{1} \tag{36}$$

利用升降算子, 可以写出 $\mathbf{J}$ 的各分量的矩阵形式.

首先, 因为 $|j,m\rangle$ 是 J_z 的本征向量, 所以 J_z 的矩阵形式一定是对角矩阵,

$$\langle j',m'|J_z|j,m\rangle = m\hbar\,\delta_{j,j'}\delta_{m,m'}$$

具体地,

$$J_z = \begin{pmatrix} \boxed{0} & & & \\ & \boxed{\begin{matrix} \frac{1}{2} & \\ & -\frac{1}{2} \end{matrix}} & & \\ & & \boxed{\begin{matrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1 \end{matrix}} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \hbar \tag{37}$$

从左上到右下, 对角线上的每一个块依次对应于 $j=0$, $j=\frac{1}{2}$, $j=1, \cdots$. 在每一个块中, 用 m 的降序取值来标记行和列. 例如, 在 $j=\frac{1}{2}$ 这个块中, 第一行和第二行分别对应于 $m'=\frac{1}{2}$ 和 $m'=-\frac{1}{2}$, 第一列和第二列分别对应于 $m=\frac{1}{2}$ 和 $m=-\frac{1}{2}$.

继续考虑 J_x 和 J_y 的矩阵形式. 注意 $[J^2,\mathbf{J}]=0$, 有

$$\begin{gathered} \langle j',m'|J^2\mathbf{J}|j,m\rangle = \langle j',m'|\mathbf{J}\,J^2|j,m\rangle \\ j'(j'+1)\hbar^2\,\langle j',m'|\mathbf{J}|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\,\langle j',m'|\mathbf{J}|j,m\rangle \\ \text{如果 } j \neq j', \text{那么, 上式成立} \Longrightarrow \langle j',m'|\mathbf{J}|j,m\rangle = 0 \end{gathered} \tag{38}$$

这表明, J_k 的矩阵形式一定是块对角的 (block-diagonal).

为了有更清楚的直观图像, 我们把 J_k 的矩阵形式写为

$$J_k = \sum_{\substack{j',m' \\ j,m}} \left(J_k\right)_{j,m}^{j',m'} |j',m'\rangle\langle j,m|$$

即, J_k 的第 (j',m') 行第 (j,m) 列的矩阵元是

$$\left(J_k\right)_{j,m}^{j',m'} = \langle j',m'|J_k|j,m\rangle$$

$|j,m\rangle$ 可以视作 $|j\rangle\otimes|m\rangle$, 当然, 这里的 m 不是完全独立的, 它的取值取决于 j.

$$|j',m'\rangle\langle j,m| = |j'\rangle\langle j|\otimes|m'\rangle\langle m|$$

于是 $|j'\rangle\langle j|$ 标记了大矩阵中的块.

$$\begin{pmatrix} \boxed{j'=j=0} & \boxed{j'=0,j=\frac{1}{2}} & \boxed{j'=0,j=1} & \cdots \\ \boxed{j'=\frac{1}{2},j=0} & \boxed{j'=j=\frac{1}{2}} & \boxed{j'=\frac{1}{2},j=1} & \cdots \\ \boxed{j'=1,j=0} & \boxed{j'=1,j=\frac{1}{2}} & \boxed{j'=j=1} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

因此, (38) 说的是, 在 J_k 的矩阵形式中, 非对角块中的矩阵元一律为零.

升降算子 $J_\pm$ 的矩阵元易于求出.

$$\frac{J_+}{\hbar} = \begin{array}{ll|c|cc|ccc|cccc} & & j{=}0 & \frac{1}{2} & & 1 & & & \frac{3}{2} & & & \\ & & m{=}0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 & 0 & -1 & \frac{3}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} \\ \hline j'=0 & m'=\ 0 & 0 & & & & & & & & & \\ \hline j'=\frac{1}{2} & m'=\ \frac{1}{2} & & 0 & 1 & & & & & & & \\ & -\frac{1}{2} & & 0 & 0 & & & & & & & \\ \hline & m'=\ 1 & & & & 0 & \sqrt{2} & 0 & & & & \\ j'=1 & 0 & & & & 0 & 0 & \sqrt{2} & & & & \\ & -1 & & & & 0 & 0 & 0 & & & & \\ \hline & m'=\ \frac{3}{2} & & & & & & & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ j'=\frac{3}{2} & \frac{1}{2} & & & & & & & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ & -\frac{1}{2} & & & & & & & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ & -\frac{3}{2} & & & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$

$J_- = J_+^\dagger$, 矩阵形式亦可得. 而 $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$, $J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$, 所以 J_x 和 J_y 也是容易写出的.

以上分析得到的对角块的结构告诉我们, 整个 Hilbert 空间是一系列的以 j 标记的子空间的直和.

$$\mathcal{H} = \bigoplus_j \mathcal{H}_j. \tag{39}$$

8. EPR 问题, 简介

我们要借助自旋角动量讨论量子力学中的 "值" 的问题, 在这一节, 有必要简单介绍一下 EPR 问题.

在经典物理中, 力学量具有明确的值. "值" 是力学量固有性质或者实在性 (reality) 的定量反映. 量子力学中关于实在性的讨论起源于 EPR (Einstein-Podolsky-Rosen) 发表于 1935 年 Physical Review 的论文, Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?

Einstein 相信物理学的实在性, 这是 EPR 论点的起因. 在 EPR 看来, 一个完备的物理理论需要有一个必要条件:

完备性 Every element of the physical reality must have a counterpart in the physical theory.

如何说明物理实在性要素 (element of the physical reality) ? EPR 给出这样的说法:

物理实在性 If, without in any way disturbing a system, we can predict with certainty (i.e., with probability equal to unity) the value of a physical quantity, then there exists an element of physical reality corresponding to this physical quantity.

这就是 EPR 的物理实在性判据. 显然, 如果存在一个物理实在性要素, 那么就一定对应于一个物理量, 该物理量具有确定的值.

接着, EPR 认为, 物理实在性应该具有下面两个特性:

可分性 如果两个动力学系统在空间上彼此分离, 那么每一个系统都具有独立于另一个系统的性质.

定域性 对于两个空间上彼此分离的动力学系统, 对其中一个施加的影响不会直接作用到另一个系统上. 尤其是, 对一个系统的测量不会改变另一个系统的性质.

可分性和定域性可以看作是实在性的内涵.

上述概念之间的关系可以用图 2 表示.

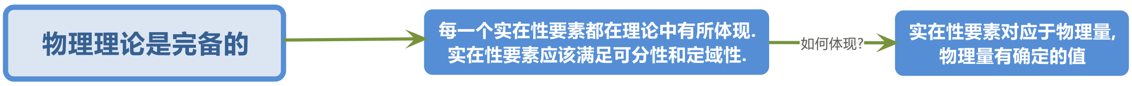


图 2: 其中的箭头可以理解为 implies.
$p \to q$ 的意思就是, 如果 p, 那么 q.

EPR 注意到一个量子力学中的一个事实:

事实 F 在量子力学中, 如果两个物理量对应的厄密算子不对易, 那么它们不能同时具有确定的值.

强调一下, 事实 **F** 来自于量子理论. 在量子力学中, 如果量子态是某个力学量 A 的本征态, 那么力学量 A 有确定的值, 即相应的本征值. 但是, 在 A 的本征态中, 另一个与 A 不对易的力学量 B 则不能表现出确定的值. 一般地, 没有这样的量子态, 使得两个不对易的力学量都能获得确定的值, 这就是不确定关系. 在 EPR 看来, 两个不对易的力学量不能同时具有确定的值, 这就意味着:

下面两个命题至少有一个是真的

命题 P1 由量子态给出的关于物理实在性的描述是不完备的.

命题 P2 两个不对易的厄密算子所对应的两个物理量不能同时具有实在性.

用 $\vee$ 表示逻辑 "或", EPR 的结论就是

$$\text{结论 C1}: \quad \mathbf{F} \Longrightarrow \mathbf{P1} \vee \mathbf{P2} \tag{40}$$

考虑图 2 所示过程的逆否, 不难得到这个结论. 用符号 $\neg$ 表示逻辑 "非".

¬P1 由量子态给出的关于物理实在性的描述是完备的.

¬P2 两个不对易的厄密算子所对应的两个物理量可以同时具有实在性.

于是立即有

$$\neg\mathbf{P1} \wedge \neg\mathbf{P2} \Longrightarrow \neg\mathbf{F}$$

而 $\neg$**F** 是不正确的, 于是有结论 **C1**.

对于结论 **C1** 中的两个命题, 不论哪一个是真的, 对量子力学来说都不是一件好事. 如果 **P1** 成立, 那么就表明, 在描述物理实在性方面, 量子态不够用, 还需要继续寻找其它的量, 这就引发了隐变量模型. 如果 **P2** 成立, 那么面临两个后果: ① 这两个物理量中至少有一个不能描述物理实在性, 这很糟糕, 不对易的物理量比比皆是, 于是量子力学中的很多物理量就显得很 "虚幻"; ② 用厄密算子的形式表示力学量是不合适的, 这同样很糟糕, 意味着需要重新建构量子力学.

EPR 根据物理理论的完备性, 在实在性问题上给量子力学出了一道难题. 对于任何一个物理理论, 它的倡导者都不愿意放弃完备性, 于是转向命题 **P2**, 可是命题 **P2** 同样令人尴尬. 事情到了这一步, EPR 却意犹未尽. 他们 "好心好意" 地说: "我们有一个好办法可以帮助你们挽救非对易的物理量面临的实在性问题." 当然, EPR 没有说过这样的话, 我们这是开玩笑. 不过, EPR 确实想到了一个办法, 概括地说, 这个办法就是图 3 所示的过程.

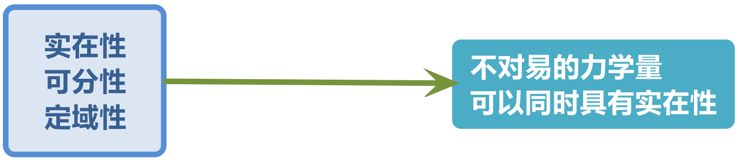


图 3: 实在性、可分性、定域性之间的关系不是并列的, 可分性和定域性可以视作实在性的内涵.

EPR 的这个 "好办法" 也许是解决了非对易的物理量面临的实在性问题, 但是却导致了命题 **P1**.

在叙述 EPR 方案的具体过程之前, 有必要事先做些说明. 回顾 (40), 即结论 **C1**. 如果我们假设量子态给出的实在性描述是完备的, 即假设 $\neg$**P1** 成立, 那么结论 **C1** 可以表示为

$$\mathbf{F} \wedge (\neg \mathbf{P1}) \Longrightarrow \mathbf{P2}$$

这就是说, 承认完备性 (即 $\neg$**P1**), 也尊重来自量子理论的事实 **F**, 因而自然得到结论 —— 不对易的力学量不能同时具有实在性 (即 **P2**). 命题 **P2**, 虽然令人尴尬, 但是对量子力学而言并不是致命伤, EPR 也不至于在这个问题上纠缠不清, 其真正目的在于, 由图 3 所示的结论 $\neg$**P2**, 有

$$\neg \mathbf{P2} \Longrightarrow (\neg \mathbf{F}) \vee \mathbf{P1}$$

无法否定 **F**, 所以有 **P1** —— 量子态给出的物理实在性描述是不完备的.

下面来讨论 EPR 方案.

8.1. EPR 的 "好办法"

EPR 分析了处于纯态 $|\Psi\rangle$ 的两体量子系统, 两个子系统分别记作 A 和 B, 每个粒子都有两个观测量,

$$\text{粒子 A}: \qquad A = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|, \quad M = \sum_j m_j |\mu_j\rangle\langle\mu_j| \tag{41}$$

$$\text{粒子 B}: \qquad B = \sum_i b_i |\beta_i\rangle\langle\beta_i|, \quad N = \sum_j n_j |\nu_j\rangle\langle\nu_j| \tag{42}$$

纯态 $|\Psi\rangle$ 可以表示为两种形式,

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle |\beta_i\rangle = \sum_j d_j |\mu_j\rangle |\nu_j\rangle$$

两种表示形式分别对应于两个不同的表象.

假设在某个时刻测量 B 的观测量 B, 得到结果 b_i, 那么 A 的量子态就是 $|\alpha_i\rangle$, A 的观测量 A 的值是 a_i. 如果测量 B 的观测量 N, 得到结果 n_j, 那么 A 的量子态就是 $|\mu_j\rangle$, A 的观测量 M 的值是 m_j. 根据可分离性和定域性, 对 B 的测量不会影响 A 的性质, 因而做到了没有干扰系统 A, 又能推断出 A 的观测量的值. 这就满足了实在性的要求, 所以 A 的两个观测量 A 和 M 应该描述了物理实在性, 这就得到了命题 **¬P2**.

在 EPR 的论文中, 观测量是粒子的位置和动量, 随后, Bohm 考虑了两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子的自旋单态,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\mathbf{n}+\rangle\langle\mathbf{n}-| - \frac{1}{\sqrt{2}}|\mathbf{n}-\rangle\langle\mathbf{n}+| \tag{43}$$

其中 $|\mathbf{n}\pm\rangle$ 是 $\sigma_n = \mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 的本征态, 对应的本征值分别是 ±1.

(43) 式可以表示为

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x+\rangle\langle x-| - \frac{1}{\sqrt{2}}|x-\rangle\langle x+| = \frac{1}{\sqrt{2}}|y+\rangle\langle y-| - \frac{1}{\sqrt{2}}|y-\rangle\langle y+|$$

根据 EPR 的论点, 粒子 A 的自旋角动量 S_x 和 S_y 都是实在性要素, 应该同时具有确定的值. 这同样是命题 **¬P2** 的体现.

接下去就是 Bell 等人的工作, 即 Bell 定理, 在此无法展开讨论, 只能分析 Bell 定理中的一个稍显直观的情形——互文性.

9. 互文性

在前面的叙述中可以看到, 彼此不对易的力学量不能同时具有确定的值. 那么, 对于彼此对易的力学量, 我们能说些什么?

首先, 对易的力学量可以有相同的表象, 在这个表象中, 它们有确定的值. 但是, 并不是所有的力学量都是彼此对易的. 对于量子系统的某个力学量 O, 尽可能地去找与 O 对易而且彼此对易的力学量, 这些力学量构成一个集合, 我们把这个集合称为一个文本 (context).

$$\text{文本 1}: \quad \{O, O_1', O_1'', \cdots\}$$

还可能有另外一个文本,

$$\text{文本 2}: \quad \{O, O_2', O_2'', \cdots\}$$

文本 2 中的力学量也都是彼此对易的. 例如, 在前面提到的两体系统的观测量 (41) 和 (42) 中, (A, B) 是一个文本, (A, N) 是另一个文本.

如果 O 在文本 1 中的值是 o_1, 在文本 2 中的值是 o_2, 那么问题是

$$o_1 \overset{?}{=\!=} o_2$$

从经典力学的客观实在性的角度看, 或者说从隐变量的观点来看, 我们应该认为 $o_1 = o_2$. 因为观测量的测量结果是被隐变量完全决定的, 不应该依赖于其它观测量的测量结果, 也不会依赖于测量仪器的设置. 这种孤立的与它者无关的行为称为**非互文的** (Non-contextual).

注 8 这里说的“孤立的与它者无关的行为”并不是说不能与其它物理对象产生相互作用, 而是说经典物理的力学量有其自身的确定而真实的性质, 性质可以因为相互作用而变化, 性质的变化是动力学演化的结果. 在任意时刻, 不论是否测量, 经典物理量都具有明确的值. ■

在量子力学中, 我们将看到**非互文性**, $o_1 \neq o_2$. 需要注意的是, 在谈论量子力学的非互文性的时候, 并没有对非对易的力学量赋值, 而是考虑这样的可能性——对于身处不同文本的同一个力学量, 能否具有固定的值? 相比于 EPR 问题中的

值, 这里的是一个弱化的观点, 没有追问力学量 O 是否具有客观实在性, 想知道的只是, 力学量 O 是否具有不依赖文本的某种性质.

下面以自旋角动量为例讨论非互文性.

9.1. 为自旋角动量赋值

对物理量赋值, 是经典物理的观点. 在量子力学中对物理量赋值, 这是在用经典物理的眼光审视量子理论. 在对角动量算子或者角动量的平方算子赋值的时候, 允许的值只能是其本征值, 毕竟本征值是力学量的可能取值.

自旋角动量记作 $\mathbf{S}$, 在 x, y, z 方向上的三个分量分别是 S_x, S_y, S_z.

(S^2, S_z) 的共同本征函数记作 $|s, m_s\rangle$, 其中 s 的取值是整数或半奇数, 当 s 给定时, m_s 的取值是 $s, s-1, \cdots, -s$.

$$S^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle, \quad S_z |s, m_s\rangle = m_s\hbar |s, m_s\rangle$$

自旋 1/2 当 $s = \frac{1}{2}$ 时,

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbb{1},$$

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{1}{4}\hbar^2 \mathbb{1},$$

$$\left[S_j^2, S_k^2\right] = 0, \quad j, k = x, y, z.$$

S_x^2, S_y^2, S_z^2 彼此对易, 如果我们说, 它们可以同时取值 $\frac{1}{4}\hbar^2$, 那么看不出任何矛盾.

自旋 1 当 $s = 1$ 时,

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{44}$$

$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ 的本征值是 $2\hbar^2$.

S_x^2, S_y^2, S_z^2 彼此对易, 它们的本征值都是 0 和 $\hbar^2$.

如果我们希望给 S_k^2 赋值, 那么可以说: S_x^2, S_y^2, S_z^2 中有两个取值 $\hbar^2$, 剩下一个取值 0, 三者总和是 $2\hbar^2$. 在这个说法中, 我们不能确定到底是哪两个自旋角动量分量的平方取值 1, 哪一个取值 0.

相比于自旋 1/2 的情形, 确定性有所减弱.

自旋 3/2 当 $s = \frac{3}{2}$ 时,

$$S_x = \hbar\begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_x = \hbar\begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar\,\mathrm{diag}\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)$$

S^2 的本征值是 $\frac{15}{4}\hbar^2$.

S_x^2, S_y^2, S_z^2 不再彼此对易, 它们的本征值都是 $\frac{9}{4}\hbar^2$ 和 $\frac{1}{4}\hbar^2$, 因此, S_x^2, S_y^2, S_z^2 不可能同时具有确定的值, 赋值是行不通的. 而且, 不论以何种方式将 S_k^2 的本征值 $\left\{\frac{9}{4}\hbar^2, \frac{1}{4}\hbar^2\right\}$ 进行组合相加, 都不能得到 S^2 的本征值 $\frac{15}{4}\hbar^2$.

以上叙述简单直观, 还没有涉及不同的文本. 在讨论非互文性之前, 看看力学量的期望值在不同文本中的表现, 这涉及简并情形下的 Born 规则.

9.2. 简并情形下的 Born 规则

考虑整体 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中的一个两维子空间 $\mathscr{G} \subset \mathscr{H}$, 它的基向量是 $|\varsigma_1\rangle$ 和 $|\varsigma_2\rangle$, 相应的投影算符是 $\Pi(\varsigma_i) = |\varsigma_i\rangle\langle\varsigma_i|$, $i = 1, 2$. 子空间 $\mathscr{G}$ 上的投影算符是 $\Pi_{\mathscr{G}} = |\varsigma_1\rangle\langle\varsigma_1| + |\varsigma_2\rangle\langle\varsigma_2|$, 投影算子 $\Pi_{\mathscr{G}}$ 不依赖于子空间 $\mathscr{G}$ 的基向量的选择.

虽然我们定义 $\Pi_{\mathscr{G}} = |\varsigma_1\rangle\langle\varsigma_1| + |\varsigma_2\rangle\langle\varsigma_2|$, 但是, 也可以选择其它形式的基向量, 例如, 令

$$|\psi_1\rangle = c_1 |\varsigma_1\rangle + c_2 |\varsigma_2\rangle , \quad |\psi_2\rangle = -c_2^* |\varsigma_1\rangle + c_1^* |\varsigma_2\rangle$$

这里 $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, 显然 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 也是 $\mathscr{G}$ 的基向量, 并且

$$\begin{aligned} & |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \\ =& (c_1 |\varsigma_1\rangle + c_2 |\varsigma_2\rangle)(c_1^* \langle\varsigma_1| + c_2^* \langle\varsigma_2|) + (-c_2^* |\varsigma_1\rangle + c_1^* |\varsigma_2\rangle)(-c_2 \langle\varsigma_1| + c_1 \langle\varsigma_2|) \\ =& |\varsigma_1\rangle\langle\varsigma_1| + |\varsigma_2\rangle\langle\varsigma_2| = \Pi_{\mathscr{G}} \end{aligned}$$

我们在讨论简并情形下的量子测量假设的时候说到, 当被测力学量的某一个本征值是简并的时候, 观测到该本征值的几率不依赖于简并子空间的基向量的选择, 这个几率可以表示为简并子空间上的投影算符在相应量子态中的期望值. 与这里的讨论比较, 可以看到, 它们在数学的本质上是完全一致的.

接着我们来考虑这其中涉及的物理意义. 选择 $\mathscr{G}$ 的基向量就是选择不同的表象, 从物理意义上说, 选择不同的表象就是选择不同的测量环境, 而不同的测量环境却是不相容的.

例如在 SG 实验中, $SG(z)$ 装置和 $SG(x)$ 装置是完全不同的实验设置, 不同的装置关注不同的被测力学量, 不对易的力学量 (例如 σ_z 和 σ_x) 是不相容的.

在 von Neumann 关于不存在无弥散量子态的证明中, 使用了不对易的力学量的和的期望值等于各自的期望值的和这一数学上正确但是物理上存疑的说法. 现在我们把这个在物理上可能存疑的说法换一种形式再叙述一遍.

选择子空间 $\mathscr{G} \subset \mathscr{H}$ 的基向量为 $|\varsigma_1\rangle$ 和 $|\varsigma_2\rangle$, 这个表象记作 ς-表象, 相应的 $\mathscr{G}$ 上的投影算符表示为 $\Pi_{\mathscr{G}}^{\varsigma} = |\varsigma_1\rangle\langle\varsigma_1| + |\varsigma_2\rangle\langle\varsigma_2|$, 这里我们添加了上标 ς, 表明这个投影算符是在 ς-表象中的形式.

如果选择子空间 $\mathscr{G} \subset \mathscr{H}$ 的基向量为 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$, 就是选择了 ψ-表象, 投影算符记作 $\Pi_{\mathscr{G}}^{\psi} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$.

前面已经证明了, 在数学上 $\Pi_{\mathscr{G}}^{\varsigma} = \Pi_{\mathscr{G}}^{\psi}$. 但是在物理上, 它们却不是等价的. 然后, 我们的问题是: 如果它们在物理上是不等价的, 那么将会带来什么样的物理效应?

考虑自旋为 1 的粒子. 自旋角动量在 x, y, z 方向上的分量是

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{45}$$

以后我们令 $\hbar = 1$. 描述自旋 1 粒子的 Hilbert 空间是 $\mathbb{C}^3$, 将它的基向量选择为 S_z 的本征向量, 即

$$|z_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{46}$$

它们对应的 S_z 的本征值分别为 $+1, 0, -1$. 基向量 (46) 实际上是 $\mathbb{C}^3$ 的自然基向量.

再考虑另一个力学量, 令 $X = S_x^2 - S_y^2$, 它的矩阵是

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{47}$$

而且 $X^2 = (S_x^2 - S_y^2)^2 = S_z^2$. 力学量 X 的本征向量是

$$|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |x_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |x_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

相应的本征值分别是 $+1, 0, -1$. 于是 $\mathbb{C}^3$ 空间有了两组不同的基向量, 也就有了两种不同的表象, 记作 Z-表象和 X-表象,

$$Z\text{-表象}: \quad \{|z_+\rangle, |z_-\rangle, |z_0\rangle\},$$

$$X\text{-表象}: \quad \{|x_+\rangle, |x_-\rangle, |x_0\rangle\}$$

两组基向量中共同的一个是 $|z_0\rangle = |x_0\rangle$, 将它们记作 $|0\rangle$. 相应地, 我们有两组投影算符

$$\Pi_{z_+} = |z_+\rangle\langle z_+|, \quad \Pi_{z_-} = |z_-\rangle\langle z_-|, \quad \Pi_0 = |0\rangle\langle 0|$$

$$\Pi_{x_+} = |x_+\rangle\langle x_+|, \quad \Pi_{x_-} = |x_-\rangle\langle x_-|, \quad \Pi_0 = |0\rangle\langle 0|$$

与 $|0\rangle$ 正交的两维子空间是我们关注的对象, 同样地记作 $\mathscr{G}$. $\mathscr{G}$ 的基向量可以是 $|z_\pm\rangle$, 也可以是 $|x_\pm\rangle$.

下面考虑两个实验过程. 一个是在 Z-表象中进行的, 另一个是在 X-表象中进行的, 如图 4 所示.

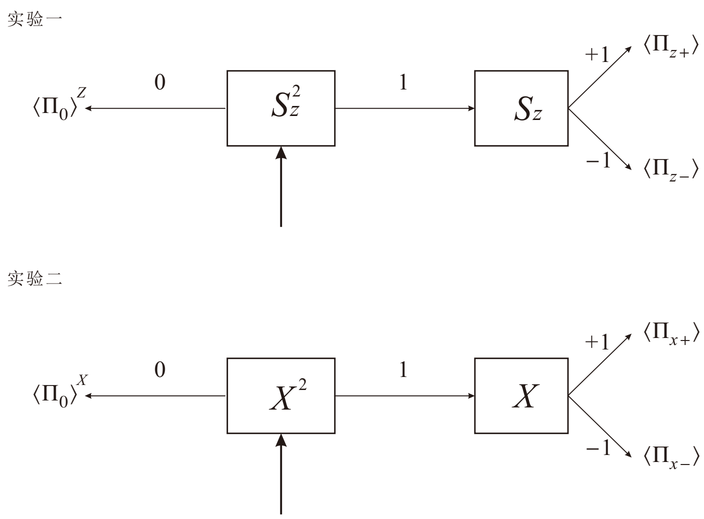


图 4: 自旋 1 粒子的两种不同设置的施特恩-格拉赫实验.

在第一个实验中, 一束自旋 1 的粒子通过一个广义的 SG 装置, 被检测的力学量是 S_z^2, 它的本征值是 0 和 $+1$.

出射粒子分为两束, 一束对应于本征值 0, 本征态是 $|0\rangle$; 另一束对应于本征值 1, 相应的状态应该是 $|z_+\rangle$ 和 $|z_-\rangle$ 的线性叠加. 然后, 将对应于本征值 0 处于 $|0\rangle$ 的出射粒子引向左方, 将另一束粒子引向右方. 在左方设置探测器, 记录粒子的个

数, 最终获得 Π_0 的期望值, 记作 $\langle\Pi_0\rangle^Z$, 这里的上标 Z 表示在 Z-表象中的测量结果. 在右方, 让粒子进入 $SG(z)$ 装置. 这时入射粒子的量子态是 S_z^2 的本征值为 $+1$ 的本征态, 出射后分为两束, 分别是 S_z 的本征值为 $+1$ 和 -1 的本征态 $|z_+\rangle$ 和 $|z_-\rangle$. 对出射粒子进行测量后可以得到期望值 $\langle\Pi_{z_+}\rangle$ 和 $\langle\Pi_{z_-}\rangle$. 在理论上有 $\langle\Pi_0\rangle^Z+\langle\Pi_{z_+}\rangle+\langle\Pi_{z_-}\rangle=1$, 或者写为

$$\langle\Pi_0\rangle^Z = 1-\langle\Pi_{z_+}\rangle-\langle\Pi_{z_-}\rangle \tag{48}$$

在第二个实验中, 测量是对 X^2 和 X 进行的, 有类似的过程和描述, 最终有

$$\langle\Pi_0\rangle^X = 1-\langle\Pi_{x_+}\rangle-\langle\Pi_{x_-}\rangle \tag{49}$$

这里的上标 X 表明期望值 $\langle\Pi_0\rangle$ 是在 X- 表象中得到的结果.

要考虑的问题是: 在两个不同的表象中, $\langle\Pi_{\mathscr{g}}^Z\rangle$ 是否等于 $\langle\Pi_{\mathscr{g}}^X\rangle$? 表现在实验结果上就是, $\langle\Pi_{z_+}\rangle+\langle\Pi_{z_-}\rangle$ 能否等于 $\langle\Pi_{x_+}\rangle+\langle\Pi_{x_-}\rangle$? 根据 (48) 和 (49) 两式, 问题被转述为, 两个实验中左方的观测结果 $\langle\Pi_0\rangle^Z$ 和 $\langle\Pi_0\rangle^X$ 会有所不同么?

注意到 $S_z^2=X^2$, 因此两个实验过程中的第一步实际上是相同的. 在此之后, 向左和向右的粒子可以相隔任意远. 右方的实验者安排了不同的检测装置, $SG(z)$ 和 $SG(x)$, 而左方的观测者无从知晓右方实验者的具体设置. 如果在左方看到了 $\langle\Pi_0\rangle^Z\neq\langle\Pi_0\rangle^X$, 那么就可以推知右方的实验安排, 至少能够知道右方的实验装置发生了改动. 而且, 如果对 S_z^2 (或者 X^2) 的检测装置距离右方实验者更远, 并且粒子的运动速度足够慢, 那么左方的探测器将提前有所响应, 观测者甚至可以提前知道右方的实验装置. 这将违反基本的因果律. 因此, $\langle\Pi_{\mathscr{g}}^Z\rangle$ 应该等于 $\langle\Pi_{\mathscr{g}}^X\rangle$, 这不仅仅是一个数学的结果, 而且是基本物理定律的要求, 即信号不能超光速传递.

上述讨论的结果似乎表现出非互文性. 把投影算符视作观测量, 就有这样两组观测量的集合,

$$\text{集合 I}: \quad \Pi_{z_+} \quad \Pi_{z_-}, \quad \Pi_0$$

$$\text{集合 II}: \quad \Pi_{x_+}, \quad \Pi_{x_-}, \quad \Pi_0$$

Π_0 是两组观测量中共同的一个. 我们看到, Π_0 的期望值不依赖于与此对易的 (或者说相容的) 其它观测量的测量, 即不依赖于具体的实验环境. 但是, 需要注意的是, 互文性问题中关注的是, 观测量 O 是否具有非互文的值, 而不是期望值. 在下面的讨论中将看到, 在量子力学中观测量**不具有非互文的值**.

9.3. **Kochen-Specker** 定理 自旋 1 粒子, 不依赖于具体的量子态

1967 年, Kochen 和 Specker 分析了自旋为 1 的量子系统的隐变量问题, 得到的结论是, 自旋 1 粒子的自旋角动量不能具有非互文的确定的值, 这个结论后来被称为 KS 定理. KS 定理的证明中用到了自旋为 1 的粒子的自旋角动量的性质以及隐变量模型为自旋角动量在某个方向上的分量的平方 S_k^2 赋值的时候应该满足的条件, 通过不断构造 $\mathbb{R}^3$ 空间中的直角坐标架, 并在相应的方向上为角动量的平方赋值, 最终得到了自相矛盾的结果. KS 的原始证明中用到了 117 个方向, 在叙述上略显繁琐. 下面我们讨论 Asher Peres 的证明, 仅用到 33 个方向, 参看 [3].

回顾一下自旋 1 的角动量的性质. 考虑一个自旋为 1 的粒子. 自旋角动量 $\mathbf{S}$ 的三个分量的矩阵形式已经由 (44) 式给出, 依然设 $\hbar=1$, 我们知道

$$S_x^2+S_y^2+S_z^2=2\mathbb{1}$$

这里的 $\mathbb{1}$ 是 3×3 的单位矩阵. 这个关系对于三维实空间 $\mathbb{R}^3$ 上任意一组直角坐标架都是成立的. 设三个单位向量 $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$, $\mathbf{n}_3$ 构成了 $\mathbb{R}^3$ 的一个直角坐标架, $\mathbf{S}$ 在这些单位向量上的分量分别是 $S_{n_1}, S_{n_2}, S_{n_3}$ 那么有

$$S_{n_1}^2+S_{n_2}^2+S_{n_3}^2=2\mathbb{1} \tag{50}$$

对于任意两个彼此垂直的方向上的自旋角动量的分量, 它们的平方形式是对易的, 即

$$[S_{n_i}^2, S_{n_j}^2] = 0, \quad i, j = 1, 2, 3 \tag{51}$$

另外, $S_{n_i}^2$ 的本征值为 0 和 $+1$.

如果用经典的观点看待力学量 $S_{n_i}^2$, 那么就会有这样的描述: 力学量 $S_{n_i}^2$ 具有确定的值 0 或者 $+1$, 记作

$$v(S_{n_i}^2) = 0, 1 \tag{52}$$

而且, 三个 $v(S_{n_i}^2)$ 应该满足如下关系

$$v(S_{n_1}^2) + v(S_{n_2}^2) + v(S_{n_3}^2) = 2 \tag{53}$$

$$\text{三个 } v(S_{n_i}^2) \text{ 中任意两个不能同时为零} \tag{54}$$

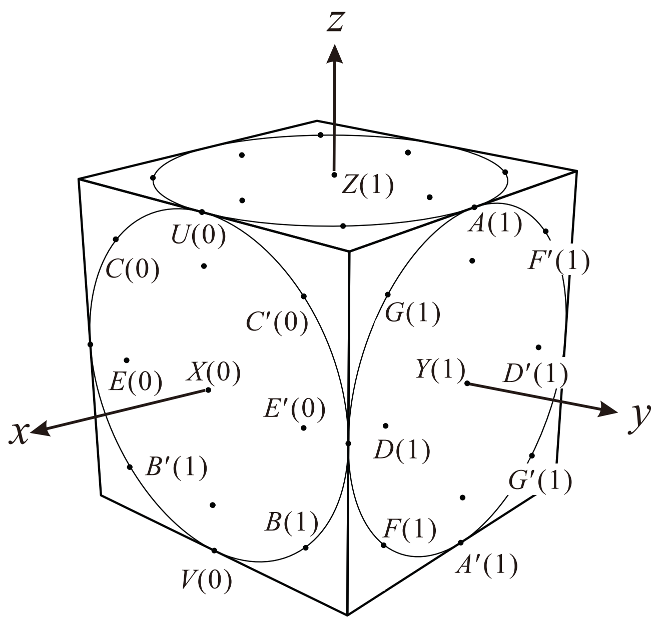


图 5: 图中的圆点表示 $\mathbb{R}^3$ 中的 33 个方向. 括号中的 0 和 1 表示隐变量模型为相应方向上自旋角动量平方的可能的赋值. 注意 U 和 V 表示的两个方向是垂直的, 但是赋值的结果却是 $v(S_U^2) = v(S_V^2) = 0$, 违反了隐变量模型应该遵守的条件 (54).

在图 5 中用圆点标记了 $\mathbb{R}^3$ 中的 33 个方向. 图中的立方体的边长为 2, 下面给出一部分点的坐标.

$$X : (1, 0, 0), \quad Y : (0, 1, 0), \quad Z : (0, 0, 1)$$

$$A : (0, 1, 1), \quad B : (1, \tfrac{1}{\sqrt{2}}, -\tfrac{1}{\sqrt{2}}), \quad C : (1, -\tfrac{1}{\sqrt{2}}, \tfrac{1}{\sqrt{2}})$$

$$D : (\tfrac{1}{\sqrt{2}}, 1, 0), \quad E : (1, -\tfrac{1}{\sqrt{2}}, 0), \quad F : (\tfrac{1}{\sqrt{2}}, 1, -\tfrac{1}{\sqrt{2}})$$

其它点的坐标也容易写出. 这些点代表的向量也用同样的字母表示, 例如 A 同时也表示向量 $(0, 1, 1)$. 为了能有直观形象的表示, 向量不作归一化的处理. 因此 S_A 的意思就是自旋角动量 $\mathbf{S}$ 在 A 对应的方向上的分量.

接着分析隐变量模型的赋值过程. 由于 XYZ 构成了直角坐标架, 可以设 $v(S_X^2)=0$, $v(S_Y^2)=v(S_Z^2)=1$, 将这个赋值简写为 $X(0)Y(1)Z(1)$, 图中有相应的的标记. 接着注意到 X 和 A 是垂直的, $v(S_X^2)$ 和 $v(S_A^2)$ 不能同时为零, 故有 $v(S_A^2)=1$, 这个推导关系记作 $X(0)A(1)$. 于是, 我们用这样的标记写下整个推导过程,

$$X(0)Y(1)Z(1) \quad X(0)A(1) \quad X(0)A'(1)$$

$$A(1)B(1)C(0) \quad A'(1)B'(1)C'(0) \tag{55}$$

$$C(0)D(1) \quad C'(0)D'(1)$$

$$Z(1)D(1)E(0) \quad Z(1)D'(1)E'(0)$$

$$E(0)F(1) \quad E(0)G(1) \quad E'(0)F'(1) \quad E'(0)G'(1)$$

$$F(1)F'(1)U(0) \quad G(1)G'(1)V(0)$$

$$U(0)V(0) \tag{56}$$

最后一步是矛盾所在. 因为 U 和 V 是垂直的, 故根据 (54), 值 $v(S_U^2)$ 和 $v(S_V^2)$ 不能同时为零, 但是上述赋值过程却给出了自相矛盾的结果, 由此说明非互文的隐变量模型是不成立的.

有两点需要说明.

① 在推导过程的第二步, 即 (55) 式, 也可以采用 $A(1)B(0)C(1)$, $A'(1)B'(0)C'(1)$ 的赋值方式, 接下去的过程会有所不同, 但同样能得到矛盾的结果.

② 虽然看起来在推导过程中并没有用到所有 33 个向量, 但是那些没用到的向量依然是作为不可或缺的. 这是因为, 在赋值的第一步有多种选择, 我们可以如前所述选择 $X(0)Y(1)Z(1)$, 可以选择 $X(1)Y(0)Z(1)$, 也可以选择 $A(0)B(1)C(1)$, 如此等等. 不同的赋值过程将用到不同的向量组合.

9.4. 自旋 1 粒子, 依赖于具体的量子态

现在考虑 $\mathbb{R}^3$ 中五个单位向量 $\mathbf{k}_j$ $(j=1,\cdots,5)$, 它们满足如下正交关系 (如图 6 所示),

$$\mathbf{k}_1 \perp \mathbf{k}_2, \quad \mathbf{k}_2 \perp \mathbf{k}_3, \quad \mathbf{k}_3 \perp \mathbf{k}_4, \quad \mathbf{k}_4 \perp \mathbf{k}_5, \quad \mathbf{k}_5 \perp \mathbf{k}_1 \tag{57}$$

可以简单地记作 $\mathbf{k}_j \perp \mathbf{k}_{j+1}$, 并且当 $j+1$ 等于 6 时视作 1. 显然 $[S_{k_j}^2, S_{k_{j+1}}^2]=0$. 按照经典的观点, 即性质 (52) 至 (54), 我们可以得到下面的不等式

$$v\big(S_{k_1}^2\big)+v\big(S_{k_2}^2\big)+v\big(S_{k_3}^2\big)+v\big(S_{k_4}^2\big)+v\big(S_{k_5}^2\big) \geqslant 3 \tag{58}$$

这个不等式表明 $\sum_{j=1}^5 v\big(S_{k_j}^2\big)$ 的最小值是 3, 可以直接验证. 不等式左端每一项的可能的取值为 0 或 1, 为了求其最小值, 就希望有尽可能多的项取值 0. 例如, 令 $v\big(S_{k_1}^2\big)=0$. 由于 $\mathbf{k}_1 \perp \mathbf{k}_2$, $\mathbf{k}_5 \perp \mathbf{k}_1$, 则根据性质 (54), $v\big(S_{k_2}^2\big)$ 和 $v\big(S_{k_5}^2\big)$ 不能为零, 故 $v\big(S_{k_2}^2\big)=v\big(S_{k_5}^2\big)=1$. 再注意到 $\mathbf{k}_3 \perp \mathbf{k}_4$, 故 $v\big(S_{k_3}^2\big)$ 和 $v\big(S_{k_4}^2\big)$ 不能同时为零, 可以令其中任何一个为零, 另一个等于 1. 因此, 五项相加的结果等于 3. 考虑所有其它情况, 容易看出 3 是最小值.

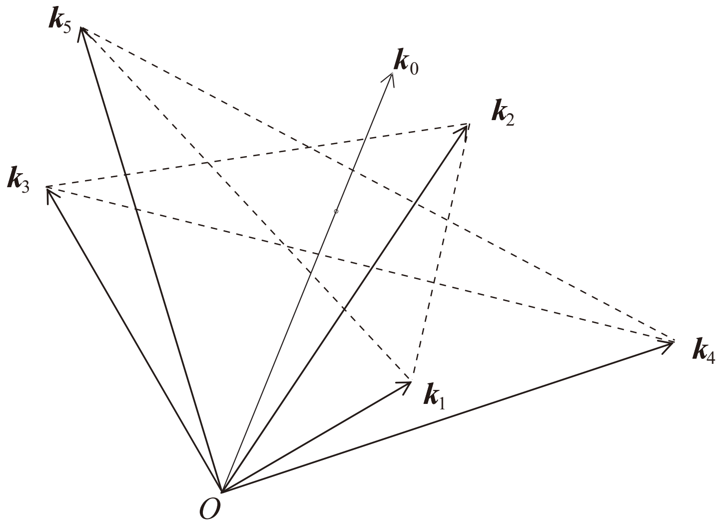


图 6: $\mathbb{R}^3$ 空间中的五个方向矢量, 满足两两正交的关系 (57) 式. 方向 $\mathbf{k}_0$ 穿过五角星的中心.

式 (58) 是根据经典观点得到的结论, 更确切地说, 是非互文的隐变量模型给出的预言. 根据非互文的隐变量模型, 隐变量 λ 的某个固定的取值决定了所有力学量的观测结果, 在这里就是 0 或者 1, 而且, 对于某个观测量 (比如 $S_{k_1}^2$) 而言, 观测结果不依赖于与 $S_{k_1}^2$ 对易的力学量 $S_{k_2}^2$ 和 $S_{k_5}^2$ 的观测结果. 进一步考虑隐变量 λ 的所有可能的取值, 就要在隐变量空间 Λ 上对 (58) 式积分, 得到隐变量模型给出的期望值, 显然, 积分后的结果依然满足相同的不等式, 即

$$\langle v(S_{k_1}^2)\rangle + \langle v(S_{k_2}^2)\rangle + \langle v(S_{k_3}^2)\rangle + \langle v(S_{k_4}^2)\rangle + \langle v(S_{k_5}^2)\rangle \geqslant 3 \tag{59}$$

接下去的问题是, 在特定的量子态 $|\psi\rangle$ 中, 量子力学关于 $\sum_{j=1}^{5}\langle S_{k_j}^2\rangle_\psi$ 的预言结果是多少? 这里 $\langle S_{k_j}^2\rangle_\psi = \langle\psi|S_{k_j}^2|\psi\rangle$. 量子力学给出的结果能否满足不等式 (59)? 为了考虑这个问题, 需要分析 $S_{k_j}^2$ 的一些性质.

对于 $\mathbb{R}^3$ 中的某个任意的方向 $\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$, 自旋角动量的分量 S_n 的矩阵是

$$S_n = \begin{pmatrix} \cos\theta & \frac{e^{-i\phi}\sin\theta}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{e^{i\phi}\sin\theta}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{e^{-i\phi}\sin\theta}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{e^{i\phi}\sin\theta}{\sqrt{2}} & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{60}$$

S_n 的本征值和本征向量是

$$\text{本征值 } +1, \quad \text{本征向量 } \left|n^{(+)}\right\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i2\varphi}\cos^2\frac{\theta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi}\sin\theta \\ \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{61}$$

$$\text{本征值 } -1, \quad \text{本征向量 } \left|n^{(-)}\right\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i2\varphi}\sin^2\frac{\theta}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi}\sin\theta \\ \cos^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{62}$$

$$\text{本征值 } 0, \quad \text{本征向量 } \left|n^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i2\varphi}\sin\theta \\ e^{-i\varphi}\cos\theta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \end{pmatrix} \tag{63}$$

直接计算可以验证下面的等式,

$$S_n^2 + |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \mathbb{1} \tag{64}$$

即, S_n^2 可以表示为 $\mathbb{1} - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|$. 类似地, 五个 $S_{k_j}^2$ 可以表示为 $\mathbb{1} - |k_j^{(0)}\rangle\langle k_j^{(0)}|$, 其中 $|k_j^{(0)}\rangle$ 是 S_{k_j} 的本征值为 0 的本征向量. 因此, 对于给定的 $|\psi\rangle$, 有

$$\sum_{j=1}^{5} \langle S_{k_j}^2 \rangle_\psi = 5 - \sum_{j=1}^{5} \left| \langle \psi | k_j^{(0)} \rangle \right|^2$$

将方向矢量 $\mathbf{k}_j$ 写为 $\mathbf{k}_j = (\sin\theta_j \cos\varphi_j, \sin\theta_j \sin\varphi_j, \cos\theta_j)$, 则 $|k_j^{(0)}\rangle$ 是

$$\left| k_j^{(0)} \right\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i2\varphi_j} \sin\theta_j \\ e^{-i\varphi_j} \cos\theta_j \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\theta_j \end{pmatrix}$$

如果 $|\psi\rangle$ 是某个 S_n 的本征值为 0 的本征向量, 即 (63), 那么计算后发现

$$\left| \langle \psi | k_j^{(0)} \rangle \right|^2 = \left| \langle n^{(0)} | k_j^{(0)} \rangle \right|^2 = \left[\cos\theta \cos\theta_j + \cos(\varphi - \varphi_j) \sin\theta \sin\theta_j \right]^2 = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}_j)^2$$

最后的结果被表示为 $\mathbb{R}^3$ 空间中方向矢量的内积的平方 [1].

现在, 选择方向 $\mathbf{n}$ 为 $\mathbf{k}_0$, 方向 $\mathbf{k}_0$ 穿过五个 $\mathbf{k}_j$ 构成的五角星的中心. 相应的 $|\psi\rangle$ 就是 $|k_0^{(0)}\rangle$. 简单的几何关系表明, 对于所有的 $j = 1, \cdots, 5$, $(\mathbf{k_0} \cdot \mathbf{k}_j)^2 = \frac{1}{\sqrt{5}}$. 因此我们得到, 当 $|\psi\rangle = |k_0^{(0)}\rangle$ 时

$$\sum_{j=1}^{5} \langle S_j^2 \rangle_\psi = 5 - \sqrt{5} \approx 2.764 < 3 \tag{65}$$

与 (59) 比较, 可以看到, 量子力学给出的结果违反非互文性隐变量模型设定的条件, 两种理论是矛盾的.

9.5. 两个自旋 1/2 粒子, 态无关

参看 [4].

对于两个自旋 1/2 的粒子 A 和 B, 考虑如下 9 个算符.

$$\begin{array}{ccc} \sigma_x^A \otimes \mathbb{1}^B & \mathbb{1}^A \otimes \sigma_x^B & \sigma_x^A \otimes \sigma_x^B \\ \mathbb{1}^A \otimes \sigma_y^B & \sigma_y^A \otimes \mathbb{1}^B & \sigma_y^A \otimes \sigma_y^B \\ \sigma_x^A \otimes \sigma_y^B & \sigma_y^A \otimes \sigma_x^B & \sigma_z^A \otimes \sigma_z^B \end{array} \tag{66}$$

每一行或者每一列的 3 个算符是彼此对易的, 第三列的三个算符相乘的结果是 $-\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B$, 除此以外, 每一行或者每一列的三个算符相乘的结果是 $\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B$.

现在尝试用隐变量模型解释上述事实. 从隐变量理论看来, 每一个力学量 $\sigma_x^{A(B)}$ 或者 $\sigma_y^{A(B)}$ 都具有确定的值 —— 由隐变量决定的不依赖于测量环境的值. 把这些值记作 $v(\sigma_x^{A(B)})$ 或者 $v(\sigma_y^{A(B)})$. 进一步地, 对于形如 $\sigma_x^A \sigma_x^B$ 之类的联合观测量, 隐变量理论认为, 联合观测量的值等于定域观测量的值的乘积, 例如

$$v(\sigma_x^A \sigma_x^A) = v(\sigma_x^A) v(\sigma_x^B)$$

[1] 可以用更简捷的计算. 把 $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ 分别表示为 $\hat{S}_x = \hbar \left(\begin{smallmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{smallmatrix}\right)$, $\hat{S}_y = \hbar \left(\begin{smallmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{smallmatrix}\right)$, $\hat{S}_z = \hbar \left(\begin{smallmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{smallmatrix}\right)$, 则 $\mathbf{n}$ 方向上的分量 $\hat{S}_n$ 的本征值为零的本征向量在形式上直接对应于 $\mathbf{n}$.

逐行考察 (66) 式, 隐变量模型需要解释每一行的观测量的相乘结果为 $\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B$ 这一事实. 对于第一行和第二行, 可以用隐变量模型很轻松地写出

$$v(\sigma_x^A)\, v(\sigma_x^B)\, v(\sigma_x^A\sigma_x^B) = v(\sigma_x^A)\, v(\sigma_x^B)\, v(\sigma_x^A)\, v(\sigma_x^B) = \left[v(\sigma_x^A)\right]^2\left[v(\sigma_x^B)\right]^2 = 1$$

$$v(\sigma_y^B)\, v(\sigma_y^A)\, v(\sigma_y^A\sigma_y^B) = v(\sigma_y^B)\, v(\sigma_y^A)\, v(\sigma_y^A)\, v(\sigma_y^B) = \left[v(\sigma_y^A)\right]^2\left[v(\sigma_y^B)\right]^2 = 1$$

因此仅从这两行来看, 量子力学和隐变量模型没有冲突.

对第三行, 应该有

$$v(\sigma_x^A\sigma_y^B)\, v(\sigma_y^A\sigma_x^B)\, v(\sigma_z^A\sigma_z^B) = v(\sigma_x^A)v(\sigma_y^B)\, v(\sigma_y^A)v(\sigma_x^B)\, v(\sigma_z^A\sigma_z^B) = 1 \tag{67}$$

这里, 我们没有分析 $v(\sigma_z^A\sigma_z^B)$ 等于多少.

类似地, 如果逐列考察 (66) 式, 那么第一列和第二列不能体现量子力学和隐变量模型的矛盾.

对于第三列的力学量, 根据量子理论得到的结果是, 它们相乘的结果为 $-\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B$, 因此, 隐变量模型应该给出

$$v(\sigma_x^A\sigma_x^B)\, v(\sigma_y^A\sigma_y^B)\, v(\sigma_z^A\sigma_z^B) = v(\sigma_x^A)v(\sigma_x^B)\, v(\sigma_y^A)v(\sigma_y^B)\, v(\sigma_z^A\sigma_z^B) = -1 \tag{68}$$

比较 (67) 和 (68), 看到明显的矛盾.

有一点需要注意, 在上面的推导中, 我们没有对 $v(\sigma_z^A\sigma_z^B)$ 进行分解.

9.6. 两个自旋 1/2 粒子, 态有关

参看 [5].

两个自旋 1/2 粒子 A 和 B 构成了 $2\otimes 2$ 两体量子系统. 描述 A 和 B 的希尔伯特空间分别是 $\mathcal{H}^A$ 和 $\mathcal{H}^B$. 两个粒子分别有观测量 A 和 B, 它们的本征向量分别是 $|0^A\rangle$, $|1^A\rangle$ 和 $|0^B\rangle$, $|1^B\rangle$, 相应的本征值为 $+1$ 和 -1, 即

$$A\,|0^A\rangle = |0^A\rangle\,, \quad A\,|1^A\rangle = -\,|1^A\rangle$$

$$B\,|0^B\rangle = |0^B\rangle\,, \quad B\,|1^B\rangle = -\,|1^B\rangle$$

实际上 A 和 B 就是泡利矩阵 σ_z. 设整体的量子态是

$$|\Psi\rangle = \sqrt{ab}\,|0^A\rangle\,|1^B\rangle + \sqrt{ab}\,|1^A\rangle\,|0^B\rangle + (a-b)\,|1^A\rangle\,|1^B\rangle \tag{69}$$

这里设 a 和 b 均为正实数, 且 $a > b$, 归一化条件要求 $a^2 + b^2 = 1$. 注意到 $|\Psi\rangle$ 中不包含 $|0\rangle\,|0\rangle$ 项.

再考虑 A 和 B 的另一组观测量, A' 和 B', 它们的本征方程是

$$A'\,|\alpha_0\rangle = |\alpha_0\rangle\,, \quad A'\,|\alpha_1\rangle = -\,|\alpha_1\rangle$$

$$B'\,|\beta_0\rangle = |\beta_0\rangle\,, \quad B'\,|\beta_1\rangle = -\,|\beta_1\rangle$$

其中 $|\alpha_0\rangle\,, |\alpha_1\rangle$ 和 $|\beta_0\rangle\,, |\beta_1\rangle$ 是

$$|\alpha_0\rangle = c\,|0^A\rangle + d\,|1^A\rangle\,, \quad |\alpha_1\rangle = -d\,|0^A\rangle + c\,|1^A\rangle$$

$$|\beta_0\rangle = c\,|0^B\rangle + d\,|1^B\rangle\,, \quad |\beta_1\rangle = -d\,|0^B\rangle + c\,|1^B\rangle$$

这里

$$c=\frac{\sqrt{ab}}{\sqrt{1-ab}},\quad d=\frac{a-b}{\sqrt{1-ab}}$$

通过选择 $\mathcal{H}^A$ 和 $\mathcal{H}^B$ 的不同的基向量, $|\Psi\rangle$ 可以写成不同的形式. 令 $f=\frac{1-ab}{a-b}$, 我们有

$$|\Psi\rangle=f\big[\,|\alpha_0\rangle\,(c\,|0^B\rangle+d\,|1^B\rangle)-c^2(c\,|\alpha_0\rangle-d\,|\alpha_1\rangle)\,|0^B\rangle\,\big] \tag{70}$$

$$|\Psi\rangle=f\big[(c\,|0^A\rangle+d\,|1^A\rangle)\,|\beta_0\rangle-c^2\,|0^A\rangle\,(c\,|\beta_0\rangle-d\,|\beta_1\rangle)\big] \tag{71}$$

$$|\Psi\rangle=f\big[\,|\alpha_0\rangle\,|\beta_0\rangle-c^2(c\,|\alpha_0\rangle-d\,|\alpha_1\rangle)(c\,|\beta_0\rangle-d\,|\beta_1\rangle)\big] \tag{72}$$

量子力学关于 $|\Psi\rangle$ 的不同形式以及不同观测量的测量结果, 有如下结论.

① 根据 (69) 式, 其中不含有 $|0^A\rangle\,|0^B\rangle$ 项, 所以在 $|\Psi\rangle$ 中测量联合观测量 $A\otimes B$, 不可能得到它们同为 $+1$ 的结果, 即该事件的几率为零,

$$P(A=+1,B=+1)=0$$

② 根据 (70) 式, 其中只有 $|\alpha_1\rangle\,|0^B\rangle$ 一项含有 $|\alpha_1\rangle$, 所以, 如果观测到 A' 的值是 -1, 则表明两体系统的态变为 $|\alpha_1\rangle\,|0^B\rangle$, 此时 B 应该处于 $|0^B\rangle$, 即 B 的值是 $+1$, 用条件几率表示就是

$$P(B=+1|A'=-1)=+1$$

③ 根据 (71) 式, 其中只有 $|0^A\rangle\,|\beta_1\rangle$ 一项含有 $|\beta_1\rangle$, 所以, 如果观测到 B' 的值是 -1, 则表明两体系统的态变为 $|0^A\rangle\,|\beta_1\rangle$, 此时 A 应该处于 $|0^A\rangle$, 即 A 的值是 $+1$, 用条件几率表示就是

$$P(A=+1|B'=-1)=+1$$

④ 在 $|\Psi\rangle$ 中测量联合观测量 $A'\otimes B'$, 有一定的非零的几率得到它们同为 -1 的结果. 根据 (72) 式, 这个几率等于 $|\alpha_1\rangle\,|\beta_1\rangle$ 的系数的模的平方, 即

$$P(A'=-1,B'=-1)=f^2c^4d^4\neq 0 \tag{73}$$

现在看看隐变量模型能说些什么. 首先, 隐变量会对上面的各个观测量赋值, 将这些值记作 $v(A), v(A'), v(B), v(B')$.

❶ 对应于量子力学的结论 ①, 隐变量的说法是

$$v(A)\text{ 和 }v(B)\text{ 的值不能同时为 }+1$$

❷ 隐变量模型对结论 ② 的描述是: 如果 $v(A')=-1$, 那么 $v(B)=+1$, 用逻辑关系表示为

$$v(A')=-1\Longrightarrow v(B)=+1$$

❸ 隐变量模型对结论 ③ 的描述是:

$$v(B')=-1\Longrightarrow v(A)=+1$$

❹ 对于第 ④ 点, 隐变量模型的结论是: $v(A')$ 和 $v(B')$ 有一定的可能性同时为 -1.

把上述推理过程综合在一起, 可以看到, 当第 ❹ 点中的事件发生的时候, 由 ❷ 和 ❸ 可以推出 $v(A)$ 和 $v(B)$ 同时为 1, 但是这个结论与 ❶ 矛盾 (见图 7). 所以, 隐变量理论对观测量赋以确定的值的做法是不成立的. 而在量子理论中, 所谓的 “值” 只是测量结果的体现, 不具备经典意义上或者本体论意义上的实在性, 从 ① 到 ④ 的结论只是观测结果的描述 —— 而且是不同的实验环境中的结果, 因而不存在逻辑上的矛盾和抵触.

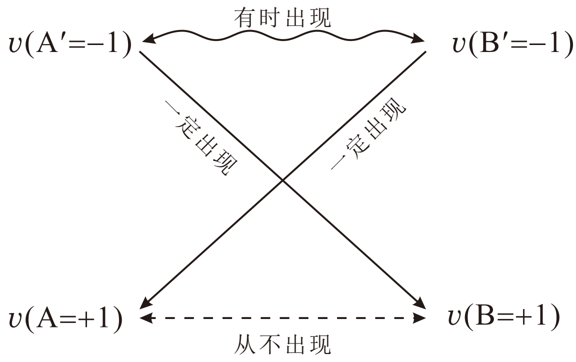


图 7: 隐变量模型中的矛盾

注意到当 (73) 式给出的几率为零的时候不会有矛盾出现. $P(A'=-1,B'=-1)=f^2c^4d^4=0$ 的条件是, a 和 b 有一个为零 (二者不能同时为零, 否则 $|\Psi\rangle=0$), 或者 $a=b\neq 0$. 当 a 和 b 有一个为零时, $|\Psi\rangle$ 是直积态, 不会表现出与隐变量模型的矛盾. 当 $a=b\neq 0$ 时, 由归一化条件 $a^2+b^2=1$ 可得, $a=b=\frac{1}{\sqrt{2}}$, 此时 $|\Psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle+|10\rangle)$, 这不是直积态, 而是最大纠缠态, 但是仍然没有表现出与隐变量模型的矛盾, 这说明, 上述过程不适用于最大纠缠态.

关于 Bell 定理和互文性问题的文献很多, 可以参看 [6–12], 其中 Physics Today 和 American Journal of Physics 上的文章比较浅显易懂.

10. 轨道角动量

在讨论粒子在三维空间的运动时已经分析了轨道角动量 $\mathbf{L}=\mathbf{R}\times\mathbf{P}$, 并且, (L^2,L_z) 有共同本征态 $|\ell,m\rangle$, 在位置表象中的本征函数就是球谐函数 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$. 在这一节中, 从旋转变换的角度重新讨论轨道角动量.

10.1. 旋转变换的具体形式

先回顾经典力学中讨论刚体运动的时候涉及到的旋转变换.

Euler 角, 经典情形 采用被动观点, 用 Euler 角描述, 如图 8 所示.

将参考系 (xyz) 进行如下变换:

进动 绕 z 转动角度 α,

$$(xyz)\xrightarrow{R(z,\alpha)}(x'y'z')$$

这里

$$R(z,\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

基向量的变换是

$$\begin{pmatrix}e'_x & e'_y & e'_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e_x & e_y & e_z\end{pmatrix}R(z,\alpha)$$

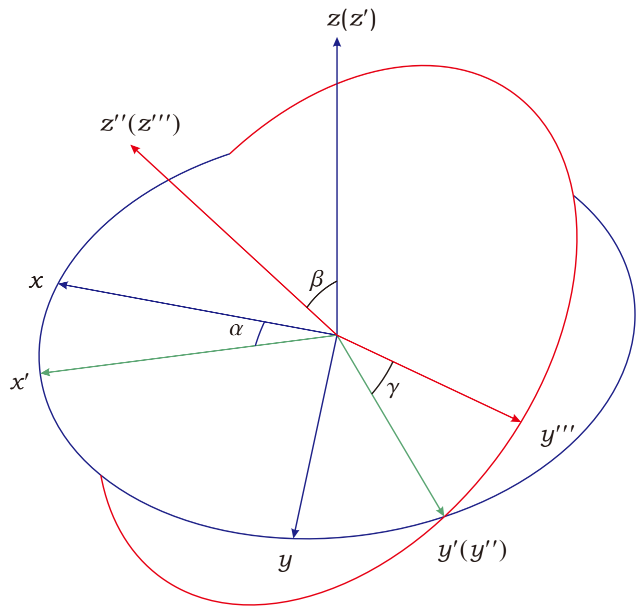


图 8

向量 **r** 在两个参考系中的表示之间的关系是.

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R^T(z,\alpha) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

对于下面的两个变换, 基向量和向量表示的变化与此类似, 不再详细列出.

章动 绕 y' 轴转动角度 β,

$$(x'y'z') \xrightarrow{R(y',\beta)} (x''y''z'')$$

自转 绕 z'' 轴转动角度 γ,

$$(x''y''z'') \xrightarrow{R(z'',\gamma)} (x'''y'''z''')$$

总的变换是

$$R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

向量 **r** 在参考系 (xyz) 中的坐标和在参考系 $(x''y''z'')$ 中的坐标之间的关系是

$$\begin{pmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{pmatrix} = R^T(z'',\gamma)R^T(y',\beta)R^T(z,\alpha) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

也可以采用主动观点描述. 开始的时候, 实验室参考系 (xyz) 和刚体参考系 (XYZ) 是重合的.

- 首先, 让刚体绕 z 轴转动角度 α, 刚体参考系的 Y 轴在空间的指向记作 **n**. 变换矩阵是 $R(z,\alpha)$.
- 然后, 让刚体绕 **n** 转动角度 β, 这时刚体的 Z 轴在空间的指向记作 **m**. 变换矩阵是 $R(\mathbf{n},\beta)$.
- 最后, 让刚体绕 **m** 转动角度 γ. 变换矩阵是 $R(\mathbf{m},\gamma)$.

总的变换是

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(\mathbf{m},\gamma)R(\mathbf{n},\beta)R(z,\alpha)$$

在 R 的形式中, 包含不容易表示的旋转变换: 绕 $\mathbf{n}$ 和 $\mathbf{m}$ 的旋转.

注意到

$$R(\mathbf{n},\beta)=R(z,\alpha)R(y,\beta)R^T(z,\alpha) \tag{74}$$

$$R(\mathbf{m},\gamma)=R(\mathbf{n},\beta)R(z,\gamma)R^T(\mathbf{n},\beta) \tag{75}$$

重新计算 $R(\alpha,\beta,\gamma)$,

$$\begin{aligned}R(\alpha,\beta,\gamma)&=R(\mathbf{n},\beta)R(z,\gamma)R^T(\mathbf{n},\beta)\ R(\mathbf{n},\beta)R(z,\alpha)\\&=R(\mathbf{n},\beta)R(z,\alpha)R(z,\gamma)\\&=R(z,\alpha)R(y,\beta)R^T(z,\alpha)\ R(z,\alpha)R(z,\gamma)\\&=R(z,\alpha)R(y,\beta)R(z,\gamma)\end{aligned}$$

最后的形式是绕固定轴旋转变换的相乘.

Euler 角, 量子情形 角动量是旋转变换的生成元, 对于在 Hilbert 空间中量子态, 绕方向 $\mathbf{k}$ 旋转角度 ϑ 的变换是酉算子

$$U(\mathbf{k},\vartheta)=e^{-i\vartheta\mathbf{k}\cdot\mathbf{J}/\hbar}$$

采用主动观点, 用 Euler 角描述, 如图 9 所示,

$$U(\alpha,\beta,\gamma)=U(\mathbf{m},\gamma)U(\mathbf{n},\beta)U(z,\alpha) \tag{76}$$

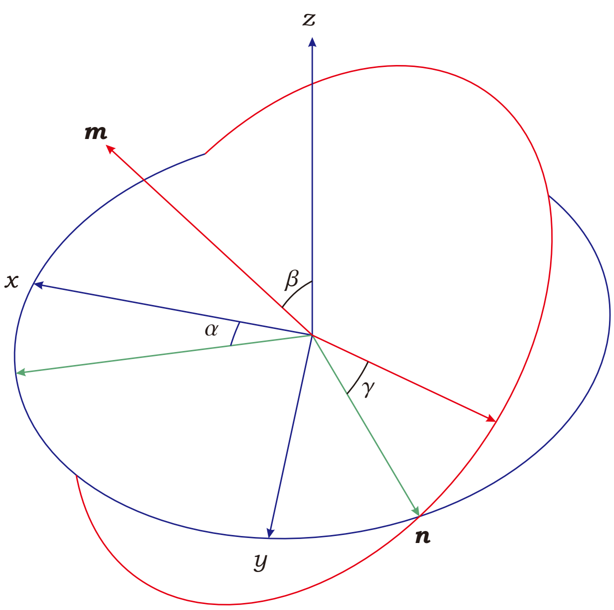


图 9

为了化简上式, 首先来证明可以与 (74) 式类比的关系,

$$U(\mathbf{n},\beta)=U(z,\alpha)U(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)$$

其中方向 $\mathbf{n}$ 是 $\mathbf{n}=\big(-\sin\alpha\ \ \cos\alpha\ \ 0\big)$.

$$U(y,\beta)=e^{-i\beta J_y/\hbar},\quad U(z,\alpha)=e^{-i\alpha J_z/\hbar}$$

$$\begin{aligned}
&U(z,\alpha)U(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)\\
=&e^{-i\alpha J_z/\hbar}\,e^{-i\beta J_y/\hbar}\,e^{i\alpha J_z/\hbar}\\
&\boxed{\text{将酉变换 } e^{-i\alpha J_z/\hbar} \text{ 作用于 } J_y}\\
=&\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\beta\left[e^{-i\alpha J_z/\hbar}\,J_y\,e^{i\alpha J_z/\hbar}\right]\right\}\\
=&\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\beta\left[J_y\cos\alpha-J_x\sin\alpha\right]\right\}\\
=&e^{-i\beta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar}=U(\mathbf{n},\beta)
\end{aligned}$$

再注意方向 $\mathbf{m}=\big(\sin\beta\cos\alpha,\ \sin\beta\sin\alpha,\ \cos\beta\big)$, 这个方向可以从 $\mathbf{e}_z$ 通过如下旋转变换获得,

$$\mathbf{e}_z\longrightarrow\mathbf{m}=R(\mathbf{e}_z,\alpha)R(\mathbf{e}_y,\beta)\,\mathbf{e}_z$$

通过相应的酉变换可以将 z 方向上的角动量分量 J_z 变换到 $\mathbf{m}$ 方向上的角动量分量 J_m, 验证一下:

$$\begin{aligned}
&U(z,\alpha)U(y,\beta)J_zU^{\dagger}(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)\\
=&U(z,\alpha)\big[J_z\cos\beta+J_x\sin\beta\big]U^{\dagger}(z,\alpha)\\
=&\big[U(z,\alpha)J_zU^{\dagger}(z,\alpha)\big]\cos\beta+\big[U(z,\alpha)J_xU^{\dagger}(z,\alpha)\big]\sin\beta\\
=&J_z\cos\beta+\big(J_x\cos\alpha+J_y\sin\alpha\big)\sin\beta=J_m
\end{aligned}$$

所以, 绕 $\mathbf{m}$ 的旋转变换 $U(\mathbf{m},\gamma)$ 可以表示为

$$\begin{aligned}
&U(\mathbf{m},\gamma)=e^{-i\gamma\mathbf{m}\cdot\mathbf{J}/\hbar}=e^{-i\gamma J_m/\hbar}\\
=&\exp\left\{-\frac{i\gamma}{\hbar}U(z,\alpha)U(y,\beta)J_zU^{\dagger}(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)\right\}\\
&\boxed{\text{将酉变换 } U(z,\alpha)U(y,\beta) \text{ 及其厄密共轭移动上式的左右两边}}\\
=&U(z,\alpha)U(y,\beta)\ \exp\left\{-\frac{i\gamma}{\hbar}J_z\right\}\ U^{\dagger}(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)
\end{aligned}$$

现在来计算 (76),

$$\begin{aligned}
&U(\alpha,\beta,\gamma)=U(\mathbf{m},\gamma)U(\mathbf{n},\beta)U(z,\alpha)\\
=&\underbrace{U(z,\alpha)U(y,\beta)U(z,\gamma)U^{\dagger}(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)}_{U(\mathbf{m},\gamma)}\ \underbrace{U(z,\alpha)U(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)}_{U(\mathbf{n},\beta)}\ U(z,\alpha)
\end{aligned}$$

也就是

$$\boxed{U(\alpha,\beta,\gamma)=U(z,\alpha)U(y,\beta)U(z,\gamma)} \tag{77}$$

上式右端的每一个酉矩阵都是绕固定轴的旋转变换.

10.2. 旋转变换的矩阵元

分析 $U(\alpha,\beta,\gamma)$ 的矩阵元. 基向量是 J^2 和 J_z 的共同本征函数 $|j,m\rangle$, 矩阵元是

$$\langle j',m'|U(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle$$

首先需要注意的是, 如果 $j\neq j'$, 那么矩阵元为零, 因而只需要考虑在子空间 $\mathcal{H}_j$ 中的矩阵元.

$$\begin{aligned} D^{(j)}_{m',m} &= \langle j,m'|U(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle \\ &= \langle j,m'|e^{-i\alpha J_z/\hbar}\, e^{-i\beta J_y/\hbar}\, e^{-i\gamma J_z/\hbar}|j,m\rangle \\ &= e^{-i(\alpha m'+\gamma m)}\, d^{(j)}_{m',m}(\beta) \end{aligned} \tag{78}$$

其中 $d^{(j)}(\beta)=U(y,\beta)=e^{-i\beta J_y/\hbar}$.

以上过程说明, 如果用 Euler 角描述旋转变换, 那么酉矩阵的矩阵元主要是由绕 y 轴的旋转变换决定的.

下面给出 $j=\frac{1}{2},1$ 时矩阵 $d^{(j)}$ 的生成元.

自旋 1/2 当 $j=\frac{1}{2}$ 时,

$$d^{(1/2)}(\beta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$$

虽然这是一个正交矩阵, 但不属于 SO(2) 变换, 而是 SU(2) 变换.

角动量量子数为 1 当 $j=1$ 时, 我们已经知道角动量的三个分量 J_x, J_y, J_z 的具体的矩阵形式. 注意到这时有 $J_y^3=J_y$ (这里令 $\hbar=1$), 可以将 $d^{(1)}$ 表示为

$$d^{(1)}(\beta)=e^{-i\beta J_y}=\mathbb{1}-J_y^2(1-\cos\beta)-iJ_y\sin\beta$$

一般情况下的 $d^{(j)}(\beta)$ 形式, 参看 Sakurai 书中的推导.

对角动量的本征向量的旋转变换,

$$U(\alpha,\beta,\gamma)\,|j,m\rangle=\sum_{j',m'}|j',m'\rangle\langle j',m'|\,U(\alpha,\beta,\gamma)\,|j,m\rangle=\sum_{m'}|j,m'\rangle\,D^{(j)}_{m',m}(\alpha,\beta,\gamma) \tag{79}$$

对于固定的 j, 由 $\{|j,m\rangle\}$ 张开的 $2j+1$ 的子空间是一个不变子空间, 就是说, 这个子空间中的向量在旋转变换的作用下仍然留在这个子空间中. 从 (79) 中看到, 变换后不会出现其它的 j'. 而且, 它还是一个不可约的子空间, 意思是, 其中不存在更小的不变子空间.

10.3. 轨道角动量的本征函数

以前求解过关于 L^2 和 L_z 的本征方程, 得到了它们共同的本征函数, 球谐函数. 现在, 我们知道了角动量的代数结构, 有了升降算子, 因而可以像对待谐振子那样, 从一个特殊的本征态出发, "升降" 出其它的本征态和本征函数.

升降算子 $L_\pm = L_x \pm iL_y$ 在位置表象中的形式是在位置表象中,

$$L_x = -i\hbar\Big(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Big)$$

$$L_y = -i\hbar\Big(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\Big)$$

$$L_+ = -i\hbar e^{i\phi}\Big(i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\Big)$$

用升算子 L_+ 作用于 $|\ell,\ell\rangle$, 结果应该为零. 在位置表象中, 有一阶偏微分方程,

$$-i\hbar e^{i\phi}\Big(i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\Big)Y_{\ell,\ell}(\theta,\phi) = 0$$

可以解出

$$Y_{\ell,\ell}(\theta,\phi) = c_\ell e^{i\ell\phi}\sin^\ell\theta$$

其中

$$c_\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

这里的归一化常数中包含了 $(-1)^\ell$, 其原因是, 考虑到用降算子 L_- 作用于 $Y_{\ell,\ell}$, 将得到 $Y_{\ell,0}$, 我们希望由此得到的 $Y_{\ell,0}$ 与 Legendre 多项式 $P_\ell(\cos\theta)$ 有相同的符号.

用降算子 L_- 作用 $Y_{\ell,\ell}$ 若干次, 得到球谐函数 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$, $-\ell \leqslant m \leqslant \ell$.

关于球谐函数的性质, 参看 Cohen 书 Complement $\mathrm{A_{VI}}$.

在上述推导过程中, 似乎没有看到为什么轨道角动量量子数 ℓ 不能为半整数. 以下事实将说明 ℓ 只能取整数.

2π 旋转 波函数的单值性意味着绕任意方向旋转 2π 角度都不会对波函数带来改变. 我们将看到, 只有当角动量量子数为整数的时候才能如此. 下面的方程反映了这一结论.

$$U(\mathbf{n},2\pi)\,|j,m\rangle = e^{-i2\pi\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar}\,|j,m\rangle = (-1)^{2j}\,|j,m\rangle \tag{80}$$

这个方程说的是, 将角动量的本征态 $|j,m\rangle$ 绕任意方向 $\mathbf{n}$ 旋转角度 2π, 当 j 为整数时, 结果仍然是 $|j,m\rangle$; 当 j 为半整数时, 得到 $-|j,m\rangle$. 因此, 既然要求空间波函数在 2π 旋转下不变, 那么轨道角动量量子数必须为整数.

现在来证明 (80) 式. 先考虑绕 z 轴的旋转变换.

$$U(z,2\pi)\,|j,m\rangle = e^{-i2\pi J_z/\hbar} = e^{-i2\pi m}\,|j,m\rangle = (-1)^{2j}\,|j,m\rangle$$

当 j 是整数的时候, m 也是整数, 2π 的旋转变换不改变量子态; 当 j 是半整数的时候, m 也是半整数, 2π 旋转变换后量子态有了相位的改变.

这是绕 z 轴旋转 2π 的结论. 任意的某个方向 $\mathbf{n}$ 上角动量的分量 $J_n = \mathbf{n}\cdot\mathbf{J}$ 可以从 J_z 经过旋转变换得到,

$$J_n = VJ_zV^\dagger$$

这里 V 的具体形式容易写出. 用球坐标的两个角度坐标 (θ,ϕ) 表示方向 $\mathbf{n}$. 从 $\mathbf{e}_z$ 到 $\mathbf{n}$ 的变换是

$$\mathbf{n} = R(z,\phi)R(y,\theta)\mathbf{e}_z$$

于是 V 表示为

$$V = e^{-i\phi J_z/\hbar}e^{-i\theta J_y/\hbar}$$

将 V 以超算子的身份作用于 $U(z,\phi)$, 便得到绕 $\mathbf{n}$ 方向旋转角度 ϕ 的变换,

$$U(\mathbf{n},\phi) = VU(z,\phi)V^\dagger$$

不过, 在下面的计算中我们并不需要用到 V 的具体形式, 只需要关注这样一个事实, 如果将 V 或者 $V^\dagger$ 作用于 $|j,m\rangle$, 那么变换后的结果仍然在以 j 标记的不变子空间 $\mathcal{H}_j$ 中.

不变子空间 $\mathcal{H}_j$ 中任意某个向量可以表示为 $\sum_m c_m |j,m\rangle$. 对这个向量作旋转变换 $U(z,2\pi)$, 有

$$U(z,2\pi)\sum_m c_m |j,m\rangle = \sum_m c_m U(z,2\pi)|j,m\rangle = (-1)^{2j}\sum_m c_m |j,m\rangle$$

因此, 在 $U(z,2\pi)$ 变换下 $V^\dagger |j,m\rangle$ 也满足上式.

$$U(z,2\pi)V^\dagger |j,m\rangle = (-1)^{2j} V^\dagger |j,m\rangle$$

$$VU(z,2\pi)V^\dagger |j,m\rangle = (-1)^{2j} VV^\dagger |j,m\rangle$$

$$U(\mathbf{n},2\pi)|j,m\rangle = (-1)^{2j}|j,m\rangle$$

这就是 (80) 式.

另一方面, 我们还可以看到, 将轨道角动量表示为 $\mathbf{L}=\mathbf{R}\times\mathbf{P}$, 以 L_z 为生成元的绕 z 轴的 2π 旋转变换不会影响波函数, 即

$$\langle \mathbf{r}|e^{-i2\pi L_z/\hbar}|\psi\rangle = \langle \mathbf{r}|\psi\rangle \tag{81}$$

利用 (16), 容易得到上述结论, 表明轨道角动量量子数必须为整数.

$Y_{1/2,1/2}$ 是不合理的 假设轨道角动量量子数 ℓ 和 m 可以为半整数, 例如, 设 $\ell = m = \frac{1}{2}$, 那么

$$Y_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta,\phi) = c_{\frac{1}{2}} e^{i\frac{\phi}{2}}\sqrt{\sin\theta}$$

用降算子 L_- 作用, 得到

$$Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = L_- Y_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = -c_{-\frac{1}{2}} e^{-i\frac{\phi}{2}}\cot\theta\sqrt{\sin\theta}$$

这是不能接受的, 因为当 $\theta = 0,\pi$ 的时候, $\left|Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\right| \to \infty$. 而且, 直接求解方程 $L_-|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle = 0$, 会得到另一个不同形式的 $Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}(\theta,\phi)$.

10.4. 球谐函数与旋转变换的矩阵元之间的联系

考虑轨道角动量. 用 Euler 角表示的旋转变换操作是酉算子 $U(\alpha,\beta,\gamma)$. 在子空间 $\mathcal{H}_\ell$ 中表示为 $D^{(\ell)}$, 它的矩阵元是

$$D^{(\ell)}_{m',m} = e^{-i(\alpha m+\gamma m)} d^{(\ell)}_{m',m}(\beta)$$

球谐函数 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ 是轨道角动量算子 $\{L^2, L_z\}$ 的共同本征函数 $|\ell,m\rangle$ 在位置表象的球坐标中的表示. 二者之间有如下关系,

$$\boxed{Y_{\ell,m}(\theta,\phi) = c_\ell\big\{D^{(\ell)}_{m,0}(\phi,\theta,0)\big\}^*} \tag{82}$$

上式包含的想法是,

- z 方向和 $\mathbf{n}=(\theta,\phi)$ 之间的关系是 $\mathbb{R}^3$ 中的旋转变换.

- $Y_{\ell,m}(0,0)$ 和 $Y_{\ell,m}(\mathbf{n}) = Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ 之间的关系是酉变换.

- $Y_{\ell,m}(0,0)$ 是一个常数, 因此 $Y_{\ell,m}(\mathbf{n})$ 与旋转变换的生成元有直接联系.

下面证明 (82) 式. 首先考虑, 当 $\mathbb{R}^3$ 中的单位向量 $\mathbf{n} = (\theta,\phi)$ 被某个 SO(3) 旋转变换作用, 变为 $\mathbf{n} = (\theta',\phi')$, 球谐函数将经历怎样的变化? 有两种途径解决这个问题:

1. 用 $U(\alpha,\beta,\gamma)$, (或者 $D^{(\ell)}$) 直接作用于球谐函数.

2. 考虑空间坐标的变换对函数带来的影响.

这两种途径应该给出等价的描述.

先考虑酉变换, 让 $U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)$ 作用于 $|\ell,m\rangle$,

$$U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)\,|\ell,m\rangle = \left(D^{(\ell)}\right)^\dagger|\ell,m\rangle = \{\,|\ell,m'\rangle\}\ \text{的线性叠加}$$

类似于 (79) 式, 上述线性叠加形式可以表示为

$$\begin{aligned}\left(D^{(\ell)}\right)^\dagger|\ell,m\rangle &= \sum_{m'=-\ell}^{\ell}|\ell,m'\rangle\ \langle\ell,m'|\left(D^{(\ell)}\right)^\dagger|\ell,m\rangle\\ &= \sum_{m'=-\ell}^{\ell}|\ell,m'\rangle\left[\ \langle\ell,m|D^{(\ell)}|\ell,m'\rangle\ \right]^*\\ &= \sum_{m'=-\ell}^{\ell}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}\right)^*|\ell,m'\rangle\end{aligned}$$

在位置表象中, 采用球坐标, 有

$$\langle\theta,\phi|\left(D^{(\ell)}\right)^\dagger|\ell,m\rangle = \langle\theta,\phi|\sum_{m'}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}\right)^*|\ell,m'\rangle = \sum_{m'}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}\right)^*Y_{\ell,m'}(\theta,\phi) \tag{83}$$

这不过是不变子空间性质的反映: 旋转变换后, $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ 变为相同的 ℓ, 不同的 m' 的一系列球谐函数 $Y_{\ell,m'}(\theta,\phi)$ 的线性叠加.

再有一点需要注意的是, 这里我们用 $U^\dagger$ (而不是 U) 作用于 $|\ell,m\rangle$, 只是为了使推导结果更接近需要证明的结论. 如果酉变换 U 对应于正交变换 $\mathcal{R}$, 那么 $U^\dagger$ 就对应于 $\mathcal{R}^T$.

再来分析旋转变换对函数的影响.

回顾 (7) 式, 如果对向量 $\mathbf{r}\in\mathbb{R}^3$ 作旋转变换 $\mathcal{R}$, 使得 $\mathbf{r}\to\mathbf{r}' = \mathcal{R}\mathbf{r}$, 那么将旋转变换作用于波函数 $\psi(\mathbf{r})$, 就有

$$\psi(\mathbf{r})\longrightarrow\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}) = \psi(\mathcal{R}^T\mathbf{r})$$

在位置表象的基向量上表示, 这就是

$$\langle\mathbf{r}|\psi\rangle\longrightarrow\langle\mathbf{r}|\psi'\rangle = \langle\mathcal{R}^T\mathbf{r}|\psi\rangle$$

把上式用于球谐函数,

$$Y_{\ell,m}(\mathbf{n}) = \langle\mathbf{n}|\ell,m\rangle\longrightarrow\langle\mathcal{R}^T\mathbf{n}|\ell,m\rangle = Y_{\ell,m}(\mathbf{k}) \tag{84}$$

其中 $\mathbf{k} = \mathcal{R}^T\mathbf{n}$.

回头再看 (83) 式. 与 $\left(D^{(\ell)}\right)^{\dagger}$ 对应的 $\mathbb{R}^3$ 中的旋转变换是 $\mathcal{R}^{-1}=\mathcal{R}^T$, 在这种情况下, 球谐函数经历的变换过程是将 (84) 式中的 $\mathcal{R}^T$ 替换为 $\mathcal{R}$, 即

$$Y_{\ell,m}(\mathbf{n})=\langle\mathbf{n}|\ell,m\rangle\longrightarrow\langle\mathcal{R}\mathbf{n}|\ell,m\rangle=Y_{\ell,m}(\mathbf{n}')$$

其中 $\mathbf{n}'=\mathcal{R}\mathbf{n}$, 对应的球坐标是 (θ',ϕ'), 上式也就是

$$Y_{\ell,m}(\theta,\phi)\longrightarrow Y_{\ell,m}(\theta',\phi') \tag{85}$$

(83) 和 (85) 是等价的, 于是有

$$\langle\theta,\phi|\left(D^{(\ell)}\right)^{\dagger}|\ell,m\rangle=Y_{\ell,m}(\theta',\phi') \tag{86}$$

重申 (θ',ϕ') 是 $\mathcal{R}(\mathbf{n})$ 的方位角. 进而将 (83) 式改写为

$$\boxed{Y_{\ell,m}(\theta',\phi')=\sum_{m'}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}\right)^{*}Y_{\ell,m'}(\theta,\phi)} \tag{87}$$

至此得到了球谐函数与旋转变换的矩阵元之间关系的初步形式. 现在需要考虑特殊的变换和特殊的初态, 所谓特殊的初态, 就是 $Y_{\ell,m}(0,0)$, 它是一个常数.

选择一个特殊的变换, 令 $\beta=\gamma=0$, 只有绕 z 旋转角度 α 的变换, 这使得 $\phi\to\phi+\alpha$, 而 θ 保持不变. 由 (87) 式,

$$Y_{\ell,m}(\theta,\phi+\alpha)=\sum_{m'}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}(\alpha,0,0)\right)^{*}Y_{\ell,m'}(\theta,\phi)=e^{i\alpha m}Y_{\ell,m}(\theta,\phi) \tag{88}$$

这里用到了 $D^{(j)}_{m',m}=e^{-i(\alpha m'+\gamma m)}\,d^{(j)}_{m',m}(\beta)$, 并注意到 $d^{(\ell)}_{m',m}(0)=\delta_{m',m}$. (88) 式本是球谐函数的一个简单性质, 但是这里我们并没有用到球谐函数的具体形式, 这个结果来自于旋转变换.

令 $\phi=0$, 给出

$$Y_{\ell,m}(\theta,\alpha)=e^{i\alpha m}Y_{\ell,m}(\theta,0)$$

当 $\theta=0$ 时, $Y_{\ell,m}(0,\alpha)=e^{i\alpha m}Y_{\ell,m}(0,0)$. 注意到 $\theta=0$ 描述的是 z 方向, 因此 $Y_{\ell,m}(0,\alpha)$ 的函数形式应该与 α 无关, 否则将失去单值性. 当 $m=0$ 时, $Y_{\ell,0}(0,\alpha)=Y_{\ell,0}(0,0)$, 这时 α 对单值性没有影响. 但是当 $m\neq 0$ 时, α 就有可能破坏 $Y_{\ell,m}(0,\alpha)$ 的单值性, 除非 $Y_{\ell,m}(0,0)=0$, 因此得到

$$Y_{\ell,m}(0,0)=c_\ell\delta_{m,0} \tag{89}$$

其中 c_ℓ 是一个仅仅与 ℓ 有关的常数, 回顾球谐函数的具体形式, 有

$$c_\ell=\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}$$

并且

$$Y_{\ell,m}(0,\phi)=e^{im\phi}Y_{\ell,m}(0,0)=e^{im\phi}c_\ell\delta_{m,0} \tag{90}$$

现在有了 $Y_{\ell,m}(0,0)$ 或者 $Y_{\ell,m}(0,\phi)$ 的表达式, 然后, 在变换 (87) 中, 令 $\theta=0$,

$$\begin{aligned}Y_{\ell,m}(\theta',\phi')&=\sum_{m'}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma)\right)^{*}Y_{\ell,m'}(0,\phi)\\&=\sum_{m'}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma)\right)^{*}c_\ell e^{im'\phi}\delta_{m',0}\\&=c_\ell\left(D^{(\ell)}_{m,0}(\alpha,\beta,\gamma)\right)^{*}\end{aligned}$$

当然, 这里的 θ' 和 ϕ' 不是任意的, 而是从 z 方向变换而来. 变换参数是 $\alpha=\phi'$, $\beta=\theta'$, γ 则不能确定. 但是, $D^{(\ell)}_{m,0}(\alpha,\beta,\gamma)$ 与 γ 无关, 所以不妨令 $\gamma=0$,

$$Y_{\ell,m}(\theta,\phi)=c_\ell\{D^{(\ell)}_{m,0}(\phi,\theta,0)\}^*$$

即 (82) 式.

上述证明过程体现了我们反复强调的一件事 —— 在不同的表象中描述旋转变换 (以至于其它操作).

11. 角动量的相加

角动量的相加实际上可以看作是两体量子系统中的问题.

两个量子系统 A 和 B, 自身的角动量分别是 $\mathbf{J}^A$ 和 $\mathbf{J}^B$, 将它们各自的角动量相加,

$$\mathbf{J}:=\mathbf{J}^A+\mathbf{J}^B=\mathbf{J}^A\otimes\mathbb{1}^B+\mathbb{1}^A\otimes\mathbf{J}^B$$

首先注意这是一个两体量子系统, 需要在适当的地方添上单位算子. 其次, 相加的结果 $\mathbf{J}$ 具有角动量的性质吗? 如果 $\mathbf{J}$ 仍然是一个角动量算子, 那么该如何描述?

11.1. 两个双值量子系统

先分析最简单的情况 —— 两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子构成的两体量子系统. Hilbert 空间 $\mathscr{H}=\mathscr{H}^A\otimes\mathscr{H}^B=\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$. 令

$$\mathbf{S}=\mathbf{S}^A+\mathbf{S}^B=\mathbf{S}^A\otimes\mathbb{1}^B+\mathbb{1}^A\otimes\mathbf{S}^B$$

它的三个分量是

$$S_j=S^A_j+S^B_j=S^A_j\otimes\mathbb{1}^B+\mathbb{1}^A\otimes S^B_j,\quad j=x,y,z$$

计算 $\mathbf{S}$ 的各个分量之间的对易关系,

$$[S_x,S_y]=i\hbar S_z,\quad \mathbf{S}\times\mathbf{S}=i\hbar\mathbf{S}$$

对易关系表明, 可以把 $\mathbf{S}$ 视作角动量, 是两体系统总的自旋角动量.

计算 S^2 以及相关的对易子,

$$S^2=\left(S^A\right)^2+\left(S^B\right)^2+2S^A_zS^B_z+S^A_+S^B_-+S^A_-S^B_+$$

$$[S^2,\mathbf{S}]=0$$

$$\left[S^2,\left(S^A\right)^2\right]=\left[S^2,\left(S^B\right)^2\right]=0$$

再考虑如下对易关系,

$$\left[\left(S^A\right)^2,\mathbf{S}^A\right]=0,\quad \left[\left(S^B\right)^2,\mathbf{S}^B\right]=0$$

$$\left[\mathbf{S},\left(S^A\right)^2\right]=\left[\mathbf{S},\left(S^B\right)^2\right]=0$$

$$\left[S_z,S^A_z\right]=\left[S_z,S^B_z\right]=0$$

不过, S^2 与 S^A_z 不对易, 与 S^B_z 也不对易.

有两种基向量的选择方式,

$$\left\{\left(S^{A}\right)^{2},\ \left(S^{B}\right)^{2},\ S_{z}^{A},\ S_{z}^{B}\right\} \Longrightarrow |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle \tag{91}$$

$$\left\{\left(S^{A}\right)^{2},\ \left(S^{B}\right)^{2},\ S^{2},\ S_{z}\right\} \Longrightarrow |s_1, s_2; s, m\rangle \tag{92}$$

这里 $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}, m_1 = \pm\frac{1}{2}, m_2 = \pm\frac{1}{2}$.

以上两组基向量有共同的部分, $|s_1, s_2\rangle$, 就此省去. 第一组基向量相当于我们常用的描述 $2 \otimes 2$ 系统的自然基向量

$$\left|+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left|+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left|-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\Updownarrow$$

$$|00\rangle\ ,\ |01\rangle\ ,\ |10\rangle\ ,\ |11\rangle$$

注意到 S_z 与第一组 (91) 中的四个力学量都对易, 因此 $|m_1, m_2\rangle$ 也应该是 S_z 的本征向量, 实际上

$$S_z\,|m_1, m_2\rangle = (S_z^A + S_z^B)\,|m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar\,|m_1, m_2\rangle$$

容易写出 S_z 的矩阵,

$$S_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

S_z 的本征值记作 $m_s\hbar$,

$$m_s = m_1 + m_2 = \begin{cases} +1, & m_1 = m_2 = \frac{1}{2} \\ 0, & m_1 = \frac{1}{2},\ m_2 = -\frac{1}{2}\ \text{或者}\ m_1 = -\frac{1}{2},\ m_2 = \frac{1}{2} \\ -1, & m_1 = m_2 = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

本征值 $m_s = \pm 1$ 是非简并的, 本征值 $m_s = 0$ 有两重简并.

考虑 S^2 的矩阵形式.

$$S^2 = \left(S^A\right)^2 + \left(S^B\right)^2 + 2S_z^A S_z^B + S_+^A S_-^B + S_-^A S_+^B$$

在基向量 $|m_1, m_2\rangle$ 上 S^2 的矩阵是

$$S^2 = \hbar^2\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

继续求出 S^2 的本征值和本征向量, 并考虑到 S_z, 用 $|s, m_s\rangle$ 表示它们的共同本征向量, 有

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle - \left|-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\right\rangle\right)$$

$$\begin{cases} |1,1\rangle = \left|+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\right\rangle \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle + \left|-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\right\rangle\right) \\ |1,-1\rangle = \left|-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle \end{cases}$$

分别称为自旋单态 (singlet) 和三重态 (triplet), 前者对应的总的自旋角动量为 $s=0$, 后者对应于 $s=1$.

自旋单态是交换反对称的, 自旋三重态是交换对称的.

用 $|m_1, m_2\rangle$ 表示 $|s, m_s\rangle$ (或者反过来), 这就是角动量相加所要讨论的内容, 实际上就是表象的变换.

11.2. 一般情形的角动量相加

考虑两体系统, 或者两个不同类型的自由度, 分别记作 A 和 B. 分别具有角动量 $\mathbf{J}^A$ 和 $\mathbf{J}^B$, 角动量量子数分别是 j_1 和 j_2. 整体的角动量是

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}^A + \mathbf{J}^B$$

或者写为

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \mathbf{J}^B$$

其中 $\mathbb{1}^A$ 和 $\mathbb{1}^B$ 分别是 Hilbert 空间 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上的单位算子.

验证角动量 $\mathbf{J}$ 的分量之间的一些对易关系, 例如 $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$.

将 J^2 用角动量的 z 分量和升降算子表示.

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

$$J_x = J_x^A + J_x^B, \quad J_y = J_y^A + J_y^B, \quad J_z = J_z^A + J_z^B$$

$$J_x = J_x^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes J_x^B, \quad \cdots$$

$$J_x^2 = \left(J_x^A\right)^2 \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \left(J_x^B\right)^2 + 2J_x^A \otimes J_x^B, \quad \cdots$$

$$J^2 = \left(J^A\right)^2 \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \left(J^B\right)^2 + 2\sum_k J_k^A \otimes J_k^B, \quad k = x, y, z$$

用升降算子表示 x 分量和 y 分量,

$$J_x^A = \frac{1}{2}(J_+^A + J_-^A), \quad J_y^A = \frac{1}{2i}(J_+^A - J_-^A)$$

$$J_x^B = \frac{1}{2}(J_+^B + J_-^B), \quad J_y^B = \frac{1}{2i}(J_+^B - J_-^B)$$

接着有下面的关系

$$J_x^A \otimes J_x^B + J_y^A \otimes J_y^B = \frac{1}{2}(J_+^A \otimes J_-^B + J_-^A \otimes J_+^B)$$

J^2 可以表示为

$$J^2 = \left(J^A\right)^2 \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \left(J^B\right)^2 + 2J_z^A \otimes J_z^B + J_+^A \otimes J_-^B + J_-^A \otimes J_+^B$$

基向量的选择

一方面,

- $|j_1, m_1\rangle$ 是 $\left(J^A\right)^2, J_z^A$ 的共同本征向量.
- $|j_2, m_2\rangle$ 是 $\left(J^B\right)^2, J_z^B$ 的共同本征向量.

- $(J^A)^2, (J^B)^2, J_z^A, J_z^B$ 构成一组对易力学量的集合. 共同本征向量是

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

另一方面,

- $J^2, J_z, (J^A)^2, (J^B)^2$ 彼此对易. 它们的共同本征向量

$$|j_1, j_2; j, m\rangle$$

所谓角动量的相加, 就是用 $|m_1, m_2\rangle$ 表示 $|j, m\rangle$. 两个表象之间的联系是酉变换, 这个酉变换的矩阵元就是 Clebsch-Gordan (CG) 系数.

以下将 $\hbar$ 设为 1.

首先考察 m 的取值.

$$J_z = J_z^A + J_z^B$$

$$\langle m_1, m_2 | J_z - J_z^A - J_z^B | j, m\rangle = 0$$

$$m \langle m_1, m_2 | j, m\rangle - m_1 \langle m_1, m_2 | j, m\rangle - m_2 \langle m_1, m_2 | j, m\rangle = 0$$

$$\langle m_1, m_2 | j, m\rangle \text{ 不能为零.}$$

$$\therefore\ m = m_1 + m_2$$

m_1 的取值范围从 $-j_1$ 到 $+j_1$, m_2 的取值范围从 $-j_2$ 到 $+j_2$, 所以 m 的取值范围是

$$m: \ \ j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1,\ j_1 + j_2 - 2,\ \cdots,\ -(j_1 + j_2)$$

根据 m 的这些取值, 可以说:

- 量子数 j 的最大取值可以是 $j_1 + j_2$, 但最小取值不清楚.
- j 能否等于 $j_1 + j_2 - k$ (k 为正整数) 等等值, 也不清楚.
- 对于某个给定的 m, 可以来自于多少个不同的 j?

同一个 m 的值可以来自不同的 m_1 和 m_2 的组合, 于是需要考虑 m 的简并度, 记作 $g_{j_1, j_2}(m)$, 在不至于混淆的情况下, 省略下标 j_1, j_2.

简并度

以 $j_1 = 2$, $j_2 = 1$ 为例, 参考图 10. 已知 $m = m_1 + m_2$, 并且 m 的可能取值是 $\pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$, 容易得到 m 取不同值的时候的简并度.

$$g(j_1 + j_2) = g(m = 3) = 1$$

$$g(j_1 + j_2 - 1) = g(m = 2) = 2$$

$$g(j_1 + j_2 - 2) = g(m = 1) = 3$$

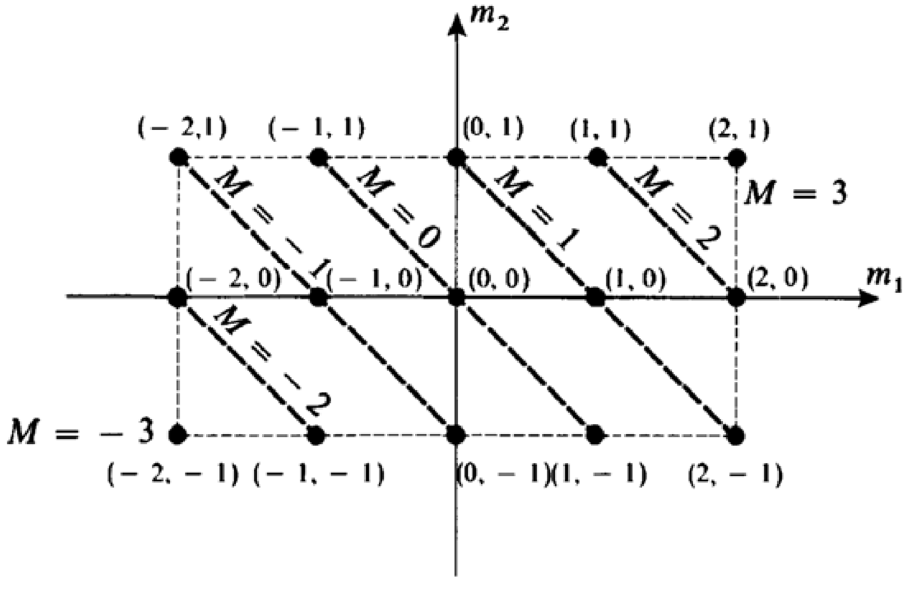


图 10

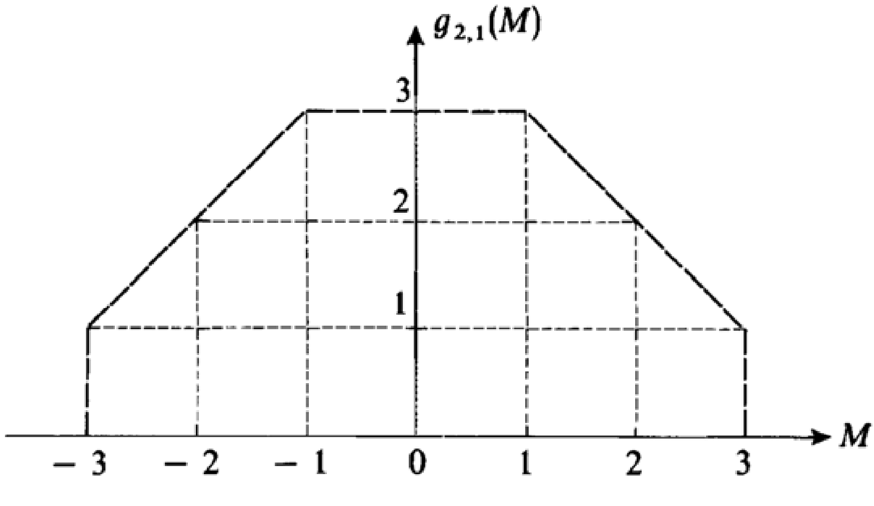
$$g(j_1+j_2-3)=g(m=0)=3$$

$$g(j_1+j_2-4)=g(m=-1)=3$$

$$g(-j_1-j_2+1)=g(m=-2)=2$$

$$g(-j_1-j_2)=g(m=-3)=1$$

$$g(m)=g(-m)$$



推广到一般情形 (不失一般性地设 $j_1 \geqslant j_2$):

$$g(m) = \begin{cases} 0, & \text{如果 } |m| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |m|, & \text{如果 } j_1 + j_2 \geqslant |m| \geqslant j_1 - j_2 \\ 2j_2 + 1, & \text{如果 } j_1 - j_2 \geqslant |m| \geqslant 0 \end{cases}$$

当 $m = j_1 + j_2$ 时, 简并度为 1. 存在子空间 $\mathscr{H}(j = j_1 + j_2)$. 在这个子空间中, 有向量 $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle$, 也有向量 $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle, \cdots$.

当 $m = j_1 + j_2 - 1$ 时, 简并度为 2. 所以, 需要子空间 $\mathscr{H}(j = j_1 + j_2 - 1)$. 两个子空间 $\mathscr{H}(j = j_1 + j_2)$ 和 $\mathscr{H}(j = j_1 + j_2 - 1)$ 分别提供一个向量 $|m = j_1 + j_2 - 1\rangle$, 使得它的简并度等于 2.

对于给定的某个 m, 简并度 $g(m)$ 有哪些来源? 设 $j_1 \geqslant j_2$.

一定来自于那些 $j \geqslant |m|$ 的子空间 $\mathscr{H}(j)$. 子空间 $\mathscr{H}(j)$ 有几个? 个数记作 $N(j)$.

$$g(m) = \sum_{j \geqslant |m|} N(j)$$

可以用 $g(m)$ 表示 $N(j)$,

$$g(m = j) = N(j) + N(j + 1) + N(j + 2) + \cdots$$

$$g(m = j + 1) = N(j + 1) + N(j + 2) + \cdots$$

$$\therefore\ N(j) = g(m = j) - g(m = j + 1) = g(m = -j) - g(m = -j - 1)$$

首先有

$$N(j) = 0, \quad j > j_1 + j_2$$

其次,

$$N(j_1 + j_2) = g(m = j_1 + j_2) = 1$$

接着就有

$$N(j_1 + j_2 - 1) = g(m = j_1 + j_2 - 1) - g(m = j_1 + j_2) = 1$$

一直到

$$N(j_1 - j_2) = g(m = j_1 - j_2) - g(m = j_1 - j_2 + 1) = 1$$

如果 j 再继续减小, $j < j_1 - j_2$, 那么

$$N(j) = g(m = j) - g(m = j + 1) = 0, \quad \text{for } j < j_1 - j_2$$

这是因为, 当 $m = j < j_1 - j_2$, 或者 $m = j + 1 \leqslant j_1 - j_2$ 时, 简并度均为 $2j_2 + 1$, 相减后为零.

至此, 确定了 j 的下限, $j_1 - j_2$, 而且, j 的取值的间隔是 1.

所以, 对于给定的 j_1 和 j_2, j 的可能的取值是

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \cdots, |j_1 - j_2|$$

对应于每一个 j 的 Hilbert 空间 $\mathscr{H}(j)$ 只有一个.

在两种不同的表示中,空间维数都是 $(2j_1+1)(2j_2+1)$.

有如下结论:

$$\boxed{\begin{gathered} m=m_1+m_2 \\ j=j_1+j_2, j_1+j_2-1, j_1+j_2-2, \cdots, |j_1-j_2| \\ \mathscr{H}(j_1,j_2)=\mathscr{H}(j_1+j_2)\oplus\mathscr{H}(j_1+j_2-1)\oplus\cdots\oplus\mathscr{H}(|j_1-j_2|) \end{gathered}}$$

其中 $\mathscr{H}(j_1,j_2)$ 可以理解为一个直积 Hilbert 空间 $\mathscr{H}(j_1)\otimes\mathscr{H}(j_2)$. $\mathscr{H}(j_1)$ 和 $\mathscr{H}(j_2)$ 分别描述两个角动量量子数为 j_1 和 j_2 的量子系统.

下面分别考虑不同的子空间.

CG 系数

在各个子空间中分析 $|j,m\rangle$ 和 $|m_1,m_2\rangle$ 之间的关系,从而得到 CG 系数.

子空间 $\mathscr{H}(j=j_1+j_2)$ 这是 $\mathscr{H}(j_1,j_2)$ 的直和结构中的最大子空间. 在这个子空间中,含有向量 $|j=j_1+j_2, m=j_1+j_1\rangle$,它只出现在这个子空间中. 也就是前面讨论中说的简并度 $g(m=j_1+j_2)=1$. 当 m 取值 j_1+j_2 时,只能对应于 (m_1,m_2) 的一种组合,即 $m_1=m_2=\frac{1}{2}$. 所以有

$$|j_1+j_2, j_1+j_2\rangle=|j_1,j_2;j_1,j_2\rangle$$

这里,将整体相因子选为 1.

使用降算子 J_-,可以得到其它的 $|j_1+j_2,m\rangle$.

$$J_-|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle=\sqrt{2(j_1+j_2)}\,|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle$$

上式是 $|j,m\rangle$ 表象中的形式,注意到

$$J_-=J_-^A+J_-^B, \qquad |j_1+j_2,j_1+j_2\rangle=|j_1,j_2;j_1,j_2\rangle$$

$$\begin{aligned} |j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}J_-|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}(J_-^A+J_-^B)|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(j_1+j_2)}}\left[\sqrt{2j_1}\,|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle+\sqrt{2j_2}\,|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle\right] \end{aligned}$$

于是有

$$|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle=\sqrt{\frac{j_1}{j_+j_2}}\,|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle+\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle \tag{93}$$

在最后的叠加形式中,每一项的 m_1+m_2 都等于 j_1+j_2-1.

接着,可以对 $|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle$ 继续使用降算子,得到 $|j_1+j_2,j_1+j_2-2\rangle$. 于是,子空间 $\mathscr{H}(j=j_1+j_2)$ 中的 $2(j_1+j_2)+1$ 个基向量有依此类推地表示形式.

子空间 $\mathscr{H}(j_1+j_2-1)$ 考虑 $\mathscr{H}(j_1+j_2-1)$,即 $j=j_1+j_2-1$. 在这个子空间中,m 的最大值是 j_1+j_2-1.

$$|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle=\alpha\,|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle+\beta\,|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle\,, \quad |\alpha|^2+|\beta|^2=1$$

应该与 (93) 正交. 将 α 和 β 设为实数, 有

$$\alpha\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}+\beta\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}=0$$

解出 α 和 β, 有

$$|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle=\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle-\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle$$

接着, 利用降算子得到 $|j=j_1+j_2-1,m\rangle$, $m=j_1+j_2-1,j_1+j_2-2,\cdots,-(j_1+j_2-1)$

其它子空间　对于 $\mathcal{H}(j_1+j_2-2)$, m 的最大值等于 j_1+j_2-2, 于是 $|j_1+j_2-2,j_1+j_2-2\rangle$ 是以下三个向量的叠加:

$$|j_1,j_2;j_1,j_2-2\rangle\,,\quad |j_1,j_2;j_1-1,j_2-1\rangle\,,\quad |j_1,j_2;j_1-2,j_2\rangle$$

考虑归一化, 以及与 $|j_1+j_2,j_1+j_2-2\rangle$ 和 $|j_1+j_2-1,j_1+j_2-2\rangle$ 之间的正交, 可以确定叠加形式中的系数.

以上过程最终给出 $|m_1,m_2\rangle$ 和 $|j,m\rangle$ 之间的关系,

$$|j,m\rangle=\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\,\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle$$

其中展开系数 $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j,m\rangle$ 被称为 Clebsch-Gordan 系数.

反过来的关系,

$$|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle=\sum_{j=j_1-j_1}^{j_1+j_2}\sum_{m=-j}^{j}|j,m\rangle\,\langle j,m|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$$

所有的 CG 系数被调整设定为实数.

$$\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j,m\rangle=\langle j,m|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$$

11.3. 特别地, 轨道角动量和自旋角动量的相加

这是轨道角动量和自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的自旋角动量的相加, $\mathbf{L}+\mathbf{S}$.

$\mathcal{H}(\ell,1/2)$ 的维数是 $2(2\ell+1)$. 基向量 $|\ell,1/2;m_\ell,m_s\rangle$ 构成 L^2, S^2, L_z, S_z 的共同本征向量.

轨道角动量和自旋角动量相加后,

$$\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$$

当 $\ell=0$, 只有 $s=1/2$.

一般情形,

$$j=\ell+\frac{1}{2},\quad \ell-\frac{1}{2}$$

先考虑子空间 $\mathcal{H}(j=\ell+1/2)$,

$$\left|\ell+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}\right\rangle=\left|\ell,\frac{1}{2};\ell,+\frac{1}{2}\right\rangle$$

应用降算子

$$\left|\ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}}\left|\ell,\frac{1}{2};\ell-1,+\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}\left|\ell,\frac{1}{2};\ell,-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{3}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}\left\{\sqrt{2\ell-1}\left|\ell,\frac{1}{2};\ell-2,+\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{2}\left|\ell,\frac{1}{2};\ell-1,-\frac{1}{2}\right\rangle\right\}$$

$$\left|\ell+\frac{1}{2},m\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}\left\{\sqrt{\ell+m+\frac{1}{2}}\left|\ell,\frac{1}{2};m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\ell-m+\frac{1}{2}}\left|\ell,\frac{1}{2};m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right\} \tag{94}$$

上式中 m 取值 $\ell+\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2},\cdots,-\ell-\frac{1}{2}$

可以采用递推方法证明上面的 (94) 式. 用降算子作用,

$$\left|\ell+\frac{1}{2},m-1\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{(\ell+m+\frac{1}{2})(\ell-m+\frac{3}{2})}}J_-\left|\ell+\frac{1}{2},m\right\rangle$$

利用 (94) 式, 并将 J_- 写为 $J_-^A+J_-^B$

$$=\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}\left\{\sqrt{\ell+m-\frac{1}{2}}\left|\ell,\frac{1}{2};m-\frac{3}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\ell-m+\frac{3}{2}}\left|\ell,\frac{1}{2};m-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right\}$$

这是将 (94) 式中的 m 改为 $m-1$ 的结果.

类似地, 对于子空间 $\mathcal{H}(j=\ell-1/2)$,

$$\left|\ell-\frac{1}{2},\ell-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}\left\{\sqrt{2\ell}\left|\ell,\frac{1}{2};\ell,-\frac{1}{2}\right\rangle-\left|\ell,\frac{1}{2};\ell-1,+\frac{1}{2}\right\rangle\right\}$$

$$\left|\ell-\frac{1}{2},m\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2\ell+1}}\left\{\sqrt{\ell+m+\frac{1}{2}}\left|\ell,\frac{1}{2};m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\ell-m+\frac{1}{2}}\left|\ell,\frac{1}{2};m-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle\right\}$$

其中 $m=\ell-\frac{1}{2},\cdots,-\ell+\frac{1}{2}$

量子态的表示. 在 $|m_\ell,m_s\rangle$ 表象中,

$$\psi_{\ell,\frac{1}{2};m_\ell,+\frac{1}{2}}(\mathbf{r})=R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\psi_{\ell,\frac{1}{2};m_\ell,-\frac{1}{2}}(\mathbf{r})=R_{k,\ell}(r)Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

在 $|j,m\rangle$ 表象中

$$\psi_{\ell+\frac{1}{2},m}(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}R_{k,\ell}(r)\begin{pmatrix}\sqrt{\ell+m+\frac{1}{2}}Y_{\ell,m-\frac{1}{2}}(\theta,\phi)\\\sqrt{\ell-m+\frac{1}{2}}Y_{\ell,m+\frac{1}{2}}(\theta,\phi)\end{pmatrix}$$

$$\psi_{\ell-\frac{1}{2},m}(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}R_{k,\ell}(r)\begin{pmatrix}-\sqrt{\ell-m+\frac{1}{2}}Y_{\ell,m-\frac{1}{2}}(\theta,\phi)\\\sqrt{\ell+m+\frac{1}{2}}Y_{\ell,m+\frac{1}{2}}(\theta,\phi)\end{pmatrix}$$

12. 标量算子和向量算子

在最简单的意义上, 标量是一个数, 在旋转变换下是不变的. 三维实空间 $\mathbb{R}^3$ 中的向量 $\mathbf{v}$ 在直角坐标系中有三个分量 v_x, v_y, v_z. 在旋转变换 $\mathcal{R} \in \mathrm{SO}(3)$ 的作用下, 向量 $\mathbf{v}$ 变为 $\mathbf{v}'$, 二者之间的关系是

$$v'_j = R_{jk} v_k \tag{95}$$

其中 R_{jk} 是 SO(3) 变换矩阵的矩阵元.

现在要讨论的是标量算子和向量算子, 从类比的角度来说, 需要考虑旋转变换对算子的影响. 但是, 在主动观点中, 不能说算子的变换, 只能说量子态的变换. 于是, 我们用算子的期望值的变化来定义标量算子和向量算子.

12.1. 标量算子

对于任意的量子态 $|\psi\rangle$, 在某个旋转变换下变为 $|\psi'\rangle = U(\mathcal{R})|\psi\rangle$, 如果算子 A 的期望值在变换前后的期望值保持不变, 即

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi'|A|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger(\mathcal{R})AU(\mathcal{R})|\psi\rangle$$

那么, 这个算子就是标量算子. 由于上式对于任意的 $|\psi\rangle$ 都成立, 所以

$$A = U^\dagger(\mathcal{R})AU(\mathcal{R}), \quad [A, U] = 0$$

将变换 $U(\mathcal{R})$ 表示为 $e^{-i\vartheta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar}$ 在无穷小变换下, $\vartheta \to \delta\vartheta$,

$$A = \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\vartheta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}\right) A \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vartheta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$[A, \mathbf{n}\cdot\mathbf{J}] = 0, \ \ \forall\, \mathbf{n}$$

于是, 标量算子与 $\mathbf{J}$ 的三个分量均对易,

$$[A, J_k] = 0, \quad k = x, y, z$$

进而, 标量算子 A 与任意方向上的角动量分量都对易,

$$[A, J_n] = 0$$

于是立即有结论:

$$\text{在 } \mathcal{H}_j \text{ 中}, \quad A \propto \mathbb{1}$$

例如, J^2, $R^2 = X^2 + Y^2 + Z^2$, P^2, $\mathbf{R}\cdot\mathbf{P}$ 都是标量算子.

12.2. 向量算子

参看 Cohen 书卷 Ⅱ $\mathrm{D_X}$.

现在考虑 Hilbert 空间上的算子 $\mathbf{V}$, 它具有向量的形式, 三个分量分别是 V_x, V_y, V_z.

向量算子的定义是: 如果对于任意的量子态 $|\psi\rangle$ 和旋转变换 $U(\mathcal{R})$, 算子 $\mathbf{V}$ 的三个分量的期望值的变化如同 (95) 式所示的普通向量的变化, 即

$$\langle\psi'|V_j|\psi'\rangle = \sum_k R_{jk}\langle\psi|V_k|\psi\rangle, \quad |\psi'\rangle = U(\mathcal{R})|\psi\rangle \tag{96}$$

那么 $\mathbf{V}$ 就是一个向量算子. 上式又可以表示为

$$\langle\psi|U^\dagger(\mathcal{R})V_jU(\mathcal{R})|\psi\rangle = \sum_k R_{jk}\langle\psi|V_k|\psi\rangle$$

又因为上式对任意的 $|\psi\rangle$ 都成立, 所以有

$$U^\dagger(\mathcal{R})V_jU(\mathcal{R}) = \sum_k R_{jk}V_k \tag{97}$$

12.3. Wigner-Eckart 定理

Wigner-Eckart 定理

简单地说, 在子空间 $\mathcal{H}_j$ 中, 两个向量算子 $\mathbf{V}$ 和 $\mathbf{V}'$ 满足关系 $\mathbf{V} \propto \mathbf{V}'$.
实际上就是分析向量算子在 $\mathcal{H}_j$ 中的矩阵元.

对易关系

考虑无穷小变换. 在无穷小变换 $U(\mathbf{n},\delta\vartheta)$ 下, (97) 式的左端是

$$V_j + \frac{i}{\hbar}\delta\vartheta[\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}, V_j] \tag{98}$$

至于 (97) 式的右端, 先考虑绕 z 轴的无穷小旋转, 结果是

$$\begin{pmatrix} 1 & -\delta\vartheta & 0 \\ \delta\vartheta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_x - \delta\vartheta V_y \\ V_y + \delta\vartheta V_x \\ V_z \end{pmatrix}$$

将 (97) 式左右两端结合在一起, 给出

$$[J_z, V_x] = i\hbar V_y, \quad [J_z, V_y] = -i\hbar V_x, \quad [J_z, V_z] = 0$$

类似地, 可以得到其它对易关系.

考虑向量算子 $\mathbf{V} = (V_x, V_y, V_z)$ 的代数结构.

$$[J_x, V_x] = 0, \quad [J_x, V_y] = i\hbar V_z, \quad [J_x, V_z] = -i\hbar V_y$$

定义

$$V_\pm = V_x \pm iV_y, \quad J_\pm = J_x \pm iJ_y$$

可以得到若干对易关系:

$$[J_x, V_\pm] = \mp\hbar V_z, \quad [J_y, V_\pm] = -i\hbar V_z, \quad [J_z, V_\pm] = \pm\hbar V_\pm$$

$$[J_+, V_+] = 0, \quad [J_+, V_-] = 2\hbar V_z, \quad [J_-, V_+] = -2\hbar V_z, \quad [J_-, V_-] = 0$$

V_z 的矩阵元

考虑 $\mathbf{V}$ 的矩阵元. 基向量是 $|j,m\rangle$. 我们将看到, 由于 $\mathbf{V}$ 是向量算子, 它的分量算子的矩阵元大多为零.

首先计算 V_z 的矩阵元, $\langle j,m|V_z|j',m'\rangle=?$

$$[J_z,V_z]=0$$

$$0=\langle j,m|[J_z,V_z]|j',m'\rangle=(m-m')\hbar\,\langle j,m|V_z|j',m'\rangle$$

$$\therefore\ \text{当 } m\neq m' \text{ 时},\ \langle j,m|V_z|j',m'\rangle=0$$

V_z 仅仅涉及量子数 m, 注意, 上式只是表明, 当 $m\neq m'$ 时, V_z 的矩阵元为零, 并未要求 $j\neq j'$. 当然, 对于角动量 J_z, 当 $j\neq j'$ 时, 矩阵元为零. $|j,m\rangle$ 是 J_z 的本征向量, 但不一定是 V_z 的本征向量.

V_x, V_y 的矩阵元

为了得到 V_x 和 V_y 的矩阵元, 考虑 $V_\pm$ 的矩阵元.

$$J_zV_\pm=V_\pm J_z\pm\hbar V_\pm$$

$$J_zV_\pm\,|j,m\rangle=V_\pm J_z\,|j,m\rangle\pm\hbar V_\pm\,|j,m\rangle=(m\pm1)\hbar V_\pm\,|j,m\rangle$$

这表明, $V_\pm\,|j,m\rangle$ 是 J_z 的本征向量, 对应的的本征值是 $(m\pm1)\hbar$. 但是, 不能由此得到这样的结论: $V_\pm\,|j,m\rangle$ 正比于 $|j,m\pm1\rangle$, 正确的说法是

$$V_\pm\,|j,m\rangle=\sum_{j'}c_{j'}\,\big|j',m\pm1\big\rangle$$

只有在 $[V_\pm,J^2]=0$ 的条件下, 才能不涉及对 j' 的求和, 就像 $J_\pm$ 那样.

$V_\pm$ 的矩阵元

$$\langle j',m'|V_\pm|j,m\rangle=\sum_{j''}c_{j''}\,\langle j',m'|j'',m\pm1\rangle=c_{j'}\delta_{m',m\pm1}$$

$$m'\neq m\pm1\Longrightarrow\langle j',m'|V_\pm|j,m\rangle=0$$

换句话说, 如果我们希望 $\langle m'|V_+|m\rangle$ 有非零的值, 那么 $m'-m=+1$; 如果希望 $\langle m'|V_-|m\rangle$ 有非零的值, 那么 $m'-m=-1$.

$m'-m=+1$ 是 $\langle m'|V_+|m\rangle\neq0$ 的必要但非充分条件. $m'-m=-1$ 是 $\langle m'|V_-|m\rangle\neq0$ 的必要但非充分条件.

子空间 $\mathcal{H}_j$

现在知道,

$$[J_+,V_+]=0,\quad [J_+,V_-]=2\hbar V_z,\quad [J_-,V_+]=-2\hbar V_z,\quad [J_-,V_-]=0$$

$$\langle j,m+2|J_+V_+|j,m\rangle=\langle j,m+2|V_+J_+|j,m\rangle$$

$$\langle j,m+2|J_+\Bigg(\sum_{j',m'}\big|j',m'\big\rangle\!\big\langle j',m'\big|\Bigg)V_+|j,m\rangle=\langle j,m+2|V_+\Bigg(\sum_{j',m'}\big|j',m'\big\rangle\!\big\langle j',m'\big|\Bigg)J_+|j,m\rangle$$

$$V_+\,|j,m\rangle=\sum_{j''}c_{j''}\,\big|j'',m+1\big\rangle$$

$$\therefore\ \ \langle j,m+2|J_+|j,m+1\rangle\ \langle j,m+1|V_+|j,m\rangle=\langle j,m+2|V_+|j,m+1\rangle\ \langle j,m+1|_+|j,m\rangle$$

$$\frac{\langle j,m+1|V_+|j,m\rangle}{\langle j,m+1|J_+|j,m\rangle} = \frac{\langle j,m+2|V_+|j,m+1\rangle}{\langle j,m+2|J_+|j,m+1\rangle}, \quad -j \leqslant m \leqslant j-2$$

有递推关系

$$\begin{aligned}\frac{\langle j,-j+1|V_+|j,-j\rangle}{\langle j,-j+1|J_+|j,-j\rangle} &= \frac{\langle j,-j+2|V_+|j,-j+1\rangle}{\langle j,-j+2|J_+|j,-j+1\rangle} = \cdots \\ &= \frac{\langle j,m+1|V_+|j,m\rangle}{\langle j,m+1|J_+|j,m\rangle} = \cdots \\ &= \frac{\langle j,j|V_+|j,j-1\rangle}{\langle j,j|J_+|j,j-1\rangle} = \alpha_+(j)\end{aligned}$$

注意到当 $m-m' \neq +1$ 的时候, $\langle j,m|V_+|j,m'\rangle$ 和 $\langle j,m|J_+|j,m'\rangle$ 均为零, 可以将 $\langle j,m|V_+|j,m'\rangle$ 表示为

$$\langle j,m|V_+|j,m'\rangle = \alpha_+(j)\,\langle j,m|J_+|j,m'\rangle \tag{99}$$

这说明, 在 $\mathscr{H}_j$ 中, V_+ 的所有矩阵元都正比于 J_+ 的矩阵元.

类似地, 有

$$\langle j,m|V_-|j,m'\rangle = \alpha_-(j)\,\langle j,m|J_-|j,m'\rangle$$

下面关注 $\alpha_+(j)$ 和 $\alpha_-(j)$, 将会看到, 它们是相等的. 考虑 V_z 的矩阵元.

$$[J_-,V_+] = -2\hbar V_z$$

$$\begin{aligned}&-2\hbar\,\langle j,m|V_z|j,m\rangle = \langle j,m|(J_-V_+ - V_+J_-)|j,m\rangle \\ =&\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\langle j,m+1|V_+|j,m\rangle - \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\langle j,m|V_+|j,m-1\rangle\end{aligned}$$

利用 (99), 有

$$\begin{aligned}&\langle j,m|V_z|j,m\rangle \\ =&-\frac{1}{2}\alpha_+(j)\Big[\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\langle j,m+1|J_+|j,m\rangle \\ &\qquad - \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\langle j,m|J_+|j,m-1\rangle\Big] \\ =&-\frac{\hbar}{2}\alpha_+(j)\Big[j(j+1)-m(m+1)-j(j+1)+m(m-1)\Big] \\ =&m\hbar\alpha_+(j)\end{aligned}$$

类似地, 利用 $[J_+,V_-] = 2\hbar V_z$, 得到

$$\langle j,m|V_z|j,m\rangle = m\hbar\alpha_-(j)$$

所以

$$\alpha_+(j) = \alpha_-(j) = \alpha(j)$$

以上考虑的是 V_z 的对角矩阵元, 而此前已经知道, 它的非对角矩阵元一律为零, 所以

$$\langle j,m|V_z|j,m'\rangle = \alpha(j)\,\langle j,m|J_z|j,m'\rangle$$

至此, 得到 $V_{x,y,z}$ 的矩阵元与 $J_{x,y,z}$ 的矩阵元之间的联系, 可以总结为

$$\langle j,m|\mathbf{V}|j,m'\rangle = \alpha(j)\,\langle j,m|\mathbf{J}|j,m'\rangle \tag{100}$$

这是在子空间 $\mathscr{H}_j$ 中的结论.

用 Π_j 表示子空间 $\mathscr{H}_j$ 上的投影算子,

$$\Pi_j = \sum_m |j,m\rangle\langle j,m|$$

把 (100) 写出更一般的形式,

$$\Pi_j \mathbf{V} \Pi_j = \alpha(j) \Pi_j \mathbf{J} \Pi_j$$

而 Π_j 与 $\mathbf{J}$ 是对易的, 这是因为

$$[J_z, \Pi_j]\,|j,m\rangle = 0, \quad [J_\pm, \Pi_j]\,|j,m\rangle = 0$$

又因为 $\Pi_j^2 = \Pi_j$, 所以

$$\Pi_j \mathbf{V} \Pi_j = \alpha(j) \mathbf{J} \Pi_j = \alpha(j) \Pi_j \mathbf{J}$$

现在来计算 $\alpha(j)$. 考虑 $\mathbf{J}\cdot\mathbf{V}$. 该算子在不变子空间 $\mathscr{H}_j$ 中的部分是 $\Pi_j(\mathbf{J}\cdot\mathbf{V})\Pi_j$,

$$\begin{aligned}
\Pi_j(\mathbf{J}\cdot\mathbf{V})\Pi_j &= \mathbf{J}\cdot\left[\Pi_j \mathbf{V} \Pi_j\right] \\
&= \alpha(j) J^2 \Pi_j \\
&= \alpha_j\, j(j+1)\hbar^2 \Pi_j
\end{aligned}$$

这表明, 当我们把 $\mathbf{J}\cdot\mathbf{V}$ 限制在子空间 $\mathscr{H}_j$ 上的时候, 标量算子 $\mathbf{J}\cdot\mathbf{V}$ 就如同是一个单位算子 $\times\alpha(j)j(j+1)\hbar^2$.

设 $|\psi_j\rangle$ 是 $\mathscr{H}_j$ 中的任意向量, 则期望值

$$\langle \mathbf{J}\cdot\mathbf{V}\rangle = \langle \psi_j|\mathbf{J}\cdot\mathbf{V}|\psi_j\rangle = \alpha(j)\, j(j+1)\hbar^2$$

这样就得到了比例常数 $\alpha(j)$, 进而将 $\mathbf{V}$ 表示为

$$\mathbf{V} = \frac{\langle \mathbf{J}\cdot\mathbf{V}\rangle_j}{\langle J^2\rangle_j}\mathbf{J} = \frac{\langle \mathbf{J}\cdot\mathbf{V}\rangle_j}{j(j+1)\hbar^2}\mathbf{J} \tag{101}$$

再次强调, 这一结论是针对于不变子空间 $\mathscr{H}_j$ 而言的.

关于 (101) 式的应用, 参看 Cohen 书卷 Ⅱ $\mathrm{D_X}$.

References

[1] V. Bargmann, *Journal of Mathematical Physics* **5**, 862 (1964).

[2] R. Gilmore, *Lie Groups, Physics, and Geometry*, Cambridge University Press, 2008.

[3] N. D. Mermin, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 803 (1993).

[4] A. Peres, *J. Phys. A* **24**, L175 (1991).

[5] L. Hardy, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1665 (1993).

[6] N. D. Mermin, *Physics Today* **43**, 9 (1990).

[7] N. D. Mermin, *American Journal of Physics* **58**, 731 (1990).

[8] N. D. Mermin, *Physics Today* **47**, 9 (1994).

[9] A. Cabello, *Phys. Rev. A* **65**, 032108 (2002).

[10] P. G. Kwiat and L. Hardy, *American Journal of Physics* **68**, 33 (2000).

[11] S. Yu and C. H. Oh, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 030402 (2012).

[12] N. Brunner, D. Cavalcanti, S. Pironio, V. Scarani, and S. Wehner, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 419 (2014).