

量子力学角动量理论之缺陷与修正

汪克林¹ 曹则贤^{2,†}

(1 中国科学技术大学近代物理系 合肥 230026)

(2 中国科学院物理研究所 北京 100190)

2025-04-12 收到

† email: zxcao@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20250505

CSTR: 32040.14.wl20250505

The flaw of angular momentum theory in quantum mechanics and its amendment

WANG Ke-Lin¹ CAO Ze-Xian^{2,†}

(1 Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

(2 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

摘 要 角动量理论是量子力学的重要内容。基于角动量分量同三维转动生成元具有同样的基本对易关系的考量, 则由基本对易关系就得到了分立的本征值谱 $(J^2, J_z) \sim (j(j+1), m)$ 。又由于球坐标系下角动量平方 J^2 与动能算符的角部分相同, 角动量就这样被纳入了波力学方程, 由此解得的定态波函数是 (H, J^2, J_z) 的共同本征函数。然而, 不同于波函数理论体系, 在后来发展的算符—态矢理论体系中, 态矢携带关于系统的全部信息。将角动量用必要的三组独立产生—湮灭算符表示, 并在算符—态矢理论体系中考察角动量算符, 会发现定态不必然还是 (H, J^2, J_z) 的共同本征态。以在球坐标系和直角坐标系下皆可分离变量的严格可解三维各向同性谐振子为依据, 作者详细研究了定态对应的态矢子空间中的 (H, J^2, J_z) 本征值谱问题。在给定总粒子数 n 的情形下, 即限制在特定的 n 所决定的子空间中, 算符—态矢表示给出的角动量分量 J_z 具有分立的本征值而角动量的本征值却可以是连续变化的, 而这正反映出角动量算符 $\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 的根本性质。当角动量分量本征值(以 $\hbar$ 为单位)接近总粒子数 n 时, 基于态矢的计算与基于波函数的计算其结果是一致的, 原因是 n 一定的定态被限制在态矢空间中的一个由等能面所定义的子空间中了。认识到既有的量子力学角动量理论的一些缺陷, 则此前涉及轨道角动量之物理效应的相关表述都有修正的必要。

关键词 角动量, 轨道角动量, 转动生成元, 基本对易关系, 拉普拉斯算符, 本征值谱, 共同本征态, 波函数, 态矢量, 态矢空间, 三维谐振子

Abstract The angular momentum theory is an important constituent of quantum mechanics. The discrete eigenvalue spectrum of the angular momentum $(J^2, J_z) \sim (j(j+1), m)$ is determined through the three generators of rotation, as they share the same fundamental commutation relation. Moreover, since under spherical coordinate system J^2 is identical to the angular part of the Laplacian operator, the angular momentum is thus incorporated into the wave equation, and the wavefunctions for stationary states are believed to be the common eigenfunctions of (H, J^2, J_z) . We notice that unlike wave functions, the state vectors in ket space are expected to carry out all information about the system concerned. When the angular momentum is represented with three sets of independent creation-annihilation operators as it

should be, and its action upon the state vectors is scrutinized, it is found that the stationary states are not necessarily the common eigenvectors of $(\mathbf{H}, \mathbf{J}^2, J_z)$. By taking the advantage of being separable under both the spherical coordinates and the Cartesian coordinates, the eigenvalue spectrum of $(\mathbf{H}, \mathbf{J}^2, J_z)$ for the stationary states of the three dimensional isotropic harmonic oscillator is carefully investigated. For a given stationary state, i.e., with a fixed particle number n which also denotes the energy eigenvalue, while J_z has a discrete eigenvalue, the eigenvalue $j(j+1)$ can be continuous, thus revealing the true nature of the angular momentum operator $\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. For a fixed n , when the m values are sufficiently large, the resulting $j(j+1)$ is the same as that obtained in terms of eigenfunctions, resulting from the fact that now the stationary states are restricted to a subspace defined by an isoenergetic surface in ket space. Some formulations for angular momentum-related problems should be accordingly readdressed.

Keywords angular momentum, orbital angular momentum, generator of rotation, fundamental commutation relation, Laplacian operator, eigenvalue spectrum, common eigenvector, wave function, state vector, ket space, three dimensional isotropic harmonic oscillator

1 量子力学的角动量理论

1.1 有心力场下的角动量

关于三维空间中角动量的量子力学处理, 目前已成共识, 其在流行的量子力学文献中的具体论述都是相同的^[1-4]。此处依据文献[3, 4]将相关内容照录如下, 作为后续讨论的依据。

处于中心力场下的物理系统, 其哈密顿量为 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(r)$, 对应的波力学定态方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (1)$$

采用球坐标系, 上式中的拉普拉斯算符 ∇^2 可表示为

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (2a)$$

考虑到轨道角动量算符按定义为 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, 在直角坐标系下的表达式为

$$\begin{cases} L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ L_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{cases} \quad (3)$$

相应地, 在球坐标下的表达式为

$$\begin{cases} L_x = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ L_y = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{cases} \quad (4)$$

故角动量平方算符为

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (5)$$

此与拉普拉斯算符 ∇^2 的角部分同, 故而拉普拉斯算符可改写成如下形式:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}. \quad (2b)$$

轨道角动量算符 $\mathbf{L}$ 就这样出现在了哈密顿量 $\mathbf{H}$ 中。确切地说, 是轨道角动量平方算符 L^2 通过拉普拉斯算符(动能算符)的角部分被纳入了哈密顿量 $\mathbf{H}$

中。注意到这个事实对于理解量子力学的角动量理论很重要。

对于量子力学的开普勒问题, $V = -\frac{e^2}{r}$, 能量本征值和波函数分别为

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (7)$$

其中关于角度的函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 是球谐函数。

1.2 角动量算符玻色化

现在用符号 $\mathbf{J}$ 表示角动量算符, J_x, J_y, J_z 表示其分量, 满足基本对易关系:

$$\begin{cases} [J_x, J_y] = i\hbar J_z, \\ [J_y, J_z] = i\hbar J_x, \\ [J_z, J_x] = i\hbar J_y. \end{cases} \quad (8)$$

角动量各分量同算符 $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$ 之间有如下对易关系:

$$[\mathbf{J}^2, J_x] = [\mathbf{J}^2, J_y] = [\mathbf{J}^2, J_z] = 0, \quad (9)$$

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}, \quad (10)$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z, \quad (11)$$

$$\{J_+, J_-\} = 2(\mathbf{J}^2 - J_z^2), \quad (12)$$

其中 $\{, \}$ 表示反对易关系。

考虑到角动量算符对易式的结果仍是角动量算符以及由此而来的复杂性, 后来人们先后提出了两个将角动量算符玻色化的方案。

(1) Holstein—Primakov 变换

将角动量算符用一组玻色算符替换如下^[5]:

$$\begin{cases} J_+ = (\sqrt{2j - a^\dagger a}) a, \\ J_- = a^\dagger (\sqrt{2j - a^\dagger a}), \\ J_z = j - a^\dagger a. \end{cases} \quad (13)$$

此处的算符 $a, a^\dagger$ 之间的对易关系为

$$[a, a^\dagger] = 1, [a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0. \quad (14)$$

可证(13)式中的 J_+, J_-, J_z 算符满足相应的角动量算符对易关系。

(2) Schwinger 双振子理论

鉴于 Holstein—Primakov 变换中有 $a^\dagger a$ 出现在根号下的缺点, Julian Schwinger 用两组独立的玻

色算符 $(a, a^\dagger), (b, b^\dagger)$ 表示角动量算符。记:

$$\begin{cases} J_x = \frac{1}{2} (a^\dagger b + b^\dagger a), \\ J_y = \frac{1}{2i} (a^\dagger b - b^\dagger a), \\ J_z = \frac{1}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b). \end{cases} \quad (15)$$

可证当 $(a, a^\dagger)$ 与 $(b, b^\dagger)$ 各自满足对易关系(14)式时, 式(15)中的 J_x, J_y, J_z 算符满足角动量算符的基本对易关系。此理论源于约当 1935 年的思想^[6], 1952 年 Julian Schwinger 将其具体实现^[7], 故又称 Jordan—Schwinger Map。

上述将角动量算符玻色化的实践让我们注意到, 与角动量分量满足同样基本对易关系的一组算符 (J_x, J_y, J_z) 是否严格地体现角动量的物理是个有待商榷的问题。

1.3 角动量算符的本征值谱

如果假定角动量算符具有分立谱的本征值及相应的本征态矢, 那么是否可以解出具体的本征值与本征态矢? 注意, 这里要强调一下我们只是假定其特征值为分立谱, 关于这一问题后面会加以讨论。

假定 $\mathbf{J}^2, J_z$ 有如下的本征态矢与本征值:

$$\begin{cases} \mathbf{J}^2 |j, m\rangle = \lambda \hbar^2 |j, m\rangle, \\ J_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle. \end{cases} \quad (16)$$

则仅由角动量算符的基本对易关系可得出^[3]:

$$\begin{cases} \lambda = j(j+1), \\ m = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \end{cases} \quad (17)$$

考虑到 $-j, -j+1, \dots, j-1, j$ 的数目为整数, 故 j 值只能为整数或半整数。注意, 上述关于 $\mathbf{J}^2, J_z$ 本征态矢与本征值的内容只依赖于角动量的基本对易关系, 与量子力学的概念无关。1925 年, 玻恩—海森堡—约当得出了矩阵力学版的角动量理论^[8], 其中根据对易关系得到的对角化的 M_z 分量之矩阵元表示形式为 $M_m = \frac{\hbar}{2\pi} (n_1 + C)$, $n_1 = \dots -2, -1, 0, 1, 2, \dots$, 不过对常数 C 没有进一步的说明。此理论由海森堡—约当应用于反常塞曼效应^[9]。

我们感到奇怪的是，在量子力学中具有连续谱的 $\mathbf{x}, \mathbf{p}$ 算符，怎么其组合 $\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ (前面记为 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$)就是完全分立谱了呢？再者，就物理量的维度层级来看， $\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 的层级要高于 $\mathbf{p}$ ，怎么算符 $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$ 就成了算符 $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$ 的角部分了呢？

1.4 角动量与转动生成元

在物理学中有将对称性与守恒律相联系的重要定理，即诺特定理。诺特定理来自拉格朗日力学，与系统的微观或者宏观无关。如果系统具有某种连续对称性，即在一定的变换下系统的作用量积分不变，则存在与变换相对应的守恒量。三维空间的转动有三个生成元，三个生成元之间的对易关系与角动量之间的对易关系相同，故而这两者被当作同一对象对待。在已有的量子力学文献中随处可看到这样的论断。然而，我们认为从物理角度考虑的话，这两者的根源明显是不同的。将两者混为一谈的唯一根据是相同的对易关系，但据此就认为两者乃是一回事儿恐怕有点过于草率。特别地，空间转动变换的对称性适用于所有系统，与微观物理体系的本质，比如自旋这种内禀自由度，本没有什么关系。在文献[3]的161页上，樱井纯似乎注意到了三维空间转动生成元与角动量两者未必能完全划等号，因此写道：“我们强调一下本书中我们不把角动量算符定义为 $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 。这一点很重要，因为自旋角动量——一般公式也适用于其上——与 x_i, p_j 无关。换句话说，在经典力学里可以证明定义为 $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 的角动量是转动生成元；与此相对，在量子力学中我们这样定义 $\mathbf{J}$ ，使得(作用于态矢空间上的——本文作者注)无穷小转动算符从公式 $D(\hat{n}, d\phi) = 1 - i\left(\frac{\hat{n} \cdot \mathbf{J}}{\hbar}\right)d\phi$ 得到”。基于多年的量子理论教学与研究经历我们也感到疑惑，三维空间转动生成元与角动量两者完全是一回事儿吗？如果不是，那么不同之处在哪里，而存在着不同又意味着什么？

2 量子力学的角动量理论成功的一面

在对量子力学的角动量理论提出质疑之前，先讨论一下其成功的一面。角动量理论是量子理论的重要组成部分，包括前述的如何得到分立本征谱的角动量平方算符与角动量某一分量算符之共同本征态，由此出发进一步讨论角动量的耦合等内容。相关理论对与自旋有关的物理现象——包括光谱与磁性质——的解释有重要的意义。这是量子角动量理论成功的地方。

不过，我们注意到角动量概念确有一个未引起重视的含混之处。被统称为角动量的物理量其实有两个不同的对象，其一是属于外部自由度的、由位置与动量复合而成的轨道角动量，另一个则是属于内禀自由度的自旋，而自旋的物理根源是不清楚的。电子的自旋之所以被当成角动量，是基于对物质磁性的解释^[10]、对反常塞曼效应的解释^[9]、对 Stern—Gerlach 实验^[11]的解释等理论(借助磁矩的概念)同角动量相类比最终形成的。自旋是被硬当作角动量引入的一个内禀物理量。自然而然地，自旋被要求满足与角动量以及三维空间转动生成元相同的对易关系。所幸，(电子)自旋的对易关系与系列(sequential) Stern—Gerlach 实验^[12]中银原子束的分裂行为相吻合。

不妨这样来表述已有的角动量理论。由于已有理论的出发点就是空间转动群的三个生成元之间的对易关系(李代数)，因此更确切地说，所谓的角动量理论实质上是关于空间转动群的物理与数学。从变换群理论来看，群有各种各样的表示，可以想象总有一些物理对象，其同三维空间转动群的生成元具有同样的对易关系。至于自旋，虽然它的物理实质尚不清楚，但有一点是明确的，自旋属于内部自由度，应该与作为外部自由度的空间转动不相关。也就是说，空间转动下自旋理应变不变。已知(电子)自旋的本征值 $j = 1/2$ (单位为 $\hbar$)是一个分立的有限值；进一步地，一个由许多自旋组成的集体，其总自旋也取有限分立的 j 值，因此是一个完全符合转动群要求的表示。迄今关

于自旋的讨论都符合转动变换群的表示,有具有分立谱的本征态矢集这样的理论表述。这样的关于自旋角动量的表述是成功的。

3 对量子角动量理论的质疑

如前所述,已有的角动量理论有其成功的一面,但我们也看到了有两点值得质疑的地方。其一是至今没有具体的算符—态矢框架下的轨道角动量表示形式,以及它对状态矢量如何作用。角动量的三个分量算符之间的对易关系与三个转动生成元之间的对易关系相同,因此它是转动群的一个表示,但这并不表明它一定是那种有分立谱本征值的表示。第二点,量子力学教科书中在讲述求解有心力场下的波函数时,关于拉普拉斯算符 ∇^2 的角部分之波函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 恰巧使得 L^2, L_z 具有本征值为 $\lambda = l(l+1), m = -l, \dots, l$ 这样的性质,于是量子力学便断言那就是(原子中电子的)轨道角动量。我们会发现,这种结论是量子力学将波函数同状态矢量直接等同所造成的。下面我们将用严格可解的三维各向同性谐振子(下面简称三维谐振子)为例检验量子理论中关于轨道角动量部分的认识是否正确。

4 三维谐振子视角下的角动量理论

4.1 三维谐振子问题的两种解法

三维谐振子的本征值问题是在球坐标系和直角坐标系下都可分离变量的问题。严格可解的三维谐振子模型为检验已有的轨道角动量理论是否有瑕疵提供了可靠的依据。三维谐振子系统的中心作用势为 $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$,定态波方程在球坐标系下的径向部分为

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E - \mu\omega^2 r^2) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right]R = 0, \quad (18)$$

记 $\chi = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$, (18)式改写为

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[\chi^2 - \alpha^4 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right]R = 0. \quad (19)$$

经过一番推导(略,参见[4]),计算得到能量本征值为

$$E_{n_r, l} = \left(2n_r + l + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega, \quad (20)$$

其中的量子数 $n_r, l = 0, 1, 2, \dots$, 相应的 (H, L^2, L_z) 的共同本征函数为

$$\begin{aligned} \Psi_{n_r, l, m} &= R_{n_r, l}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \\ R_{n_r, l}(r) &\sim r^l e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} F\left(-n_r, l + \frac{3}{2}, \alpha^2 r^2\right), \end{aligned} \quad (21)$$

在直角坐标系下,三维谐振子系统的哈密顿量可写成如下形式,

$$H = -\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} = H_x + H_y + H_z, \quad (22)$$

利用熟知的一维谐振子解可立即得到:

$$\begin{aligned} E_{n_1, n_2, n_3} &= \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \\ &\quad \left(n_3 + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega = \left(N + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega. \end{aligned} \quad (23)$$

其中 $N = n_1 + n_2 + n_3 = 0, 1, 2, \dots$, 相应的波函数为

$$\Phi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \phi_{n_1}(x)\phi_{n_2}(y)\phi_{n_3}(z), \quad (24)$$

其中的 $\phi_n(x)$ 是一维谐振子的波函数。

我们看到,两种解法对应系统的态矢空间中选择了两种不同的基矢量,前者是 (H, L^2, L_z) 的共同本征矢量,后者则是 (H_x, H_y, H_z) 的共同本征矢量,两者通过一个么正变换相联系。例如, $N=1$ 的能级上有三个态,分别为 $\Psi_{nlm} \rightarrow \psi_{011}, \psi_{010}, \psi_{01\bar{1}}$ 和 $\Phi_{n_1, n_2, n_3} \rightarrow \phi_{100}, \phi_{010}, \phi_{001}$, 可以验证它们之间有关系:

$$\begin{cases} \psi_{010} = \phi_{001}, \\ \psi_{0,1,\pm 1} = \frac{\pm 1}{\sqrt{2}} (\phi_{100} \pm i\phi_{010}). \end{cases} \quad (25)$$

此可以为检验轨道角动量理论是否有问题的依据,并据此作深入分析的物理基础。

4.2 轨道角动量算符

现在给出角动量算符在算符—态矢体系中的显式表达,加上有严格可解的三维谐振子模型为例,可以回答前述对轨道角动量量子理论的质疑。

本文作者在最近的三篇文章中深入讨论了量子力学的表示理论^[13-15], 明确指出量子力学中的状态矢量应当是无量纲的。混淆状态矢量和波函数这两个概念会带来一些问题, 而这可能也体现在角动量理论上。

态矢空间中的态矢可由无量纲算符 $(a, a^\dagger)$ 作用到真空态上构成。在一维情形下, 物理量算符 $(\hat{x}, \hat{p})$ 可以由算符 $(a, a^\dagger)$ 通过如下变换表示:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta}} (a + a^\dagger), \quad \hat{p}_x = i\sqrt{\frac{\hbar\Delta}{2}} (a^\dagger - a). \quad (26)$$

$(a, a^\dagger)$ 之间的对易关系保证算符 $(\hat{x}, \hat{p})$ 要满足的量子化条件, 其中的 Δ 为参数(在一维谐振子问题中, $\Delta = m\omega$)。

在三维情形下, 物理量算符 $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ 可以由三组独立的 $(a, a^\dagger)$ 算符表示:

$$\begin{cases} \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta}} (a_1 + a_1^\dagger), & \hat{p}_x = i\sqrt{\frac{\hbar\Delta}{2}} (a_1^\dagger - a_1), \\ \hat{y} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta}} (a_2 + a_2^\dagger), & \hat{p}_y = i\sqrt{\frac{\hbar\Delta}{2}} (a_2^\dagger - a_2), \\ \hat{z} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\Delta}} (a_3 + a_3^\dagger), & \hat{p}_z = i\sqrt{\frac{\hbar\Delta}{2}} (a_3^\dagger - a_3). \end{cases} \quad (27)$$

在此基础上, 由定义 $\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 可得:

$$\begin{cases} \mathbf{J}_x = i\hbar(a_2 a_3^\dagger - a_2^\dagger a_3), \\ \mathbf{J}_y = i\hbar(a_3 a_1^\dagger - a_3^\dagger a_1), \\ \mathbf{J}_z = i\hbar(a_1 a_2^\dagger - a_1^\dagger a_2). \end{cases} \quad (28)$$

易证(28)式满足角动量的基本对易式。

此前有文献[16]将三维谐振子的哈密顿量用三组产生-湮灭算符表示, 但未论及角动量问题。

4.3 用三维谐振子检验轨道角动量理论

首先要指出一点, 三维谐振子的能量本征态是 $|n_1, n_2, n_3\rangle$, 能量本征值为 $(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2})\hbar\omega$ 。角动量算符是作用到态矢 $|n_1, n_2, n_3\rangle$ 上的, 而不是作用到波函数上的。根据文献[4]中的结论, 三维谐振子具有能量算符 H 、角动量平方算符 J^2 及角动量分量算符 J_z 的共同本征态之正确的含义应是 $|n_1, n_2, n_3\rangle$ 为 (H, J^2, J_z) 的共同本征态矢。根据(28)式可以得到 J^2 算符的表达式为

$$J^2 = -\hbar^2 \{ (a_1^\dagger)^2 (a_2^2 + a_3^2) + (a_2^\dagger)^2 (a_3^2 + a_1^2) + (a_3^\dagger)^2 (a_1^2 + a_2^2) - 2\hat{n}_2 \hat{n}_3 - 2\hat{n}_3 \hat{n}_1 - 2\hat{n}_1 \hat{n}_2 - 2\hat{n}_1 - 2\hat{n}_2 - 2\hat{n}_3 \}, \quad (29)$$

其中 $\hat{n} = a^\dagger a$ 为粒子数算符。那么, $|n_1, n_2, n_3\rangle$ 除了是 H 的本征态矢以外, 也必然还是 J^2, J_z 的共同本征态矢吗?

容易证明, $[H, \hat{n}] = 0$, $\hat{n} = \hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{n}_3$ 是总量子数算符, 即总量子数是一守恒量。一个定态应是由总量子数 n 一定的态矢子空间中的态矢 $|n_1, n_2, n_3\rangle$ 所构成, 这就为解析计算提供了便利。下面用几个能量较低的状态来说明这一点。

(i) $n = 0$ 只有一个态 $|0, 0, 0\rangle$, 显然在这个子空间中有:

$$J^2|0, 0, 0\rangle = 0, \quad J_z|0, 0, 0\rangle = 0. \quad (30)$$

(ii) $n = 1$ 的子空间由 $|1, 0, 0\rangle, |0, 1, 0\rangle, |0, 0, 1\rangle$ 所张成。容易看到对于态矢 $|0, 0, 1\rangle$ 有:

$$J^2|0, 0, 1\rangle = |0, 0, 1\rangle, \quad J_z|0, 0, 1\rangle = 0. \quad (31a)$$

而对于态矢 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 0\rangle \pm i|0, 1, 0\rangle)$ 有:

$$\begin{cases} J^2 \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 0\rangle \pm i|0, 1, 0\rangle) \\ = \frac{2}{\sqrt{2}}(|1, 0, 0\rangle \pm i|0, 1, 0\rangle) \\ J_z \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 0\rangle \pm i|0, 1, 0\rangle) \\ = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 0\rangle \pm i|0, 1, 0\rangle) \end{cases} \quad (31b)$$

从以上结果可以看出, 对于 $n = 0, 1$ 的两个最低能态, 态矢确实是 (H, J^2, J_z) 的共同本征态矢。但是, 对于 $n \geq 2$ 的各能态, 就会发现情况不是这样的了。为了方便进一步的讨论, 引入记号 $|n, \langle j^2 \rangle, m\rangle$, 其中 n 标记能级, $\langle j^2 \rangle$ 是算符 J^2 的期待值, m 是算符 J_z 的本征值。

(iii) 在 $n = 2$ 的情形, 子空间由 $|2, 0, 0\rangle, |0, 2, 0\rangle, |0, 0, 2\rangle$ 和 $|1, 1, 0\rangle, |1, 0, 1\rangle, |0, 1, 1\rangle$ 这六个态矢所张成。一般定态的表示式为

$$|\rangle = (f_1|2, 0, 0\rangle + f_2|0, 2, 0\rangle + f_3|0, 0, 2\rangle + f_4|1, 1, 0\rangle + f_5|1, 0, 1\rangle + f_6|0, 1, 1\rangle). \quad (32a)$$

求解本征值问题 $J_z|\rangle = m|\rangle$, 当要求 $m = 0$ 时,

相应的 J_z 本征态为

$$|n=2, \langle j^2 \rangle, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2+f^2}}(|2,0,0\rangle + |0,2,0\rangle + f|0,0,2\rangle). \quad (32b)$$

上述的 J_z 本征态仅当 $f=1$ 时才是 J^2 的本征态。

当要求有 $m=\pm 1$ 时, 相应的 J_z 本征态为

$$|n=2, \langle j^2 \rangle, m=\pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0,1\rangle \pm i|0,1,1\rangle). \quad (32c)$$

它也是 J^2 的本征态, 对应的本征值为 $\langle j^2 \rangle = j(j+1)$, 其中 $j=2$ 。

当要求有 $m=\pm 2$ 时, 相应的 J_z 本征态为

$$|n=2, \langle j^2 \rangle, m=\pm 2\rangle = \frac{1}{2}(|2,0,0\rangle - |0,2,0\rangle \pm i|1,1,0\rangle). \quad (32d)$$

它也是 J^2 的本征态, 对应的本征值为 $\langle j^2 \rangle = j(j+1)$, 其中 $j=2$ 。由此可见, 对应 $m=\pm 1$, $m=\pm 2$ 的 J_z 的本征态必然是 J^2 的本征态, 但在 $m=0$ 时就不一定是这样。也就是说, 由算符一态矢理论体系得到的三维谐振子问题的定态解, 一部分是 (H, J^2, J_z) 的共同本征态矢, 但不必然都是。

为了突出此处的问题, 现将 $n=4$ 的情形详细给出。对于 $n=4$ 的情形, 用 $|n, l, m\rangle$ 记号表示的用波函数体系得到的结果共有 $|n=4, l=0, m=0\rangle$; $|n=4, l=2, m=0, \pm 1, \pm 2\rangle$ 和 $|n=4, l=4, m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4\rangle$ 等十五个本征态, 都被认为是 (H, J^2, J_z) 的共同本征态。考察算符一态矢体系给出的态矢(的恰当叠加)表示, 会发现:

$$|n=4, \langle j^2 \rangle = 20, m=\pm 4\rangle = \frac{1}{4}(|4,0,0\rangle + |0,4,0\rangle \mp 2i|1,3,0\rangle \pm 2i|3,1,0\rangle - \sqrt{6}|2,2,0\rangle), \quad (33a)$$

$$|n=4, \langle j^2 \rangle = 20, m=\pm 3\rangle = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8}}(|1,2,1\rangle \mp i|2,1,1\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{3}}|0,3,1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|3,0,1\rangle), \quad (33b)$$

$$|n=4, \langle j^2 \rangle, m=\pm 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{4+2f^2}}(|4,0,0\rangle - |0,4,0\rangle \pm i|1,3,0\rangle \pm i|3,1,0\rangle \mp \frac{i}{\sqrt{2}}f|2,0,2\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}f|0,2,2\rangle + f|1,1,2\rangle), \quad (33c)$$

$$|n=4, \langle j^2 \rangle, m=\pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8+2f^2}}(|1,2,1\rangle \pm i|2,1,1\rangle + \sqrt{3}|3,0,1\rangle \pm i\sqrt{3}|0,3,1\rangle + f|1,0,3\rangle \pm if|0,1,3\rangle), \quad (33d)$$

$$|n=4, \langle j^2 \rangle, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2+f^2}}(|2,0,2\rangle + |0,2,2\rangle + f|0,0,4\rangle). \quad (33e)$$

上述结果表明, 对于 $n=4$ 的情形, 只有当 $m=\pm 3, \pm 4$ 时, 态矢表示的定态才是 (H, J^2, J_z) 的共同本征态, 此时 (J^2, J_z) 的本征值都取确定的分立值。但是, 对应 $m=0, \pm 1, \pm 2$ 的那些定态却不是 (H, J^2, J_z) 的共同本征态。

5 对轨道角动量理论的再认识

以为中心力场下系统的能量本征态(定态)也是轨道角动量的本征态, 以及由此认定轨道角动量和自旋一样只具有分立谱, 这样的认识有修正的必要。如前所述, 三维谐振子的定态就不必然是轨道角动量的本征态矢。这一发现对量子论相关的物理领域具有怎样的意义呢?

(1) 虽然中心力场下系统的定态不必然是轨道角动量的共同本征态矢, 但中心力场下系统的空间转动变换不变性依然是成立的。以前误认为这一对称性对应的守恒量就是轨道角动量, 现在证明在量子力学框架下并不是。就三维谐振子问题而言, 与转动变换不变性对应的守恒量是总量子数 $n=n_1+n_2+n_3$ (这也是能量守恒), 其与转动生成元对易。

(2) 上述论断得自三维谐振子系统, 但适用于所有中心力场下的系统, 包括氢原子。如果用薛定谔方程所得的定态表示不必然是 (H, J^2, J_z) 的共同本征态, 自然会想到过去将原子中电子分布

按所谓的“轨道角动量”划分为壳层结构是否还成立。答案是形式上的分壳层大体上还是成立的,只是那些壳层的标签不宜再冠以轨道角动量的称号,而是就是波函数的量子数 l 和 l_z 而已。不过,仔细考虑会发现仍有一些不同之处。以前认定的壳层由轨道角动量分类,对应不同角动量本征值的状态矢量(或者波函数)之间有严格的正交性的含义,故壳层间的分别应是明晰的。现在用 l, l_z 来分别壳层,则其所标识的壳层之间实质上不必然正交的,壳层间实际上不是明锐分立的。

(3) 本文关于角动量的论断的一个显著意义是告诉我们基于轨道角动量量子理论的磁效应理论要予以修正。中心力场作用下系统的定态并不必然同时是轨道角动量的本征态,而是一些不同角动量平方算符之本征态的组合。

6 结语

关于量子力学中的角动量理论,特别指轨道角动量的理论,长期以来存在一些误解及含混之处。基于我们此前关于“量子态矢是无量纲的”之认识以及据此对狄拉克表示理论的讨论等准备工作,本文给出轨道角动量算符在算符一态矢体系中的表示,讨论了与量子力学的轨道角动量理论相关的问题。波函数体系中的理论对于轨道

角动量存在误解,根源在于一直把量子力学的波函数(概率幅)描述与态矢量描述完全等同起来。不能将量子力学中作用于波函数上的动能算符(即数学意义的拉普拉斯算符)的角部分就当作系统的轨道角动量。一个具有三分量的对象,仅仅因为其对易关系与空间转动的三个生成元之间的对易关系一致即被当成角动量,并认为其本征值谱应为 (l, m) 这样的分立谱形式,有失严谨。利用严格可解的三维谐振子模型,我们证明了系统的定态并不必然还是轨道角动量(J^2, J_z)的共同本征态。总体来看,就三维谐振子模型而言,对于 n 不同的能级,算符一态矢体系的计算结果与波函数体系的计算结果在高角动量分量上相符。在给定 n 的情形下,即限制在特定的 n 所决定的子空间中,态矢表述给出的不必是确定的 j 值,(在 m 一定的条件下)仍是一个连续变化的 j 值,这正反映出算符 $\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 的根本性质。这样,其从经典理论到量子理论的光滑过渡也就好理解了。角动量的量子理论实际上和经典理论是一致的。在哈密顿算符与角动量分量的本征值 n, m 为确定的分立值时角动量的本征值 j 可以是连续分布的,此一事实应有未受关注的物理效应。当关于量子力学的角动量理论的误解得到澄清后,此前对涉及轨道角动量的物理效应的相关表述都有修正的必要。

参考文献

- [1] Biedenharn L C, van Dam H (eds.). Quantum Theory of Angular Momentum. Academic Press, 1965
- [2] Biedenharn L C, Louck J D, Carruthers P A. Angular Momentum in Quantum Physics: Theory and Application. Cambridge University Press, 2009
- [3] Sakurai J J, Napolitano J. Modern Quantum Mechanics, second edition. Addison Wesley, 1994
- [4] 曾谨言. 量子力学, 第四版. 北京: 科学出版社, 2006
- [5] Holstein T, Primakoff H. Physical Review, 1940, 58 (12): 1098
- [6] Jordan P. Zeitschrift für Physik, 1935, 94 (7-8): 531
- [7] Schwinger J. On Angular Momentum, Unpublished Report of Atomic Energy Commission. Number NYO-3071, 1952
- [8] Born M, Heisenberg W, Jordan P. Zeitschrift für Physik, 1926, 35 (8-9): 557
- [9] Heisenberg W, Jordan P. Zeitschrift für Physik, 1926, 37: 263
- [10] Compton A H. Journal of the Franklin Institute, 1921, 192 (2): 145
- [11] Gerlach W, Stern O. Zeitschrift für Physik, 1922, 9: 349
- [12] Schidt-Böcking H. Eur. Phys. J. H, 2016, 41: 327
- [13] 汪克林, 高先龙, 曹则贤. 物理, 2023, 52(9): 625
- [14] 汪克林, 曹则贤. 物理, 2024, 53(3): 168
- [15] 汪克林, 曹则贤. 物理, 2024, 53(7): 472
- [16] Fradkin D M. American Journal of Physics, 1965, 33: 207