

# 角动量理论

---

M. E. 洛 斯 著    万 乙 译

上 海 科 学 技 术 出 版 社



53.832  
366

# 角 动 量 理 論

M. E. 洛 斯 著

万 乙 譯

366

上海科学技术出版社

## 內 容 提 要

本书根据 John Wiley & Sons, Inc., 1957 年出版的洛斯 (M. E. Rose) 著“角动量基本理論” (Elementary Theory of Angular Momentum) 譯出。

本书从核物理上的应用着眼来介紹角动量理論, 分为上、下两篇。上篇为一般理論; 下篇专述应用。讀者对象为核物理专业、原子能专业、固体物理专业的教师学生及其他有关工作人員。

## ELEMENTARY THEORY OF ANGULAR MOMENTUM

M. E. Rose

John Wiley & Sons, Inc., 1957

## 角 动 量 理 論

万 乙 譯

---

上海科学技术出版社出版 (上海瑞金二路 450 号)

上海市书刊出版业营业許可証出 093 号

---

洪兴印刷厂印刷 新华书店上海发行所发行

开本 850×1168 1/32 印张 8 4/32 排版字数 198,000

1963 年 11 月第 1 版 1964 年 8 月第 2 次印刷 印数 3,201—6,200

統一书号 13119·18 定价(十四) 1.40 元

## 序 言

近几年来角动量理論在原子核結構和原子結構的理論进展上占日益重要的地位。其原因之一是实验技术进步了，已經能够测定核反应中的角分布或級联发射的輻射之間的角关联。角动量理論不仅对于核結構問題有用，在其他完全不同的領域中也有其重要的应用。这种理論可以用来处理原子核的磁矩及电矩跟核外电荷所引起的电场及磁场之間的偶合問題。这里是引証低温研究工作中和微波波譜学中所遇到的問題。

因此，角动量理論的基本原理会引起人們的极大重視，这个理論是描述这些現象的基础。角动量理論本质上是高度形式化的理論。它的主要内容是群論和張量代数的某些部分。不过，在本书中所着重的不象群論和張量代数那样抽象。本书是1954年冬至1955年春在橡树岭国家實驗室讲课时的讲稿。在作这些讲演和写出这些篇幅时作者深信許多物理学工作者清楚地理解这个理論的基本原理是有益的，而其所涉及的观念和技术凡具有研究生的量子力学知識的人大多数是可以掌握的。这并不是說可以避免形式理論。本书中的陈述方式比較簡單，因为作者作了以下两条規定。第一，我們只討論轉动的性质，因为轉动性质跟角动量概念的关系很密切。第二，推理用归納法，而且，正象当年角动量理論最初发展的情形那样，本书跟量子力学中可称为普通知識的那些方面是紧密地連接起来的。作者认为这样的陈述方式可以使观念和分析方法都比較清楚而且簡洁扼要，同时可以不影响这种理論方法的效力和巧妙的程度。所牺牲的只是沒有机会用最直捷的方式討論和处理一些最普遍和复杂的問題。其实，这种欠缺只在少

数几处触及,而且已經在书中都注明了。所贏得的是希望有机会使理論的观念和应用这种理論的方法能被广泛得多的讀者所掌握。

当然,所列的一些应用只是作为例子来讲的。作者并不想把所有的应用都提出来,也不預备把任一种应用都讲得很透彻。在某些例子中是不需要这样做的。例如,我們觉得用角动量理論来计算四极矩偶合能的矩陣元十分簡便。矩陣元一經算出后,确定所討論的系統的能級只在于解一个久期行列式,从我們所讲的目的来看,更深入的討論是不必要的。上篇用来叙述这个理論的主要原理。大部分(虽不是全部)的应用則放在下篇中。

第一章温习一些基本原理。这里我們提出与后續各章有关的算符及其矩陣表示的討論。关于这一点我們要作一說明。为了使討論更恰当,曾提到一些物理学上的观点和用到“角动量”及“自旋”的名詞。在这里虽沒有讲出正式的定义,我們认为讀者本能地会理解所指的是什么,而从所举的例子和对例子的討論中更会清楚。对于純理論特別感兴趣的讀者,在讀过第二章后把这些例子重讀一遍会觉得更有意义。其实所选的例子是很普通的,在很淺近的书籍中都会出現。上篇的下余四章介紹矢量加法的偶合系数( $C$ 系数),角动量波函数的变换性质,不可約張量,和拉卡系数。下篇的六章中所讲述的几种应用是討論带电粒子系統的静态矩及磁偶极,內禀自旋 $\frac{1}{2}$ 及1的粒子,定向原子核(这个題目包括級联衰变的角关联和角分布及在低温实验中总截面的改变),核反应中的偶合方式,和恒等粒子系統的波函数。

M. E. 洛斯 1957 年 4 月

00370

# 目 录

## 序 言

## 上篇 一般理論

|                          |    |
|--------------------------|----|
| 第一章 基本理論 .....           | 2  |
| 1. 厄米算符 .....            | 2  |
| 2. 么正变换 .....            | 6  |
| 3. 算符的对角化 .....          | 9  |
| 4. 么正算符的指数形式 .....       | 11 |
| 第二章 角动量算符 .....          | 14 |
| 5. 角动量算符的定义 .....        | 14 |
| 6. 軌道角动量 .....           | 16 |
| 7. 角动量算符的对易規則 .....      | 19 |
| 8. 角动量算符的本征值 .....       | 21 |
| 9. 角动量的物理解釋 .....        | 28 |
| 第三章 两角动量的偶合 .....        | 32 |
| 10. 克萊毕許-高登系数的定义 .....   | 32 |
| 11. 克萊毕許-高登系数的对称关系 ..... | 37 |
| 12. 克萊毕許-高登系数的計算 .....   | 43 |
| 第四章 轉动下的变换性质 .....       | 48 |
| 13. 轉动算符的矩陣表示 .....      | 48 |
| 14. 克萊毕許-高登級数 .....      | 58 |
| 15. 轉动矩陣的确定 .....        | 63 |
| 16. 轉动矩陣的正交性及归一化 .....   | 75 |
| 第五章 不可約張量 .....          | 78 |
| 17. 不可約張量算符的定义 .....     | 78 |
| 18. 不可約張量算符的拉卡定义 .....   | 83 |
| 19. 維格納-埃伽定理 .....       | 87 |
| 20. 一秩張量的投影定理 .....      | 96 |

## [ 2 ] 目 录

|                     |     |
|---------------------|-----|
| 21. 一个矢量场的角动量 ..... | 100 |
| 第六章 拉卡系数 .....      | 109 |
| 22. 三个角动量的偶合 .....  | 109 |
| 23. 拉卡系数的性质 .....   | 112 |
| 24. 基本用法 .....      | 118 |
| 25. 梯度公式 .....      | 123 |

## 下篇 应 用

|                                  |     |
|----------------------------------|-----|
| 第七章 电磁场 .....                    | 130 |
| 26. 麦克斯韦方程 .....                 | 130 |
| 27. 多极场 .....                    | 134 |
| 第八章 静态互作用 .....                  | 143 |
| 28. 静电电荷分布的多极矩 .....             | 143 |
| 29. 自旋互作用 .....                  | 147 |
| 第九章 自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子 .....   | 153 |
| 30. 非相对论性描述 .....                | 153 |
| 31. 相对论性描述 .....                 | 155 |
| 第十章 定向原子核及角关联 .....              | 165 |
| 32. 极化核俘获极化中子的情形 .....           | 165 |
| 33. 角关联 .....                    | 169 |
| 34. 一个定向核发射 $\alpha$ 粒子的情形 ..... | 181 |
| 第十一章 核反应中的角分布 .....              | 192 |
| 35. $j-j$ 及 $L-S$ 偶合 .....       | 192 |
| 36. 核反应中角动量的偶合 .....             | 198 |
| 第十二章 全等粒子 .....                  | 211 |
| 37. $j-j$ 偶合中的全等粒子 .....         | 211 |
| 38. $L-S$ 偶合中的全等粒子 .....         | 222 |
| 39. 同位旋 .....                    | 225 |

## 附 录

|                         |     |
|-------------------------|-----|
| I. 克莱毕许-高登系数及拉卡系数 ..... | 232 |
| II. 转动矩陣 .....          | 239 |
| III. 球谐函数 .....         | 246 |

# 上篇 一般理論

|                    |     |
|--------------------|-----|
| 第一章 基本理論 .....     | 2   |
| 第二章 角动量算符 .....    | 14  |
| 第三章 两角动量的偶合 .....  | 32  |
| 第四章 轉动下的变换性质 ..... | 48  |
| 第五章 不可約張量 .....    | 78  |
| 第六章 拉卡系数 .....     | 109 |



# 第一章 基本理論

閱讀本書後面各章所需要的基本知識，几乎是學過量子力學的人所完全熟悉的。為了參考方便和敘述完整起見，我們在這一章中對於這些基本知識作一簡略的復習。

## 1. 厄米算符

為了討論厄米算符的性質，我們規定兩個函數（以  $\chi$  及  $\zeta$  為例）的無向積具有以下性質：

$$(\chi, \zeta) = (\zeta, \chi)^* \quad (1.1a)$$

$$(\chi, c\zeta) = c(\chi, \zeta) \quad (1.1b)$$

$$(\chi, \zeta_1 + \zeta_2) = (\chi, \zeta_1) + (\chi, \zeta_2) \quad (1.1c)$$

$$(\chi_1 + \chi_2, \zeta) = (\chi_1, \zeta) + (\chi_2, \zeta) \quad (1.1d)$$

星號指複數共軛； $c$  是複數。無向積的詳細情形以後再說。

算符  $\Omega$  的厄米伴  $\Omega^+$  具有以下性質

$$(\Omega^+\chi, \zeta) = (\chi, \Omega\zeta) \quad (1.2)$$

例如，如果  $\chi$  及  $\zeta$  在積分域邊界上是零，對於梯度算符來說， $\nabla^+ = -\nabla$ 。一個厄米或自伴算符是它本身的伴。這意味着  $\Omega = \Omega^+$ ，因此

$$(\Omega\chi, \zeta) = (\chi, \Omega\zeta) \quad (1.3)$$

在以上的例子中  $i\nabla$  是一個厄米算符。

如果我們考慮算符  $\Omega$  的矩陣表示，則它的厄米伴是把矩陣的行和列交換並將每一元素取其複數共軛而得的矩陣。（1.2）式可以認為是這個定義的形式上的算式。用了（1.1a），它表示

$$(\Omega^+\chi, \zeta) = (\Omega\zeta, \chi)^* \quad \text{或} \quad (\chi, \Omega\zeta) = (\zeta, \Omega^+\chi)^*$$

这时候 (1.3) 式是厄米矩陣的形式上的定义。無論我們考慮的是一个算符或其矩陣表示都可以証明

$$(\Omega_1 \Omega_2 \Omega_3 \cdots \Omega_n)^+ = \Omega_n^+ \Omega_{n-1}^+ \cdots \Omega_3^+ \Omega_2^+ \Omega_1^+$$

厄米算符有两个重要性质：

(a) 它們的期待值是实数 (从 (1.3) 及 (1.1a))

$$(\chi, \Omega \chi) = (\chi, \Omega \chi)^* \quad (1.4)$$

(b) 它們的本征函数是正交的。就是說, 从方程

$$\Omega \psi = \omega \psi$$

和它的边界条件, 只对某些  $\omega$  值满足, 在这种情形下从 (1.4) 取  $\chi = \psi$  就証明本征值是实数<sup>①</sup>。相对应的本征函数可以用本征值  $\omega$  来标记

$$\Omega \psi_\omega = \omega \psi_\omega \quad (1.5)$$

設有两个綫性独立的本征函数  $\psi_\omega$  及  $\psi_{\omega'}$ 。所謂綫性独立意思是指不存在两个非零的常数  $c$  及  $c'$  使  $c\psi_\omega + c'\psi_{\omega'} = 0$ 。否則  $\psi_\omega$  及  $\psi_{\omega'}$  将只相差一个乘法常数, 而  $\psi_\omega$  及  $\psi_{\omega'}$  則将是等效的<sup>②</sup>。从厄米算符的定义 (1.3) 有

$$(\psi_{\omega'}, \Omega \psi_\omega) = (\Omega \psi_{\omega'}, \psi_\omega)$$

或

$$(\omega' - \omega) (\psi_{\omega'}, \psi_\omega) = 0$$

如果  $\omega \neq \omega'$ , 則  $\psi_\omega$  和  $\psi_{\omega'}$  是正交的; 即  $(\psi_{\omega'}, \psi_\omega) = 0$ 。如果  $\omega = \omega'$ ,  $\psi_\omega$  和  $\psi_{\omega'}$  仍然可以正交化, 因為它們是綫性独立的。例如, 綫性組合  $\psi_\omega - (\psi_{\omega'}, \psi_\omega) \psi_{\omega'}$  是正交于  $\psi_{\omega'}$ , 虽然这两本征函数有同样的本征值, 它們仍是兼併的。其实这些本征函数必須是一整套的对易厄米算符<sup>③</sup>的同时本征函数, 而那个标记  $\omega$  是代表一套量子数的。这时候, 那系統的独立的本征函数, 不会有两套量子数或本征值是完全相同的。兼併只意味着算符中至少有一个算符其本征值

① 我們只討論本征值譜是完全的情形。

② 如果我們要求它們有同样的規一化条件, 則它們只差一个位相因子 (模是一的数)。

③ 在第 3 节中将进一步討論一組厄米算符同时对角化問題。

是相同的，在平常的術語中兼併指有相同的能量。

根据以上所述，我們概括起来可以說两个独立的本征函数的无向积是

$$(\psi_{n'}, \psi_n) = 0 \quad \text{对于 } n' \neq n$$

这里再着重指出  $n$  和  $n'$  是所有本征值的集体标记； $n' \neq n$  意味着对于这两个本征函数至少有一个本征值是不同的。本征函数可以乘上一个适当的数使其归一化，

$$(\psi_{n'}, \psi_n) = 1 \quad \text{对于 } n' = n$$

于是，我們說  $\psi_n$  构成一个正交归一化集

$$(\psi_{n'}, \psi_n) = \delta_{n'n} \quad (1.6)$$

而且，它們也是一个完备集，虽然我們并不在这里証明这一点。所謂完备的，我們的意思是对于所有  $n$  不存在着函数  $F$  使  $(\psi_n, F) = 0$ 。其后果是一个具有合理行为的函数  $f$  可以用基  $\psi_n$  来展开①：

$$f = \sum_n f_n \psi_n \quad f_n = (\psi_n, f) \quad (1.7)$$

上式的几何解釋可以把  $\psi_n$  的集看作为一組正交归一的单位矢量而得出，这組矢量所在的空間維数和組数  $n$  所代表的一样。当然这个数不必定是有限的。上列展开式类似将“矢量” $f$  用它的分量  $f_n$  和单位矢量  $\psi_n$  来表示。即使  $n$  的空間不是有限的，我們有时只对于其有限的子空間感兴趣。例如， $n$  可以代表三个数  $n_1, n_2, n_3$ 。其中  $n_1$  (例如能量) 可以有一无穷数容許值的譜 (可計数的或数不清的)， $n_2$  及 (或)  $n_3$  可以代表厄米算符的本征值，其譜包括有限的容許值。角动量的一个分量即其一例。如果  $n_3$  有这样的性质，則 (1.7) 的和当  $n_1$  及  $n_2$  固定时項数有限。这相当于只挑选在总的空間中一个子空間的矢量  $f$ 。

如果所討論的函数只跟空間坐标  $x$  有关，則 (1.1) 的无向积是

① 对于坚持数学上的严格性的人很难下“具有合理行为”的恰当定义。人們可以說必須存在着系数  $f_n$  而 (1.7) 中的和可以求出来，虽然这样讲嫌重复。無論如何在我們应用中我們可以說不会有困难的。

对  $x$  的一个积分

$$(\chi, \zeta) = \int d^3x \chi(x) \zeta(x)$$

这里  $d^3x$  是体积元。此外，我們对于那些也依赖于取分立值的变数的函数感兴趣。例如，可以有旋量指数  $s$ 。对于角动量为  $j$  的一个粒子指数  $s$  取  $2j+1$  个值<sup>⑤</sup> 即为一例（以后将說得更清楚）。这时候波函数可以写成为列矩阵，其每一元素是空間坐标的函数，

$$\chi(x) = \begin{bmatrix} \chi^{(1)}(x) \\ \chi^{(2)}(x) \\ \dots\dots\dots \\ \chi^{(2j+1)}(x) \end{bmatrix}$$

而无向积则包括求和及积分

$$(\chi, \zeta) = \sum_m \int d^3x \chi^{(m)*}(x) \zeta^{(m)}(x) = \int d^3x \chi^+ \zeta$$

在最后的等式中， $\chi^+ \zeta$  是指  $\chi^+$  和  $\zeta$  的矩阵乘积，而这里的  $+$  指复数共轭轉置。除非特别声明，一个无向积包括对所有独立变数求和，其中包括对連續区中的积分和对于分立变数的通常的求和。

正象已經指出的那样，以上的无向积中的求和可以认为是  $\chi$  的行矩阵跟  $\zeta$  的列矩阵的矩阵乘积， $\chi$  的行矩阵是从  $\chi$  轉置和取复共轭得到的（即  $\chi^+$ ）。关于这一点我們也可以引用正交归一集  $\phi_m$ ，其元素除了其中在第  $m$  个位置处是 1 以外其余都是零。如果有  $2j+1$  行， $j$  是半整数或整数，则  $\phi_m$  的形式如下：

$$\phi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \quad \phi_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad \phi_{2j+1} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

⑤ 角动量用  $\hbar$  作为单位。因此  $j$  及类似的符号是除以  $\hbar$  的角动量。换言之，我們不用普通的 cgs 制而采用一种新的力学单位系統，其中  $\hbar$  的数值是 1。

于是我們可以写

$$\chi = \sum_m \chi^{(m)} \phi_m$$

这和以上所述的一致, 因为  $\phi_m$  形成一个正交归一集. 即

$$(\phi_m, \phi_n) = \delta_{nm}$$

$j = \frac{1}{2}$  的情形是从泡利对于电子自旋的处理中早已知道的; 这里  $m$  有两个值,  $j = \pm \frac{1}{2}$ , 理由見第 8 节. 另外一个可能是內禀自旋为 1, 麦克斯韦尔場即是很好的例子. 对于单色場的一个充分且完全的描写方式是用矢势  $\mathbf{A}^{\text{①}}$  的方式, 其分量如下:

$$A_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} (A_x + iA_y)$$

$$A_0 = A_z$$

$$A_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_x - iA_y)$$

其位相及归一化我們在以后討論. 这种場的“三元性”(2·1+1)来自它的矢量性, 这种矢量性使其內禀自旋为 1 (見第五章及第七章). 当然我們以后会看到电磁場可以有任何  $\geq 1$  的整数角动量, 正象一个电子有任何  $\geq \frac{1}{2}$  的半整数角动量一样.

## 2. 么正变换

在角动量理論中特別重要的是么正变换. 一个么正变换是一个綫性齐次变换, 它保持长度及角度不变, 即保持无向积不变. 几何解釋是上节所述的由基矢量  $\psi_n$  所張的空間中的旋轉. 就是, 現在我們选另一种基  $\varphi_n$ , 而由于集  $\psi_n$  的完备性, 函数  $\varphi_n$  可以表示成为象 (1·7) 中那样  $\psi_n$  的綫性組合. 这两种基 ( $\psi_n$  及  $\varphi_n$ ) 間的連

① 我們假定矢势是用劳侖茲条件  $\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$  来規定的, 其中  $\varphi$  为标势. 这时候标势由  $\mathbf{A}$  来确定, 所差在于加上一个時間无关的量. 那時間无关的量是一个静态場, 这种場对于我們一般所考慮的动力学問題并不重要.

系构成了么正变换。

如果  $C$  是生成么正变换的算符(矩阵), 而  $\varphi_1$  及  $\varphi_2$  是任意两个函数或列矩阵(于是  $C\varphi_1$  及  $C\varphi_2$  是变换成的矩阵), 则依定义有

$$(C\varphi_1, C\varphi_2) = (\varphi_1, \varphi_2) \quad (1.8')$$

用了(1.2)的厄米性的性质, 这是

$$(\varphi_1, C^+C\varphi_2) = (\varphi_1, \varphi_2)$$

$\varphi_1$  及  $\varphi_2$  是任何两函数, 故得

$$C^+C = 1 \quad (1.8)$$

依据行列式的定理我们可以写

$$\det C^+ \det C = \det 1 = 1$$

其中  $\det C$  是矩阵  $C$  的行列式。因为  $\det C^+ = (\det C)^*$ , 于是

$$|\det C|^2 = 1$$

但, 由于  $\det C \neq 0$  (就是, 它不是奇行列式), 于是矩阵  $C$  有一逆式  $C^{-1}$ , 使  $CC^{-1} = C^{-1}C = 1$ 。不仅我们可以写出新基用旧基表示的线性方程, 而且我们也可以解出这些线性方程而把旧基用新基来表示。(1.8)式就是规定  $C$  的逆式<sup>②</sup>的关系式。这就是

$$C^{-1} = C^+ \quad (1.9)$$

从(1.8)跟(1.9)我们可以看到, 任何数的么正矩阵的乘积(或接联几次变换)是一个么正矩阵(或么正变换)。而且, 如果  $C = C_1C_2$ ,  $CC^+ = 1$  和  $C_1C^+ = 1$ , 于是  $1 = CC^+ = C_1C_2C_2^+C_1^+$  或  $C_1C_2C_2^+ = C_1$ 。因为存在着  $C^{-1}$ , 于是  $C_2C_2^+ = 1$ 。这就是以上所说的, 外加一个结果是一个么正矩阵的逆矩阵也是么正的。

(1.8)的结果也可以用矩阵元  $C_{nm}$  来写出, 矩阵元用下式

$$\psi_n = \sum_m C_{nm} \varphi_m \quad (1.10)$$

来定义, 其中  $\psi_n$  及  $\varphi_n$  分别是在新的和旧的表示中的基矢量, 且由于  $\varphi_n$  的正交归一性,

$$C_{nm} = (\varphi_m, \psi_n) \quad (1.11)$$

②. 依定义, 如果  $C = C_1 C_2 \dots C_n$ , 则  $C^{-1} = C_n^{-1} \dots C_2^{-1} C_1^{-1}$ 。

把(1.9)的算符方程  $CC^+=1$  和  $C^+C=1$  用矩陣符号重新写出来, 則得矩陣元  $C_{nm}$  的么正性质

$$\sum_l C_{nl}^* C_{ml} = \delta_{nm} \quad (1.12)$$

$$\sum_l C_{ln}^* C_{lm} = \delta_{nm} \quad (1.13)$$

其中我們用了  $C_{nm}^+ = C_{mn}^*$  的事实. 于是不論对行或列的指数求和, 我們总能得到正交性. 对于这个結果的一个看法是把任一行, 例如第  $n$  行中的元看作为“矢量”  $\mathbf{C}_{n-}$ ,  $\mathbf{C}_{n-}$  的第  $l$  个元是  $C_{nl}$ . 于是(1.12)式說明这些行矢量是正交归一的:  $\mathbf{C}_{n-} \cdot \mathbf{C}_{m-} = \delta_{nm}$ . 相似地, 我們可以把任一列的元看作为构成一个矢  $\mathbf{C}_{-n}$ , 而从(1.13)式看到这些列矢量是正交归一的,  $\mathbf{C}_{-n} \cdot \mathbf{C}_{-m} = \delta_{nm}$ .

从一个基变到另一个基的变换一旦規定好后, 其次的問題是决定当我們改变基的时候一个算符的矩陣表示是怎样变换的. 例如, 对于算符  $\Omega$ , 如果我們已知元  $(\varphi', \Omega\varphi)$ , 則元  $(\psi', \Omega\psi)$  ⑤ 为何? 用波函数  $\varphi'$  及  $\varphi$  描写的两态之間的算符  $\Omega$  的矩陣元是

$$(\varphi', \Omega\varphi) \equiv (\varphi' | \Omega | \varphi) \quad (1.14)$$

变换后的函数⑥ 是  $\psi = C\varphi$ ,  $\psi' = C\varphi'$ , 而

$$\begin{aligned} (\varphi', \Omega\varphi) &= (C^{-1}\psi', \Omega C^{-1}\psi) \\ &= (\psi', (C^{-1})^+ \Omega C^{-1}\psi) = (\psi', \Omega_T \psi) \end{aligned}$$

其中

$$\Omega_T = (C^{-1})^+ \Omega C^{-1} \quad (1.15)$$

是算符  $\Omega$  的变换式, 对于一个么正变换  $(C^{-1})^+ = C$ , 而

$$\Omega_T = C \Omega C^{-1} = C \Omega C^+ \quad (1.16)$$

就是說, 一个算符在  $\psi$  基的矩陣表示是  $\Omega_T$ , 在  $\varphi$  基的表示是  $\Omega$ , 而  $\Omega_T$  及  $\Omega$  之間的联系为(1.16)式. 基的选择是任意的, 常选用

⑤ 有时我們把矩陣元  $(\psi', \Omega\psi)$  写成为  $(\psi' | \Omega | \psi)$ . 如果用量子数或本征值来编号, 这种写法特別方便. 例如  $\Omega_{mn} = (\psi_m, \Omega\psi_n) = (\psi_m | \Omega | \psi_n) = (m | \Omega | n)$ .

⑥  $\psi$  及  $\varphi$  依次是元为  $\psi_n$  及  $\varphi_n$  的列矩陣; 見(1.10)式.

計算起来最方便的一种<sup>⑩</sup>。物理的結果当然与这种选择没有关系，以上討論也明显地表示出这一点——如果量測的結果用矩陣元来表示。例如  $C$  可以是坐标系轉动的么正变换，所选的坐标系使一个物理量的計算尽可能简单。

### 3. 算符的对角化

算符  $\Omega$  在其本征函数表示方式中是对角的

$$\Omega\psi_n = \omega_n\psi_n \quad (1.17)$$

$$(\psi_m, \Omega\psi_n) = \omega_n\delta_{nm}$$

令  $\Omega_{mn}$  是在其他基  $\varphi$  中的矩陣元，則

$$\begin{aligned} \Omega_{mn} &= (\varphi_m, \Omega\varphi_n) \\ \Omega\varphi_n &= \sum_m \Omega_{mn}\varphi_m \end{aligned} \quad (1.18)$$

从  $\varphi_n$  的表示起，重要的問題在于定出从集  $\varphi_n$  到集  $\psi_n$  的么正变换  $C$ ，这种变换使  $\Omega$  对角化。为简单起见，我們假定  $\Omega$  是厄米的，本征值是分立的、不兼併的。在許多重要应用中都是这样。从 (1.10) 我們有

$$\psi_n = \sum_m C_{nm}\varphi_m$$

两边用  $\Omega$  运算；在左边，用了 (1.17)，

$$\Omega\psi_n = \omega_n\psi_n = \omega_n \sum_m C_{nm}\varphi_m$$

而在右边，用了 (1.18)，

$$\Omega \sum_m C_{nm}\varphi_m = \sum_m C_{nm} \sum_l \Omega_{lm}\varphi_l$$

把这两式相等，得

$$\sum_l \sum_m \Omega_{lm} C_{nm}\varphi_l = \omega_n \sum_l C_{nl}\varphi_l$$

<sup>⑩</sup> 这跟描写任何物理过程时在选择坐标系中所牵涉到的任意性完全类似。这并不是說描写所有物理情况可以不規定坐标系(例如对于角分布)，但是坐标系的选择只是看方便与否而定。总之，不論我們采用哪一种坐标系，相对于規定的方向(入射束的传播矢方向)的角分布总是一样的。



两边的  $\varphi_l$  的系数一定相同,

$$\sum_n \Omega_{lm} C_{nm} = \omega_n C_{nl} = \omega_n \sum_n \delta_{lm} C_{nm}$$

这結果是对于么正算符  $C$  的矩陣元的一組齐次方程:

$$\sum_n (\Omega_{lm} - \omega_n \delta_{lm}) C_{nm} = 0 \quad \text{对每一 } n \quad (1.19)$$

要求系数的行列式是零,即

$$\det(\Omega_{lm} - \omega \delta_{lm}) = 0$$

得出对于本征值  $\omega_n$  的一个代数方程. 本征值一經知道,从(1.19)可以解出么正变换的矩陣元  $C_{nm}$ , 从而得本征函数  $\psi_n$ , (1.19)的齐次性意味着,对于每一  $n$ , 除了一个元外全部可以用任何特殊的一个来决定. 这个元由(1.12)或(1.13)来定. 对于每一个  $n$  剩下不肯定的只有全部的位相 ( $e^{i\eta}$ ,  $\eta$  是实数但任意的). 任何方便的約定(如所有  $\eta=0$ ) 都可以选择,不会影响任何物理結果.

一个更普遍的問題是建立起几个算符的同时本征值的函数. 关于这一点我們只引用这个普遍定理: 一系列厄米算符可以用同一么正变换对角化的充要条件是它們是对易的<sup>①</sup>.

作为本节中所討論的一些問題的举例, 我們来考察两个自旋(或角动量)  $j_1$  及  $j_2$  的情形. 如果它們只和外磁場  $\mathbf{H}$  起作用, 則哈密頓式是

$$\beta g_1 (\mathbf{H} \cdot \mathbf{j}_1) + \beta g_2 (\mathbf{H} \cdot \mathbf{j}_2)$$

其中  $\beta$  是玻耳磁子,  $g_1$  及  $g_2$  是适当的迴轉磁比. 这个哈密頓式可以用一个函数来对角化, 这种函数是每一角动量算符的  $z$  分量的同时本征函数, 即本征函数的簡單乘积

$$\varphi_{j_1 m_1 m_2} = \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}$$

$m_1$  及  $m_2$  分別是  $j_{1z}$  及  $j_{2z}$  的本征值, 見第 5 节. 例如对于沒有軌道角动量自旋  $\frac{1}{2}$  的粒子, 在每一空間中

① P. A. M. Dirac, Quantum Mechanics, 2 ed., p. 46, Clarendon Press, Oxford, 1935.