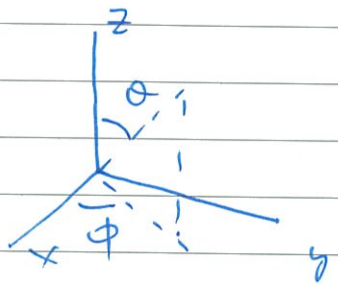
Chapter 11 Space Quantization of Eigenstates of Angular momentum

* Angular momentum in spherical coordinates

如前所述，$\vec{L}$只与θ及φ有關，在此求出其与θ及φ之關係：



$$x = r\sin\theta\cos\phi \qquad r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi$$

$$z = r\cos\theta$$

首先，$\frac{\partial}{\partial x}$ 要換為 $\frac{\partial}{\partial r}$，$\frac{\partial}{\partial \theta}$，$\frac{\partial}{\partial \phi}$，∵要知道 $\frac{\partial r}{\partial x}$，$\frac{\partial \theta}{\partial x}$，$\frac{\partial \phi}{\partial x}$

$$\left(\because \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

(i)

$$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}, \quad \therefore \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\phi$$

同理 $\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin\theta\sin\phi$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos\theta$$

(ii) $\because r\sin\theta = \sqrt{x^2+y^2}$

$$\therefore \tan\theta = \frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}, \quad \theta = \tan^{-1}\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\partial \tan^{-1}u}{\partial x} = \frac{1}{1+u^2}\,\frac{1}{z}\,\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} = \frac{z}{x^2+y^2+z^2}\,\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} = \frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi$$

$$u = \frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{z}\,\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}$$

同理 $\frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{z}{x^2+y^2+z^2}\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} = \frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi$

$$\frac{\partial\theta}{\partial z} = \frac{1}{1+u^2}\frac{\partial \frac{1}{z}\sqrt{x^2+y^2}}{\partial z} = -\frac{1}{1+u^2}\frac{1}{z^2}\sqrt{x^2+y^2}$$

$$= -\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{x^2+y^2+z^2} = -\frac{1}{r}\sin\theta$$

(iii) $\tan\phi = y/x$

$$\therefore \frac{\partial\phi}{\partial x} = \frac{1}{1+(y/x)^2}\underbrace{\frac{-y}{x^2}}_{\frac{\partial y/x}{\partial x}} = -\frac{y}{x^2+y^2} = -\frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{1}{1+(y/x)^2}\frac{1}{x} = \frac{x}{x^2+y^2} = \frac{1}{r}\frac{\cos\phi}{\sin\theta}$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}$$

可以設 $r=1$，忽略 $\frac{\partial}{\partial r}$ ($\because$ 前的論述 $\Rightarrow \hat{L}$ 與 r 無關)

$$\Rightarrow \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\left[\sin\theta\cos\phi\left(\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - \sin\theta\sin\phi\left(\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right]$$

$= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$，也和 ϕ 描述對 z 軸之轉動的圖像吻合！

同理

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left[y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[\sin\theta\sin\phi\left(-\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \cos\theta\left(\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left[z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left[\cos\theta\left(\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - \sin\theta\cos\phi\left(-\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]$$

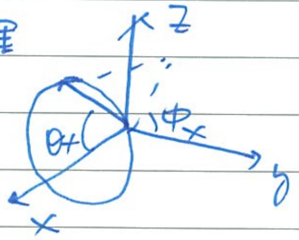
$$= \frac{\hbar}{i}\left[\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

Why do $\hat{L}_x$ & $\hat{L}_y$ look so different from $\hat{L}_z$?

下面的作法將澄清此點:

① 对z軸旋轉, z fixed, 只改變 ϕ, $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$

② 同理



对x軸旋轉, x fixed, 若將x軸視為z軸
y軸 → x軸
z〃 → y軸

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi_x}\Big|_{\theta_x \text{ fixed}}$$

只是, 此時 ϕ_x 與 θ 及 ϕ 有關:

$$x = r\sin\theta\cos\phi = r\cos\theta_x \quad -①$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi = r\sin\theta_x\cos\phi_x \quad -②$$

$$z = r\cos\theta = r\sin\theta_x\sin\phi_x \quad -③$$

在 θ_x fixed 下,

①式 $\Rightarrow$ $\cos\theta\cos\phi\,\delta\theta - \sin\theta\sin\phi\,\delta\phi = 0$

②式 $\Rightarrow$ $\cos\theta\sin\phi\,\delta\theta + \sin\theta\cos\phi\,\delta\phi = -\sin\theta_x\sin\phi_x\,\delta\phi_x$

③式 $\Rightarrow$ $-\sin\theta\,\delta\theta = \sin\theta_x\cos\phi_x\,\delta\phi_x$

$= \sin\theta\sin\phi\,\delta\phi_x$

②式

$= -\cos\theta\,\delta\phi_x$

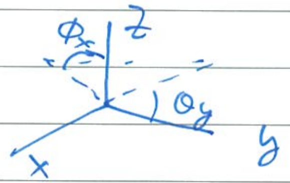
③式

因此, $\dfrac{d\theta}{d\phi_x} = -\sin\phi$

$$\frac{d\phi}{d\phi_x} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{\sin\theta\sin\phi}\frac{d\theta}{d\phi_x} = -\cos\phi\cot\theta$$

$$\frac{d}{d\phi_x} = \frac{d\theta}{d\phi_x}\frac{d}{d\theta} + \frac{d\phi}{d\phi_x}\frac{d}{d\phi} = -\sin\phi\frac{d}{d\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{d}{d\phi}$$

③ $\hat{L}_y = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{d}{d\phi_y}$



與 $x = r\sin\theta\cos\phi = r\sin\theta_y\sin\phi_x$

$y = r\sin\theta\sin\phi = r\cos\theta_y$

$z = r\cos\theta = r\sin\theta_y\cos\phi_x$

$\cdots \Rightarrow \dfrac{d}{d\phi_y} = \cos\phi\dfrac{d}{d\theta} - \cot\theta\sin\phi\dfrac{d}{d\phi}.$

$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ 可由以上之表示求出:

$$= -\hbar^2 \Big[\left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right)^2$$

$$+ \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \Big]$$

交錯項有 $\cancel{2\sin\theta \cot\theta \cos\phi \frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi}} + \cancel{\sin\phi \frac{\partial \cot\theta}{\partial\theta} \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi}}$

$\cancel{-2\cos\phi \cot\theta \sin\phi \frac{\partial^2}{\partial\theta\partial\phi}} - \cancel{\cos\phi \frac{\partial \cot\theta}{\partial\theta} \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi}}$

$$\left. \begin{array}{l} \cot\theta \cos\phi \frac{\partial \sin\phi}{\partial\phi} \frac{\partial}{\partial\theta} \\ -\cot\theta \sin\phi \frac{\partial \cos\phi}{\partial\phi} \frac{\partial}{\partial\theta} \end{array} \right\} = \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta}$$

可 skip

$$\therefore L^2 = -\hbar^2 \Big\{ (\sin^2\phi + \cos^2\phi) \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot^2\theta (\cos^2\phi + \sin^2\phi) \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

$$+ \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \Big\}$$

$$= -\hbar^2 \Big\{ \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \underbrace{\cot^2\theta \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}} \Big\}$$

$$= -\hbar^2 \Big\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \Big\}.$$

* Eigenstates

$$\because [L^2, L_i] = 0, \quad i = x, y, z$$

$$\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$$

∴只能選 L^2 及 $\vec{L}$ 中之一個分量

來同時對角化, 找 eigenstate!

一般選取 L^2 及 $\underset{\sim}{L_z}$

稱之為 quantization axis

並將 eigenvalues 及 eigenfunctions 以下列表示，

$$\hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta,\phi) = m\hbar \, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \ell(\ell+1)\hbar \, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$Y_{\ell m}$ 稱為 spherical harmonics

(i) L_z 之 eigenvalues 及 eigenstate

$$\because \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\phi}$$

$$\therefore \frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\phi} Y_{\ell m} = m\hbar \, Y_{\ell m}$$

$\therefore Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ 可以寫為 $\Theta_{\ell m}(\theta)\,\Phi_m(\phi)$，其中

$$\frac{d\Phi_m}{d\phi} = im\,\Phi_m(\phi)$$

$$\therefore \Phi_m(\phi) \propto e^{im\phi}$$

normalized : $\int_0^{2\pi} d\phi \, |\Phi_m(\phi)|^2 = 1 \quad \therefore \Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$

What is m ?

通常的 argument : $Y_{\ell m}(\theta, \phi+2\pi) = Y_{\ell m}(\theta,\phi)$

$$\therefore e^{i(\phi+2\pi)m} = e^{i\phi m}, \quad e^{i2\pi m} = 1$$

$\therefore m =$ integer.

此論証並不完全正確：因為真正不變的為机率密度，而非波函数本身！

一般而言，任意 $\psi(\phi)$ 皆為 $\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$ 之組合，如

$$\psi(\phi)=\sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}},$$

若只有一個 m，則 $|\psi(\phi)|^2=|\psi(\phi+2\pi)|^2$ for any m.

若考慮有二個 m, m'

設 $\psi(\phi)=\alpha\left(e^{im\phi}+e^{im'\phi}\right)$

則 $|\psi(\phi)|^2=2|\alpha|^2+2|\alpha|^2\cos(m-m')\phi$

因此 $|\psi(\phi+2\pi)|^2=|\psi(\phi)|^2$ 表示，

$$\cos(m-m')\cdot 2\pi=1$$

即任意二個被允許之 m 及 m' 值

$$m-m'=\text{integer}!$$

∴ 以某一 m_0 值為準，其他之 m 與 m_0 之差一定為整数

因此，可以推論，最廣，且被允許之 m 為

$$m=c+\text{integer}.$$

即 m 可為 $\ldots, c-2, c-1, c, c+1, c+2, c+3, \ldots$

(注意：這只是最大被允許的可能值！)

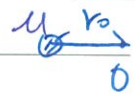
但另一方面，我們知道 $m\hbar$ 為 L 在 z 之投影，所以我們期待，被允許之 $m\hbar$ 在z軸上應該是对稱的！

這只有當 $c=0$ 或 $c=1/2$ 才可能.

其中 $c=0$，即回到之前論証的結果：$m = \text{integer}$.

我們將先考慮 $c=0$ 之情形.

例：x-y plane 上之 rigid rotator.



此時 $\hat{H}$ 只含 L_z 有關：$\hat{H} = \dfrac{\hat{L}_z^2}{2I}$

I = 轉動慣量 = μr_0^2

$$\therefore E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad m = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\phi},$$ $\pm$ 对應於正轉及反轉

$\psi(\phi+2\pi) = \psi(\phi)$ 代表系統在轉了 2π 之後不變.

若有 N 個 identical particle 平均分在一個 ring 上，

則 $\psi\left(\phi + \frac{2\pi}{N}\right) = \psi(\phi)$

此時 $m = N \cdot \text{integer}$. $E = \dfrac{\hbar^2 (Nm)^2}{2I}$

(ii) Raising & Lowering operators (梯子算符)

在(i)中，我們雖然推論角度之 m 值為 integers ($C=0$)，

但並不一定非得是 $m = -2, -1, 0, 1, 2, \ldots$

(即只是間隔 1 之整數值)

像 $m = \ldots -4, -2, 0, 2, 4 \ldots$ 之可能並未排除！

在這裏，我們將說明，得確，只能有前者的情形。

這仰賴著所謂梯子算符 (Ladder operator) 之存在：

$$L_\pm \equiv L_x \pm i L_y$$

$\boxed{\text{古典上}}$ $L_+ = L_x + i L_y \sim \ell(\cos\phi + i\sin\phi)$ $\phi = \omega t$

$$\sim \ell\, e^{i\phi}$$

$$L_- \sim \ell\, e^{-i\phi}$$

$\therefore\ L_\pm\, \Psi_m(\phi) \propto e^{i(m\pm1)\phi}$

因此，$L_+ \Psi_m(\phi)$ raise L_z 到 $(m+1)\hbar$

而 L_- 則 lower L_z 〃 $(m-1)\hbar$ ！

嚴謹的量子處理依賴以下

Commutation relations：

① $[L^2, L_\pm]=0$ （這是因為 $[L^2, \vec{L}]=0$）

implication：

$$L^2(L_\pm Y_{lm}) = L_\pm(L^2 Y_{lm}) = L_\pm \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$
$$= \hbar^2 l(l+1)(L_\pm Y_{lm})$$

這表示 $L_\pm Y_{lm}$ 仍是 $\hat{L}^2$ 之 eigenstate，且 eigenvalues 仍是 $\hbar^2 l(l+1)$.

② $$[L_\pm, L_z] = [L_x \pm i L_y, L_z] = \underbrace{[L_x, L_z]}_{-i\hbar L_y} \pm i\underbrace{[L_y, L_z]}_{\pm i(i\hbar L_x)}$$

$$= -i\hbar L_y \mp \hbar L_x = \mp\hbar(L_x \pm i L_y) = \mp\hbar L_\pm$$

$\Rightarrow \therefore$ $L_z L_+ = L_+ L_z + \hbar L_+$

因此 $$L_z(L_+ Y_{lm}) = L_+ \underbrace{L_z Y_{lm}}_{m\hbar Y_{lm}} + \hbar(L_+ Y_{lm})$$

$$= \hbar(m+1)(L_+ Y_{lm})$$

$\therefore$ $L_+ Y_{lm}$ 為 $\hat{L}_z$ 之 eigenstate，且 eigenvalue 為 $(m+1)\hbar$

$$L_+ Y_{lm} \propto Y_{l,m+1}$$

同理，$\because$ $L_z L_- = L_- L_z - \hbar L_-$

$$\therefore L_- Y_{lm} \propto Y_{l,m-1}$$

∴ $\hat{L}_\pm$ 的作用確實很像梯子：

$l\ m+1$

$l\ m$ $\uparrow L_+$

$l\ m-1$ $\downarrow L_-$

L_+：向上爬一格

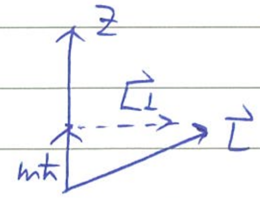
L_-：向下……

數學上，這表示 $L_\pm Y_{lm} = C_\pm(l,m)\, Y_{l,m\pm1}$

(iii) 向量算符的相加及 $\hat{L}^2$ 之 eigenvalues

上述之"梯子"並不是無限長的，這是因為 L_z 之 eigenvalue：$m\hbar$ 只是 $\vec{L}$ 在 z 軸之投影。

以古典向量的角度來看，∵ $\vec{L} = L_z\hat{z} + \vec{L}_\perp$



∴ $(m\hbar)^2 \le L^2 = \hbar^2 l(l+1)$

因此，$-\sqrt{l(l+1)} \le m \le \sqrt{l(l+1)}$ ---(i)

換句話說

m 的上下限為 $\pm\sqrt{l(l+1)}$

當"="成立時，$L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 = 0$，$L_x = L_y = 0$

但是在量子物理中，L_z, L_x, L_y 皆為算符且不互相 commute，故 L_x, L_y 不能同時為 0。

事實上，$L_x = L_y = 0$ 應取代為 $\hat{L}_x\psi = \hat{L}_y\psi = 0$

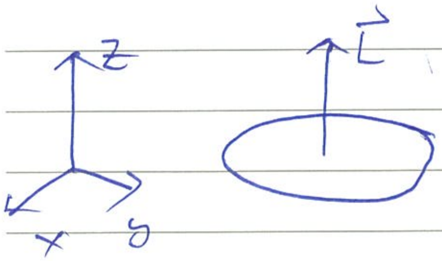
然而，∵ $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ ∴ $\hat{L}_z\psi = 0$，如此

$(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2)\psi = (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)\psi = 0$ 不合 (除非 $\hat{L}^2, \hat{L}_z =$

∴而式中之上、下限 $\pm\sqrt{l(l+1)}$ 並不可以達到。

這背後的根本基礎是測不準原理：

∵ $L_x, L_y = 0$ 時， $\vec{L} = L_z\hat{z}$



質點必須完全在 xy plane
(如左圖所示) 運動！

而這對應到 $\Delta z = 0$, $\Delta p_z = 0$
$(p_z = 0)$

此與 $\Delta z \, \Delta p_z \geq \hbar/2$ 不合！

為了得到 m 的正確上、下限，我們必須重新分析。

首先 $L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2$

$$= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) + i[L_x, L_y]$$

$$= L_+L_- - \hbar L_z$$

∴當 $\hbar \neq 0$ 時 $L^2 - L_z^2 + \hbar L_z = L_+L_-$

而依據以下所將說明的 lemma $\langle O^+O \rangle \geq 0$

可知在量子力學中上、下限由 $L^2 - L_z^2 + \hbar L_z \geq 0$ 決定

而非古典的 $L^2 - L_z^2 \geq 0$！多的一項 $\hbar L_z$ 來自於 $\hbar \neq 0$

NO.
DATE 11-12

利用另一個有用的 relation $[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$，也可改寫為

$$L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \quad — (5)$$

注意，$Y_{\ell m} = Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ （對 $Y_{\ell m}$ 而言，只要積 (θ, ϕ)）

所以 $$\langle L^2 \rangle_{\ell m} = \underbrace{\int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi}_{\text{常記為 } \int d\Omega} \; Y_{\ell m}^*(\theta,\phi) \, \hat{L}^2 \, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

↑ 稱為立體角

以下我們說明 Lemma $\langle O^+ O \rangle \geq 0$

依據 Hermitian operator 的定義

$$\int d\Omega \, (\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 = \int d\Omega \, \psi_1^* A^+ \psi_2 \quad — (6)$$

或是 $\int d\Omega \, (\hat{A}^+ \psi_1)^* \psi_2 = \int d\Omega \, \psi_1^* A \psi_2$

$\because$ L_x, L_y, L_z 皆為 Hermitian（如：$L_z = x p_y - y p_x$，$L_z^+ = p_y^+ x^+ - p_x^+ y^+ = x p_y - y p_x = L_z$）

$$\therefore \int d\Omega \, (L_x \psi_1)^* \psi_2 = \int d\Omega \, \psi_1^* L_x \psi_2$$

取 $\psi_1 = Y_{\ell m}$，$\psi_2 = \hat{L}_x Y_{\ell m}$

可知 $$\int d\Omega \, Y_{\ell m}^* \hat{L}_x^2 Y_{\ell m} = \int d\Omega \, (\hat{L}_x Y_{\ell m})^* \underbrace{(L_x Y_{\ell m})}_{\psi_2}$$

$$= \int d\Omega \, |\psi_2|^2 \geq 0$$

同理 $\int d\Omega \, Y_{\ell m}^* \hat{L}_y^2 Y_{\ell m} \geq 0$，$\int d\Omega \, Y_{\ell m}^* \hat{L}_z^2 Y_{\ell m} \geq 0$

因此，$$\int d\Omega \, Y_{\ell m}^* \hat{L}^2 Y_{\ell m} \geq 0 \quad — (7)$$

注意：古典上，∵ 數字$^2 \geq 0$ 是顯然的，所以測量值$^2 \geq 0$ 是顯而易見的。但在量子中，算符^2（如 $L_x^2, \ldots$）並不一定 ≥ 0！（除非其為 Hermitian operator），更廣的說 $\langle \hat{O}^+ \hat{O} \rangle$ 才為正！（見以下 L_+L_- 之例）

⑦式告訴我們 $l(l+1) \geq 0$ ∴ l 可取為正的，$l \geq 0$

（若 $l<0$，$l=-l_0$，$l_0>0$，則 $l(l+1)=(-l_0)(-l_0+1)$
$=l_0(l_0-1)$，可以令 $l'=l_0-1$，則 $l(l+1)=l'(l'+1)$，$l' \geq 0$）

在⑥式中，我們也可以令 $\hat{A}=L_x-iL_y=L_-$

則 $\hat{A}^+=L_x+iL_y=L_+$

取 $\psi_2=\hat{A}Y_{lm}=\hat{L}_-Y_{lm}$，$\psi_1=Y_{lm}$，$L_+=\hat{A}^+$

則⑥式 $\Rightarrow \underbrace{\int d\Omega\,(\hat{L}_-Y_{lm})^*(\hat{L}_-Y_{lm})}_{\displaystyle \parallel} = \int d\Omega\, Y_{lm}^* \hat{L}_+\hat{L}_- Y_{lm}$

$$\int d\Omega |\hat{L}_- Y_{lm}|^2 \geq 0$$

∴ $\int d\Omega\, Y_{lm}^* \hat{L}_+\hat{L}_- Y_{lm} \geq 0$（此為⑦式之一個更廣的式子）
L ... ⑧

利用④式 $\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}^2-\hat{L}_z^2+\hbar L_z$

∴ $\int d\Omega |\hat{L}_-Y_{lm}|^2 = [\hbar^2 l(l+1)-\hbar^2m^2+\hbar^2 m]\int d\Omega |Y_{lm}|^2 \geq 0$ ... ⑧a

（∵ $\hat{L}^2 Y_{lm}=\hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$，$\hat{L}_z Y_{lm}=m\hbar Y_{lm}$）

$\therefore \ \ell(\ell+1) \geq m^2 - m = m(m-1) \ \ --- \ ⑨$

同理, 若取 $\hat{A} = L_+$, $\hat{A}^+ = L_-$

$$\psi_2 = \hat{A} Y_{\ell m} = \hat{L}_+ Y_{\ell m}, \quad \psi_1 = Y_{\ell m}$$

⑥式 $\Rightarrow \int d\Omega \, |\hat{L}_+ Y_{\ell m}|^2 = \int d\Omega \, Y_{\ell m}^* \hat{L}_- \hat{L}_+ Y_{\ell m} \geq 0$

$$\underset{⑤式}{=} \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m^2 - m] \int d\Omega \, |Y_{\ell m}|^2 \geq 0 \quad — ⑩$$

$\therefore \ \ell(\ell+1) \geq m^2 + m \ — ⑩$

⑨式 $\quad m^2 - m - \ell^2 - \ell \leq 0 \Rightarrow (m+\ell)(m-\ell-1) \leq 0$

$$-\ell \leq m \leq \ell + 1$$

⑩式 $\quad m^2 + m - \ell^2 - \ell \leq 0 \Rightarrow (m-\ell)(m+\ell+1) \leq 0$

$$-\ell - 1 \leq m \leq \ell$$

取交集 $\therefore \ -\ell \leq m \leq \ell$

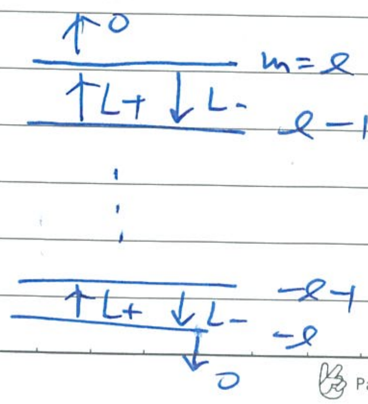
$\because m$ 為整數, 上式表示 ℓ 一定是整數, 否則 $L_\pm$ 可以將$|m|$帶到甚大於ℓ之值, 這是不合理的! ($\because L_z$ 之值 < (L^2)值!)

且當 $m = -\ell$ 時 $\int d\Omega \, |\hat{L}_- Y_{\ell m}|^2 = \hbar^2 [\underbrace{\ell(\ell+1) - m^2 + m}_{0}] \int d\Omega \, |Y_{\ell m}|^2 = 0$

$\therefore \ \hat{L}_- Y_{\ell m} = 0$

同理 $m = \ell$ 時, $\hat{L}_+ Y_{\ell m} = 0$

因此, 梯子到了 $m = \pm\ell$ 時, 即切斷



11-15

Spectroscopic notation: s, p, d, f, g, ... (書上, 用大寫)

結論: $\hat{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$, $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$

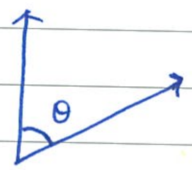
$\hat{L}_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}$, $-\ell \le m \le \ell$

m = integers

$\hat{L}_\pm Y_{\ell m} = C_\pm(\ell, m)\, Y_{\ell, m\pm 1}$

(這是 $c=0$ 之情形, ℓ 稱為 orbital angular momentum)

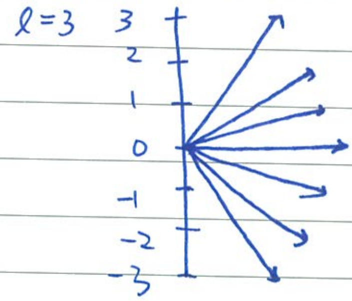
Space quantization



θ不是任意的!

利用 (8a) 及 (9a), 可求出,

$$C_\pm(\ell, m) = \hbar\sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)}$$



(iv) $Y_{\ell m}$ (eigenfunctions) 之求法

先由 $Y_{\ell,\ell}(\theta,\phi) = e^{i\ell\phi}\,\Theta_{\ell\ell}(\theta)$

及 $L_+ Y_{\ell\ell} = 0$　　$\hat{L}_+ = \hbar e^{+i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$

求出 $Y_{\ell\ell}(\theta,\phi) = \underbrace{K}_{\text{常數}}(\sin\theta)^\ell e^{i\phi\ell}$ ← 由 normalization 決定

再由 $L_- Y_{\ell\ell} = C_-(\ell,\ell)\, Y_{\ell,\ell-1}$　求出 $Y_{\ell,\ell-1}$

$L_- Y_{\ell,\ell-1} = C_-(\ell,\ell-1)\, Y_{\ell,\ell-2}$　$\cdots$ $Y_{\ell,\ell-2}$

⋮

alternative: 由 $Y_{\ell,-\ell}(\theta,\phi) = e^{-i\ell\phi}\,\Theta_{\ell,-\ell}(\theta)$ 出發

利用 $L_- Y_{\ell,-\ell} = 0$　　$\hat{L}_- = \hbar e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$

求出 $\Theta_{\ell,-\ell}(\theta)$

再利用 $\hat{L}_+$ 向上"爬"，求出其他 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$！
梯子

在 do，我們不仔細推導 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$，只列出重要結果如下：

① $$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = (-1)^m e^{im\phi}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\right]^{1/2} P_\ell^m(\cos\theta)$$

$P_\ell^m(u) \equiv$ associate Legendre polynomials

$$\equiv (-1)^{\ell+m}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\frac{(1-u^2)^{-m/2}}{2^\ell \ell!}\left(\frac{d}{du}\right)^{\ell-m}(1-u^2)^\ell$$

例：$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{i\phi}\sin\theta$

$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\cos\theta$

$Y_{1,-1} = +\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{-i\phi}\sin\theta$

(見 Fig 12-3
8-4)

② $$P_\ell^{-m}(u) = (-1)^m\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}P_\ell^m(u)$$

$$Y_{\ell\,-m}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_{\ell m}^*(\theta,\phi)$$

見背面

③ $$\int d\Omega = \int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta\, d\theta$$

$$\int d\Omega\; Y_{\ell m}^*(\theta,\phi)\, Y_{\ell',m'}(\theta,\phi) = \delta_{\ell,\ell'}\,\delta_{m,m'}$$

(正交)

且 $Y_{\ell,m}$ 形成一基底，任意 $f(\theta,\phi)$

$$f(\theta,\phi) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} C_{\ell m}\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$C_{\ell m} = \int d\Omega\; Y_{\ell m}^*(\theta,\phi)\, f(\theta,\phi)$$

11-18

$\because Y_{1,1}(\theta,\phi)+Y_{1,-1}(\theta,\phi)=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\times 2i\sin\theta\sin\phi$

$Y_{1,0}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$

$\therefore \tilde{Y}_{1,1}(\theta_x,\phi_x)=\frac{1}{2i}(Y_{1,1}+Y_{1,-1})-\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{1,0}$

換句話說，以 X軸為 quantization axis 之 $l=1$, $m=1$ 狀態為以 Z軸為 quantization axis 之態(狀) $Y_{1,1}$, $Y_{1,-1}$, 及 $Y_{1,0}$ 的組合（皆為 $l=1$）

在 $\tilde{Y}_{1,1}$ 中找到 $l=1$, $m=1$ 之机率 $=\left|\frac{1}{2i}\right|^2=\frac{1}{4}$

$l=1$, $m=-1$ 〃 $=\left|\frac{-1}{2i}\right|^2=\frac{1}{4}$

$l=1$, $m=0$ 〃 $=\left(\frac{-1}{\sqrt{2}}\right)^2=\frac{1}{2}$

Implication：Z軸轉動時，l 不變，但 m 可以改變。

$\because$ H 不隨 Z軸轉改變 故 E 不與 m 有關

④ Classical limit

先複習所謂的 space quantization.

古典中，$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$，$\vec{L}\perp\vec{r}$ 及 $\vec{p}$

$\Uparrow$

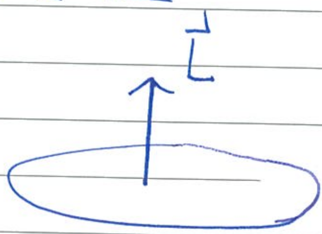
若是守恆的

two salient points

(4a) $\vec{L}$ 是一個方向固定的向量，L_x, L_y 及 L_z 可以精確的測得

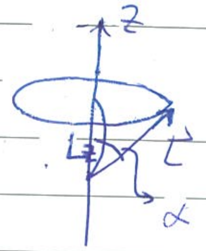
(4b) 運動軌跡與 $\vec{L}$ 垂直

如：



在量子中，$\vec{L}$ 不再可視為一個方向固定向量：

給定一個方向（z軸），被允許的狀態為：



$L_z = l\hbar,\ (l-1)\hbar,\ \ldots\ldots,\ -l\hbar$

L_x, L_y 皆不確定，但 $L^2 = l(l+1)\hbar^2$

因此，這些狀態約可視為左圖的情形：$\vec{L}$ 在一個 cone 上作 fluctuation！

其中 $\cos\alpha = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} = \frac{l}{\sqrt{l(l+1)}},\ \frac{l-1}{\sqrt{l(l+1)}},\ \ldots\ldots,\ \frac{-l}{\sqrt{l(l+1)}}$

當 l 小時，這些狀態與古典完全不像！（因為 $\vec{L}$ 並不是固定的！）

只有在 $l \to \infty$ 時，$m = m_{max} = l$ (or $-l$) 時，

$$\cos\alpha = \frac{1}{\sqrt{1+1/l}} \to 1$$

此時 $L^2 \cong l^2\hbar^2 = L_z^2$，所以，$\vec{L}$ 約可視為一指向在 z 軸之向量！ ⇒ 與 4a 吻合.

而 $\because |Y_{ll}(\theta,\varphi)|^2 \propto \sin^{2l}\theta$ 在 $l \to \infty$ 時，只侷限在 $\theta = \pi/2$

即與 z軸垂直之 xy plane 上

這又與 4b 吻合，所以 $|m| = l$，在 $l \to \infty$ 之狀態為古典之對應！

其他 $|m| < l$ 之狀態 (keep $\frac{m}{l}$ fixed)，如 所示，其 $\alpha \neq 0$ ($\theta \neq \pi/2$)

$\vec{L}$ 並不可視為固定的向量，因此不是古典之對應.

若 $\int d\Omega\, |f(\theta,\phi)|^2 = 1$

則 $|C_{\ell m}|^2$ = 找到 L^2, L_z 各為 $\ell(\ell+1)\hbar^2$, $m\hbar$ 之机率.

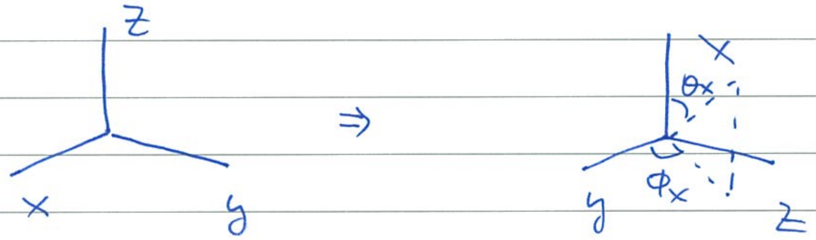
因此, 找到角動量為 $\hbar^2(\ell+1)\ell$ 之机率

$$= \sum_{m=-\ell}^{\ell} |C_{\ell m}|^2$$

註, 若只考慮 ϕ
則任意 $f(\phi) = \sum_m a_m \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$

且 $\langle L_z \rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} m\hbar\, |C_{\ell m}|^2$

例: 如果我們取 x 軸為 quantization axis



可以得到 $\tilde{Y}_{1,1}(\theta_x,\phi_x)$, 則 $\tilde{Y}_{1,1}(\theta_x,\phi_x)$ 與 $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ 之關係如何?

首先 (θ,ϕ) 與 (θ_x,ϕ_x) 之關係如下:

$$\sin\theta\cos\phi = \cos\theta_x \quad (\text{page } 11\text{-}3)$$
$$\sin\theta\sin\phi = \sin\theta_x\cos\phi_x$$
$$\cos\theta = \sin\theta_x\sin\phi_x$$

$$\therefore \tilde{Y}_{1,1}(\theta_x,\phi_x) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{i\phi_x}\sin\theta_x = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\cos\phi_x\sin\theta_x + i\sin\phi_x\sin\theta_x\right)$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\sin\theta\sin\phi + i\cos\theta\right)$$