《高等量子力学》第 19 讲

第六章(*Sakurai* 书第 4 章和第 6 章)：对称性与守恒律

对称性是一个体系最重要的性质。

1.守恒量

定义：**若力学量的平均值不随时间变化**

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt}=0,$$

则称力学量 F 为守恒量。

在什么情况下力学量是守恒量呢？由

$$\langle F\rangle=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle,$$

在 *Schroedinger* 绘景，利用方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=\hat{H}|\psi\rangle$，有

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt}=\frac{\partial\langle\psi|}{\partial t}\hat{F}|\psi\rangle+\langle\psi|\hat{F}\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{F},\hat{H}]\rangle。$$

若力学量 $\hat{F}$ 与 $\hat{H}$ 对易，则 $\hat{F}$ 为守恒量。例如：

a）自由粒子体系，$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$，有 $\left[\hat{\vec{p}},\hat{H}\right]=0$，动量守恒；

b）一般体系，$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+V(\vec{x})$，有 $\left[\hat{\vec{p}},\hat{H}\right]\neq 0$，动量不守恒；

c）中心场，$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{\vec{L}}^2}{2mr^2}+V(r)$，有

$\left[\hat{\vec{L}}^2,\hat{H}\right]=\left[\hat{L}_i,\hat{H}\right]=0$，轨道角动量与任意分量守恒；

d）总有 $\left[\hat{H},\hat{H}\right]=0$，能量守恒。

一个力学量是否为守恒量，由体系的 $\hat{H}$ 决定。

守恒量的性质:

a）守恒力学量在任意态的平均值与时间无关（定义）;

b）守恒力学量在任意态的取值几率与时间无关

证明：对于守恒力学量 F,

$$\left[\hat{F},\hat{H}\right]=0,$$

$\hat{F}$，$\hat{H}$ 有共同完备本征矢 $|n\rangle$,

$$\hat{F}|n\rangle=F_n|n\rangle,\quad \hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle$$

对于任意态

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n C_n(t)|n\rangle,\qquad C_n(t)=\langle n|\psi(t)\rangle\text{。}$$

因为

$$\frac{d}{dt}C_n(t)=\langle n|\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle n|\hat{H}|\psi(t)\rangle=\frac{E_n}{i\hbar}\langle n|\psi(t)\rangle=\frac{E_n}{i\hbar}C_n(t),$$

解

$$C_n(t)=C_n(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt},$$

故 $\hat{F}$ 取值为 F_n 的几率 $|C_n(t)|^2=|C_n(0)|^2$ 与时间无关。

推论:

a）若体系初始时处于守恒量的本征态，则恒处于该本征态;

b）若体系初始时不处于守恒量的本征态，则恒不处于该守恒量的本征态;

c）非守恒力学量的本征态在演化以后不再是这些力学量的本征态。只有当体系初始时处于守恒量的本征态，则恒处于该本征态。故应该用**守恒力学量的量子数（好量子数）来描述状态**。这是分波法求解中心场中散射问题的基础。

注意两个概念:

守恒量：　守恒量在任意态中的平均值及取值几率不随时间变化

定态：　　而任意力学量在定态中的平均值及取值几率不随时间变化。

2.对称性与守恒量

什么是量子力学中的对称性？定义变换$\hat{S}$，

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \hat{S}|\psi\rangle,$$

变换前态$|\psi\rangle$满足 *Schroedinger* 方程，$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$，如果变换后的态满足同一方程，即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'\rangle = \hat{H}|\psi'\rangle,$$

称体系在变换$\hat{S}$下具有不变性，或对称性。

有对称性的条件是什么？如果$\hat{S}$不含时间，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'\rangle = i\hbar\hat{S}\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{S}\hat{H}|\psi\rangle = \hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}\hat{S}|\psi\rangle = \hat{H}'|\psi'\rangle,$$

要求$\hat{H}' = \hat{H}$的条件是

$$\hat{S}\hat{H} = \hat{H}\hat{S}, \qquad \left[\hat{S},\hat{H}\right] = 0,$$

故**体系具有$\hat{S}$对称性的条件是$\hat{S}$与$\hat{H}$对易**。

对称性与守恒量的关系：

对于对称变换$\hat{S}$，如果$\hat{S} = \hat{S}^{+}$，$\hat{S}$为力学量，则$\left[\hat{S},\hat{H}\right]=0$表明$\hat{S}$本身就是守恒力学量；若$\hat{S} \neq \hat{S}^{+}$，但$\hat{S}$由某一力学量$\hat{F} = \hat{F}^{+}$生成，$\hat{S}(\hat{F})$，则$\left[\hat{S},\hat{H}\right]=0$意味$\left[\hat{F},\hat{H}\right]=0$，表明生成元$\hat{F}$为守恒力学量。

1）空间平移不变与动量守恒

空间平移算符$\hat{S} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{x}}$不含时间，不是厄米算符，而是由动量算符$\hat{\vec{p}}$生成。若体系具有空间平移不变性，$\left[\hat{S},\hat{H}\right]=0$，则$\left[\hat{p},\hat{H}\right]=0$，导致动量守恒。

2）空间旋转不变与角动量守恒

空间转动算符 $\hat{S}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{J}}\cdot\vec{e}_n\varphi}$ 不含时间，不是厄米算符，而是由角动量算符 $\hat{\vec{J}}$ 生成。若体系具有空间转动不变性，$\left[\hat{S},\hat{H}\right]=0$，则 $\left[\hat{\vec{J}},\hat{H}\right]=0$，导致角动量守恒。

3）空间反演不变与宇称守恒

（在坐标表象）定义空间反演变换 $\hat{I}$：

$$\text{算符：}\quad \vec{r}\to\vec{r}'=\hat{I}\vec{r}\hat{I}^{-1}=-\vec{r}\ ,$$

$$\text{态：}\quad \psi\left(\vec{r}\right)\to\psi'\left(\vec{r}\right)=\hat{I}\psi\left(\vec{r}\right)=\psi\left(-\vec{r}\right)$$

是空间突变，不含时间。

对于任意态 $\psi(\vec{r})$ 和 $\varphi(\vec{r})$，有

$$\int d^3\vec{r}\psi^*\left(\vec{r}\right)\left(\hat{I}\varphi\left(\vec{r}\right)\right)=\int d^3\vec{r}\psi^*\left(\vec{r}\right)\varphi\left(-\vec{r}\right)=\int d^3\vec{r}\psi^*\left(-\vec{r}\right)\varphi\left(\vec{r}\right)=\int d^3\vec{r}\left(\hat{I}\psi\left(\vec{r}\right)\right)^*\varphi\left(\vec{r}\right)$$

所以 $\hat{I}$ **为厄米算符，表示一力学量，称为宇称**。

由

$$\hat{I}\psi\left(\vec{r}\right)=\psi\left(-\vec{r}\right),\quad \hat{I}^2\psi\left(\vec{r}\right)=\hat{I}\psi\left(-\vec{r}\right)=\psi\left(\vec{r}\right),$$

$\hat{I}^2$ 的本征值为 1，宇称算符 $\hat{I}$ 的本征值为 1 和 -1，

本征态为 $\hat{I}\psi_s\left(\vec{r}\right)=\psi_s\left(\vec{r}\right)=\psi_s\left(-\vec{r}\right)$ 和 $\hat{I}\psi_a\left(\vec{r}\right)=-\psi_a\left(\vec{r}\right)=\psi_a\left(-\vec{r}\right)$。

若体系具有空间反演不变性，$\left[\hat{I},\hat{H}\right]=0$，则

a）宇称守恒；

b）宇称 $\hat{I}$ 与 $\hat{H}$ 有共同本征态。

例如：$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})$，若势有空间反演不变性$V(-\vec{r})=V(\vec{r})$，则哈密顿量有空间反演不变性 $\hat{I}\hat{H}\hat{I}^{-1}=\hat{H}$，有宇称守恒，宇称 $\hat{I}$ 与 $\hat{H}$ 有共同本征态。

例题：

$$\hat{\vec{L}}=\vec{r}\times\hat{\vec{p}},\quad \hat{\vec{p}}=-i\hbar\vec{\nabla}$$

$$\hat{I}\hat{\vec{L}}\hat{I}^{-1}=\hat{I}\vec{r}\hat{I}^{-1}\times\hat{I}\hat{\vec{p}}\hat{I}^{-1}=\vec{r}\times\hat{\vec{p}}=\hat{\vec{L}},\quad \left[\hat{I},\hat{\vec{L}}\right]=0,\quad \left[\hat{I},\hat{\vec{L}}^2\right]=0$$

故 $\hat{I}$ 与 $\hat{\vec{L}}^2$，$\hat{L}_z$ 有共同本征态。$\hat{\vec{L}}^2$，$\hat{L}_z$ 的共同本征态是球谐函数

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=N_{lm}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi},$$

$$P_l^{|m|}(\cos\theta)=\frac{1}{2^l l!}\left(1-\cos^2\theta\right)^{|m|/2}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{l+|m|}\left(\cos^2\theta-1\right)^l$$

在 $\hat{I}$ 变换 $\vec{r}\to-\vec{r}$ 下，

$$r\to r,\quad \theta\to\pi-\theta,\quad \varphi\to\pi+\varphi,\quad \cos\theta\to-\cos\theta$$

$$P_l^{|m|}(\cos\theta)\to(-1)^{l+|m|}P_l^{|m|}(\cos\theta),\quad e^{im\varphi}\to(-1)^m e^{im\varphi}=(-1)^{|m|}e^{im\varphi}$$

故

$$\hat{I}Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^{l+2|m|}Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^l Y_{lm}(\theta,\varphi),$$

$\hat{I}$ 与 $\hat{\vec{L}}^2$，$\hat{L}_z$ 的共同本征态就是球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$，$\hat{I}$ 的本征值为 $I=(-1)^l$。

问题：为什么在经典力学中无宇称这一力学量？

回答：在经典力学中无突变，不能从 $\vec{r}$ 突变到 $-\vec{r}$。

3. 全同粒子对称性

全同粒子：内禀性质（质量，电荷，自旋等）完全相同的粒子。

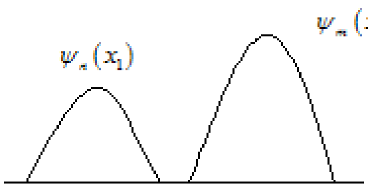
经典力学中粒子的内禀力学量是连续变化的，例如两个粒子的质量可以无限接近，但不会全同，总是可以区分的。故在经典力学中无全同粒子的概念。

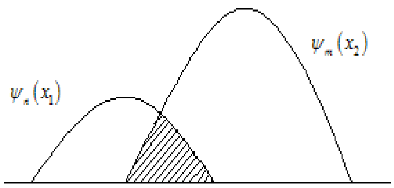
量子力学中物理量的取值可以是分离值，要么完全相同，要么完全不同。因此具有全同粒子的问题。

那么怎么区分全同粒子呢？

1）全同性原理

在经典力学中即使有“全同”粒子，也可以通过轨道区分“全同”粒子。但在量子力学中，无轨道，状态用波函数描述。考虑两个无相互作用的全同粒子，设单粒子状态为$\psi_n(x)$，两全同粒子的波函数不重叠时，可区分全同粒子。波函数重叠时，若在重叠区内发现一个粒子，不能区分它是第一个还是第二个粒子，即波函数重叠时不可区分全同粒子。交换两个粒子位置时，即将$\{\psi_n(x_1),\psi_m(x_2)\}\to\{\psi_n(x_2),\psi_m(x_1)\}$时，在重叠区内发现粒子的几率分布相同，即状态不改变，$\{\psi_n(x_1),\psi_m(x_2)\}$与$\{\psi_n(x_2),\psi_m(x_1)\}$描述的是体系的同一状态。





严格来说，波函数在全空间都是重叠的。故有**全同性原理：交换两个全同粒子不改变体系的状态。**

问题：全同性原理对态有什么限制呢？

2）波函数的交换对称性

对于包含N粒子体系的态$|\ldots i\ldots j\ldots\rangle$，定义交换算符$\hat{P}_{ij}$：

$$\hat{P}_{ij}|\ldots i\ldots j\ldots\rangle=|\ldots j\ldots i\ldots\rangle=\lambda|\ldots i\ldots j\ldots\rangle,$$

第二个等式用到了全同性原理，说明**全同粒子体系的态必是交换算符$\hat{P}_{ij}$的本征态**。因为

$$\hat{P}_{ij}^2|\ldots i\ldots j\ldots\rangle=\hat{P}_{ij}|\ldots j\ldots i\ldots\rangle=|\ldots i\ldots j\ldots\rangle,$$

所以 $\hat{P}_{ij}^2$ 的本征值为 1，$\hat{P}_{ij}$ 的本征值 $\lambda=\pm1$。即

$$\hat{P}_{ij}\left|\ldots i\ldots j\ldots\right\rangle=\pm\left|\ldots i\ldots j\ldots\right\rangle。$$

交换对称性：全同性原理要求全同粒子体系的波函数在交换任意两个粒子时必须是对称或者是反对称的。

问题：全同粒子体系波函数的对称性是否随时间改变呢？

由于全同粒子体系的 $\hat{H}$ 满足交换对称性，

$$\hat{P}_{ij}\hat{H}\hat{P}_{ij}^{-1}=\hat{H},\qquad \left[\hat{P}_{ij},\hat{H}\right]=0,$$

则 $\hat{P}_{ij}$ 是守恒量。若体系在初始时处于 $\hat{P}_{ij}$ 的某个本征态（对称态或者反对称态），则恒处于该本征态。即全同粒子体系波函数的对称性不随时间改变。

实验表明，交换对称性由自旋决定：对于玻色子（自旋为整数的粒子）组成的全同粒子系统，状态是交换对称的，对于费米子（自旋为半整数的粒子）组成的全同粒子系统，状态是交换反对称的。

问题：全同粒子系统的状态一方面要满足交换对称性，另一方面要满足 *Schroedinger* 方程，怎样构造满足二者的态？