幺正算符和体系对称性

幺正算符

如果算符 $\hat{U}$ 的逆算符$\hat{U}^{-1}$ 存在，且对任意 ψ, φ 满足

$$\int \psi^* \varphi d\tau = \int \left(\hat{U}\psi\right)^* \left(\hat{U}\varphi\right) d\tau$$

则称算符$\hat{U}$为幺正算符（Unitary）

幺正算符相当于对波函数做幺正变换，而不改变波函数的内积，保持了波函数的正交归一性(经典物理中坐标变换)

求证：若$\hat{U}$是幺正算符，则 $\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = I, \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$

求证：若 $\hat{U}$是幺正算符，则 $\hat{U}^+$也是幺正算符

求证：若 $\hat{U}_1$，$\hat{U}_2$ 是幺正算符，则 $\hat{U}_1\hat{U}_2$ 也是幺正算符

幺正算符和厄密算符的关系

$\hat{U}=I$ 显然是一个平凡的幺正算符。设 $\hat{U}$ 无限接近于单位算符I，则可以用一个极小参量 ε （连续变化）表示 $\hat{U}$：

$$\hat{U}=I+i\varepsilon\hat{F},\quad (\varepsilon\to 0)$$

利用 $\hat{U}$ 的幺正性得(省略 ε 的高次项)：

$$\hat{U}^{+}\hat{U}=\left(I-i\varepsilon\hat{F}^{+}\right)\left(I+i\varepsilon\hat{F}\right)=1+i\varepsilon\left(\hat{F}-\hat{F}^{+}\right)=I$$

于是 $\hat{F}=\hat{F}^{+}$ ， 也就是说 $\hat{F}$ 必须是一个厄密算符。我们称 $\hat{F}$ 是 $\hat{U}$ 的生成元（generator）

如果 $\hat{U}$ 不是无限接近I的，我们可以通过n次无限小的幺正操作实现任意有限大小(参量a)的幺正变换：

$$\hat{U}=\lim_{n\to\infty}\left(I+i\frac{a}{n}\hat{F}\right)^{n}=e^{ia\hat{F}}$$

幺正算符和厄密算符

算符出现在指数上也可以通过泰勒展开式来理解：

$$\hat{U}=e^{ia\hat{F}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(ia)^{n}\hat{F}^{n}$$

例：时间演化算符就是一个幺正算符

$$\hat{U}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}},\quad \hat{U}^{-1}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}$$

$$\psi(\vec{r},t)=\hat{U}(t)\psi(\vec{r},0)$$

$$\int\psi^{*}(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)d\vec{r}=\int\left(e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(\vec{r},0)\right)^{*}e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(\vec{r},0)d\vec{r}$$

$$=\int\psi^{*}(\vec{r},0)\left(e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\right)^{+}e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(\vec{r},0)d\vec{r}=\int\psi^{*}(\vec{r},0)\psi(\vec{r},0)d\vec{r}=1$$

幺正算符和幺正变换

用幺正算符实现的波函数和算符的变换称为幺正变换：

$$\begin{cases} \psi \rightarrow \psi' = \hat{U}\psi \\ \hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+} \end{cases}$$

与经典物理中的坐标变换相似，**幺正变换不改变量子系统的物理内容**（运动方程、对易关系、平均值及概率系数）：

$$\hat{A}\psi = \varphi \quad \rightarrow \quad \hat{A}'\psi' = \varphi'$$

证： $\hat{A}'\psi' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+}\hat{U}\psi$

$$= \hat{U}\hat{A}\psi$$

$$= \hat{U}\varphi$$

$$= \varphi'$$

强调：这里的变换是波函数和算符同时变换，如果只变换波函数，则量子系统的物理内容就完全有可能改变

幺正变换实例–傅里叶变换

傅里叶变换可以看作是一种幺正变换：

$$\hat{U}\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\psi(x)=\varphi(p)$$

$$\hat{U}^{-1}\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp e^{\frac{i}{\hbar}px}\varphi(p)=\psi(x)$$

$$\int\psi^*(x)\psi(x)dx=\int\varphi^*(p)\varphi(p)dp=1$$

幺正变换实例–傅里叶变换

傅里叶幺正变换对动量算符的变换：

$$\hat{U}\frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{U}^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dxe^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{\hat{p}^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp'e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$$

幺正变换实例–傅里叶变换

傅里叶幺正变换对坐标算符的变换：

$$\hat{U}\hat{x}\hat{U}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} x \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp' e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$$

幺正变换实例–傅里叶变换

傅里叶幺正变换对哈密顿算符的变换：

$$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1} = \hat{U}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right]\hat{U}^{-1}$$

$$= \frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)$$

也就是说，在坐标表象中，哈密顿算符形式为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \qquad \begin{cases} \hat{p} \to -i\hbar\dfrac{d}{dx} \\ \hat{x} \to x \end{cases}$$

幺正变换到动量表象中后，其形式变为

$$\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right) \qquad \begin{cases} \hat{p} \to p \\ \hat{x} \to i\hbar\dfrac{d}{dp} \end{cases}$$

检查[x, p]对易关系

态和力学量的表象：

在量子力学中，描写量子态和力学量的方式不是唯一的。一种具体的方式称为一种表象

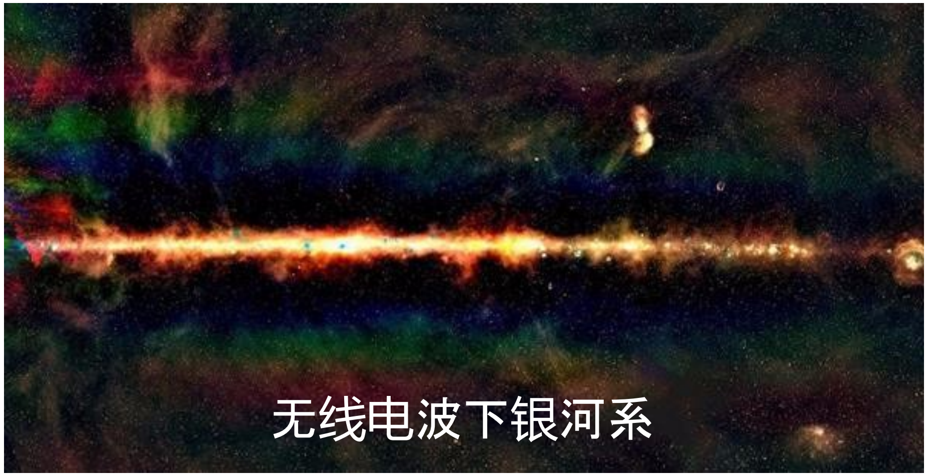
一维空间态的表象：

用$\psi(x,t)$来描写量子态是坐标表象，按动量本征函数展开：

$$\psi(x,t)=\int c(p,t)\varphi_p(x)dp, \qquad \varphi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$$

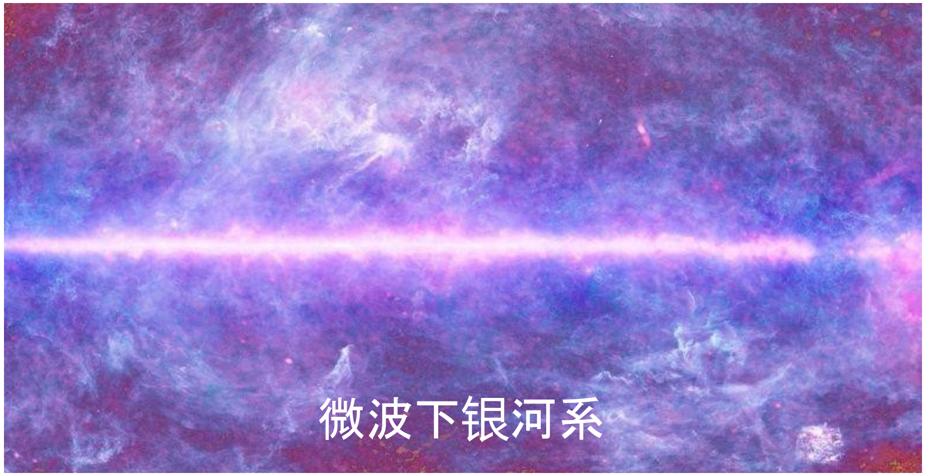
变换到了动量表象，$c(p,t)$称为动量表象中的“波函数”

$$c(p,t)=\int \varphi_p^*(x)\psi(x,t)dx, \qquad \varphi_p^*(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)$$

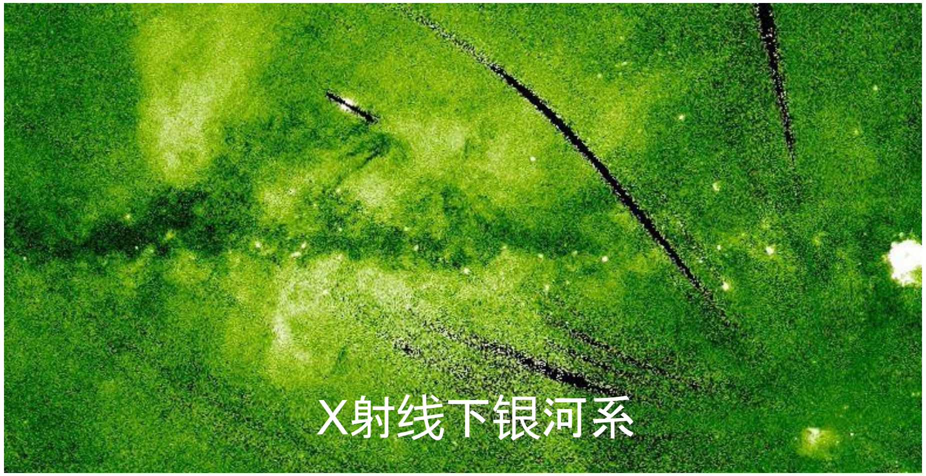


无线电波下银河系

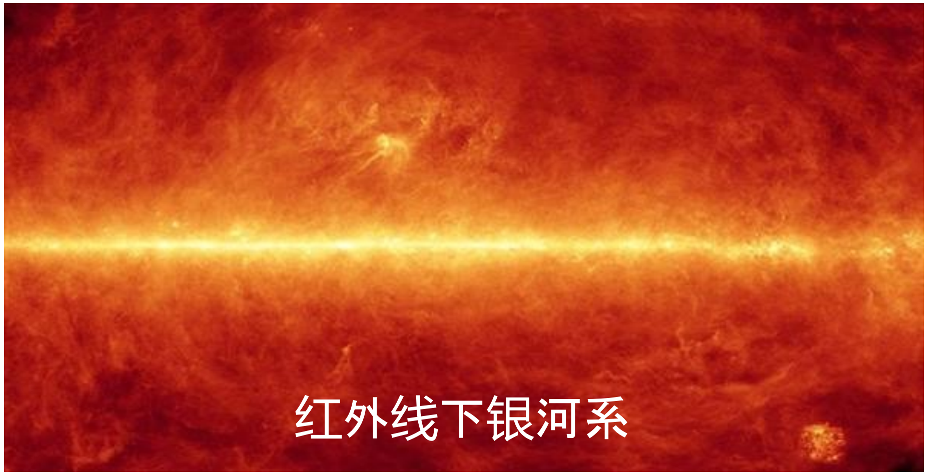
可见光下银河系



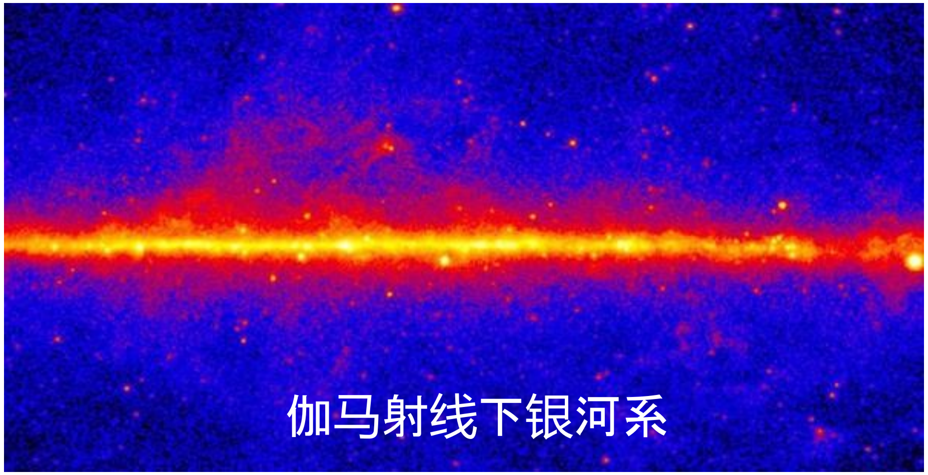
微波下银河系



X射线下银河系



红外线下银河系



伽马射线下银河系

坐标表象的优点：

1）容易根据具体的物理问题的要求写出波函数满足的边界条件，分束缚态和散射态；根据粒子的入射方向写出入射波、透射波和反射波

2）一些常见的势在坐标表象下是定域的

3）容易讨论量子力学和经典力学的关系

有些问题，如谐振子问题，动量表象和坐标表象的薛定鄂方程的形式相同，求解非常相似。

另一类问题，势只依赖于动量，不是坐标空间的定域势，则应在动量表象中求解

坐标空间中的定态薛定鄂方程：
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

动量空间中的定态薛定鄂方程：
$$\left[\frac{p^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\varphi(p)=E\varphi(p)$$

表象之间的变换是一种幺正变换

简谐振子的傅里叶变换

一维简谐振子的哈密顿算符：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

在坐标表性中，算符表达式为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

幺正变换到动量表象中后，其形式为

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2} m\hbar^2\omega^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2}$$

问：如何求解一维谐振子在动量表象中的薛定鄂方程？

幺正变换与系统对称性

前面说道，对波函数和算符同时进行幺正变换，量子力学不变。但如果只变换波函数，则量子力学可能改变

追问：把假设条件加强，如果只对波函数或算符二者其一进行幺正变换，而量子力学不变，会有什么物理后果？

首先证明二者是等价的。薛定鄂方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{H}\psi$$

对 ψ 进行幺正变换： $\psi'=\hat{U}\psi$

设幺正变换之后的波函数仍满足原薛定鄂方程：

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

幺正变换与系统对称性

即：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}\psi=\hat{H}\hat{U}\psi$$

用算符 $\hat{U}^{-1}$ 作用于方程两边，因为我们一般考虑的幺正算符都是与时间无关的，所以 $\hat{U}^{-1}$ 可以穿过时间微分作用于后边

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}\psi$$

与原薛定鄂方程作对比，同时注意到 ψ 是任意的薛定鄂方程的解，所以有

$$\hat{H}=\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}$$

也就是说，只对波函数进行幺正变换而量子力学不变，可以等效为只对系统算符（包括哈密顿算符）进行幺正变换而量子力学不变

幺正变换与系统对称性

哈密顿算符幺正变换不变的意义：

$$\hat{H}=\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}$$

$$\hat{U}\hat{H}=\hat{H}\hat{U}$$

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

$$\left[1+i\varepsilon\hat{F},\hat{H}\right]=0$$

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

$$\frac{d}{dt}\overline{F}=\overline{\left[\hat{F},\hat{H}\right]}=0$$

也就是说，如果哈密顿算符幺正变换不变，那么此幺正变换对应的生成元平均值在任何态下不随时间变化（是守恒量）

Noether定理：**每当量子系统存在一种对称性（幺正不变性），就相应的存在一个守恒律和守恒量**

时间均匀性和能量守恒

设时间幺正算符把波函数时间参数向未来平移（主动）τ：

$$\hat{U}(\tau)\psi(t)=\psi(t-\tau)$$

对变化后的波函数做泰勒展开：

$$\psi(t-\tau)=\psi(t)+\frac{d}{dt}\psi(t)(-\tau)+\frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}\psi(t)(-\tau)^2+\cdots$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\tau)^n}{n!}\left(\frac{d}{dt}\right)^n\psi(t)$$

利用薛定鄂方程（$\hat{H}$不含时）：

$$\frac{d}{dt}\psi(t)=\frac{\hat{H}}{i\hbar}\psi(t)$$

$$\left(\frac{d}{dt}\right)^n\psi(t)=\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^n\psi(t)$$

时间均匀性和能量守恒

于是：

$$\psi(t-\tau)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i\tau}{\hbar}\hat{H}\right)^{n}\psi(t)$$

$$=e^{\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}}\psi(t)$$

时间平移算符： $\hat{U}(\tau)=e^{\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}}$

可见时间算符的生成元为 $\hat{H}$，它当然是与自身对易的，也就是说系统的平均能量是个守恒量

$\boxed{\text{时间平移不变性} \Leftrightarrow \text{系统能量守恒}}$

空间均匀性和动量守恒

设空间幺正算符把波函数坐标平移（主动）$\vec{a}$：

$$\hat{U}(\vec{a})\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r}-\vec{a})$$

对变化后的波函数做泰勒展开：

$$\psi(\vec{r}-\vec{a})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\sum_{i=1}^{3}-a_i\frac{\partial}{\partial x_i}\right)^n\psi(\vec{r})$$

$$=e^{-\vec{a}\cdot\nabla}\psi(\vec{r})$$

$$=e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}}\psi(\vec{r})$$

空间平移算符： $\hat{U}(\vec{a})=e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\hat{\vec{p}}}$

空间平移算符的生成元为动量算符

空间平移不变性 $\Leftrightarrow$ 系统动量守恒

空间均匀性和动量守恒

波函数空间平移不变 ⟺ 哈密顿么正不变

动量-能量算符对易 ⟺ 系统动量守恒

显然，一般情况下动量-能量算符并不对易（氢原子中的电子、一维谐振子），但如果考虑的是孤立系统，则系统动量-能量算符一定对易（自由粒子、电子+氢原子核总系统）

自由粒子波包：平均动量守恒，动量的分布概率也守恒（也就是说 δp 不变），但各动量分波的传播速度不同，导致波包的 δx 随时间增大，形成波包的弥散（色散）

相比之下，光在真空中传播则没有色散现象

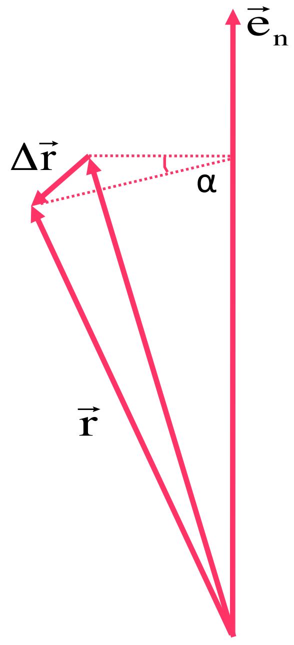
空间各向同性和角动量守恒

设空间转动算符把波函数绕 $\vec{e}_n$ 转动（主动）小角度 α：

$$\hat{U}(\vec{\alpha})\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r}-\Delta\vec{r}),\quad \vec{\alpha}\equiv\alpha\vec{e}_n$$

对变化后的波函数做泰勒展开：

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}-\Delta\vec{r}) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-\Delta\vec{r}\cdot\nabla)^n\psi(\vec{r})\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[-(\vec{\alpha}\times\vec{r})\cdot\nabla\right]^n\psi(\vec{r})\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[-\vec{\alpha}\cdot(\vec{r}\times\nabla)\right]^n\psi(\vec{r})\\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{L}}}\psi(\vec{r})\end{aligned}$$



空间转动算符： $\hat{U}(\vec{\alpha})=e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{L}}}$

空间各向同性和角动量守恒

空间转动不变性 ⟺ 系统角动量守恒

对于中心力场问题（氢原子），哈密顿量是空间转动不变的，因而角动量的三个分量都是守恒量

虽然角动量的三个分量都是守恒量，但是彼此两两不对易，不能同时有确定的本征值

但是，测量角动量的三个分量时，其各自取值的概率分布是一定的，不随时间变化

能量守恒、动量守恒、角动量守恒都是时空对称性的体现，这在经典物理学中都有。但是，量子物理学还有经典中没有的更丰富的对称性，如空间反射和全同粒子交换对称性等-系统内禀对称性

空间反射对称性

经典物理中的空间反射变换：

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}, \quad \vec{p} \rightarrow -\vec{p}$$

定义宇称（parity）算符 $\hat{P}$：

$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

显然：

$$\hat{P}^2\psi(\vec{r}) = \hat{P}\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$$

$$\hat{P}^2 = 1, \quad \hat{P}^{-1} = \hat{P}$$

也即 $\hat{P}$ 的逆算符为其本身。还可证 $\hat{P}$ 不改变标积（练习）：

$$\int \psi^*(-\vec{r})\varphi(-\vec{r})d\vec{r} = \int \psi^*(\vec{r})\varphi(\vec{r})d\vec{r}$$

空间反射对称性

综合起来说，$\hat{P}$ 既是幺正算符，又是厄密。由于 $\hat{P}^2=1$ ，$\hat{P}$ 只有两个本征值：±1

根据本征函数完备性，任一波函数都可以展开为 $\hat{P}$ 的本征函数的叠加（对称和反对称部分）：

$$\psi(\vec{r})=\psi_S(\vec{r})+\psi_A(\vec{r})$$

由于宇称是内禀的，所以没有经典对应力学量。

如果系统宇称守恒，且系统能级是非简并的，则系统本征态必有确定的宇称。
推论：一维束缚态对称势能情况下系统本征态必有确定的宇称

宇称守恒的系统并不一定处于宇称的本征态

对于多粒子系统，系统的总宇称是各部分相乘的，而与连续变换对应的力学量的本征值是相加的

空间反射对称性

对于核或粒子物理反应：

$$a + b \rightarrow c + d$$

系统初末态的总宇称为 $P_a P_b P_{ab}$ 和 $P_c P_d P_{cd}$ ，其中 P_a, P_b 等为粒子的内禀宇称，P_{ab} 为两粒子的相对轨道运动宇称。如果系统初态处于 Y_{lm} 态，则

$$P_{ab} = \left(-1\right)^{l}$$

若反应过程宇称守恒（哈密顿量中与反应有关的相互作用势能项与宇称算符对易），则

$$P_a P_b \left(-1\right)^{l} = P_c P_d \left(-1\right)^{l'}$$

人们一般期待所有自界的基本相互作用力都是宇称不变的。但是在弱相互作用中，宇称守恒恰恰被彻底打破了（杨振宁、李政道，1957）

前沿介绍：弱相互作用中的宇称破坏

$$\vec{r} \xrightarrow{\hat{P}} -\vec{r}$$

$$\vec{p} \longrightarrow -\vec{p}$$

$$\vec{L} \longrightarrow \vec{L}$$ 角动量

$$\vec{\mu} \longrightarrow \vec{\mu}$$ 磁矩

C. S. Wu等研究了极化Cobalt-60的b衰变中电子的角度分布
：

$$^{60}\mathrm{Co} \rightarrow {}^{60}Ni^* + e^- + \overline{\nu}_e$$