Representation Invariance

褟科材

中国科学技术大学 化学物理系

2023 年 2 月 26 日

目录

1 简介

摘要

本文写于 2022 秋季学期严以京老师量子物理（英）的课堂，以“表象不变性”为线索，串起经典力学与量子力学的一些基本知识与思想。从物理量的表示出发，通过矢量与张量的坐标在坐标变换下的变换形式引出其不变性，并指出这种坐标系的变换与量子力学中的表象变换的相似之处，即 $|\psi_i\rangle\langle\psi_j|$ 可以看做并矢，而在计算中常用的对角化 $A = \lambda_i|a_i\rangle\langle a_i|$ 过程则可以看作是算符的谱分解。

所以，本文更像是一种总结提炼，或者是从另一个角度理解量子力学的一种尝试。

1.1 物理量与表象

为了量化某个物体的物理性质，我们需要用到一些数（可以是一个，也可以是多个），他们的集合称为 物理量 。有的物理量只需要一个数就能完全描述，例如质量、能量；但有的却不能。为了完全描述一个更为复杂的物理量，我们需要使用更多的数，我们就讲这些数称为 分量。描述同一物理性质的分量应当有某种结构或者组织形式，这是因为这些复杂的物理量大多与这个物理性质的各向异性有关。体现在这些数上，就是不同位置的数不能随意交换，应当按照某些顺序排列起来。

此外，坐标系在描述物理系统的演化时也具有非常关键的作用，而不同参考系之间存在一定的变换，在经典力学中即是 正交变换，它是欧氏空间中保内积、保长度、保标准正交基的变换。

在不同坐标系中，我们不能先验地认为某量在不同坐标系下的分量具有某种关系。然而，基于对周遭世界客观实在的信念，物理量及物理规律应当独立于人为设定的参考系而存在。也就是说，这是物理对象的内禀性质，不以人的意志为转移。

所以，一个量能被称为物理量，理应具有某种特殊的性质，即这个量在不同坐标系中的分量之间的关系应当是确定的——仅与联系两个坐标系的正交变换有关，而与两个参考系无关。

坐标系的本质是欧氏空间中的一组标准正交基。正如在不依赖这组基时，我们依然可以谈论某个线性变换 $\mathscr{A}$ 的特征值与特征向量一般，不选取坐标系我们依然可以谈论某个物理量的某些本质性质，只不过不太适应这种抽象表述而已。

将 坐标系 的概念推而广之，就是 Representation，表象。无论是在线性空间中选择某组基，还是以你所站立的点为原点、经纬线分别作为 X、Y 轴建立直角坐标系，都是选择了一种观察、看待某个对象（线性变换 $\mathscr{A}$、苹果落地）的方式，它是人为选择的，决定了对象在我们面前的呈现形式，也就是“表象”二字的字面含义。

1.2 本文的目的

这种 Representation Invariance 的观点也是量子力学的基石。一个例子是如下形式的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi$$

即是以态矢表示的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle$$

在坐标表象下的呈现形式。为了确认这一点，我们只需在方程左右同时左乘 $\langle x|$ 即可。

另一个和表象的含义相似的词汇为 绘景。不同绘景的区别实际上也是我们看待量子系统演化的不同方式。薛定谔绘景、海森堡绘景以及相互作用绘景的核心区别，就在于怎样在态矢与算符之间分配这个传播子 $\mathcal{U}$。

总之，本文希望通过比较 表象不变性 在经典力学与量子力学中体现形式，从而使读者在运用量子力学的同时也或多或少的理解量子力学。

2 经典力学中的矢量与张量

2.1 正交变换与矢量

数学上讲，一个正交变换作用于一个向量后将其映射为另一个向量，注意，这里"正交变换"、"向量"是抽象的，不存在"数"。现在我们用物理学家更为熟悉的语言来重新叙述一下这件事，即选择一套标准正交基（建立直角坐标系），将抽象的线性空间同构为数组空间（用一些分量来描绘），并使用习惯的符号（数学家喜欢使用矩阵，而物理学家更习惯求和约定）：

$$x'_i=\lambda_{ij}x_j$$

其中 λ_{ij} 是正交变换在这组标准正交基下矩阵的 ij 元，其中使用求和约定。这是一个坐标变换，两组坐标都描述的是同一个向量，这个式子刻画了这两组坐标之间的关系：一重线性映射。

同样，物理量在不同坐标系下也可能有所不同。但为了保证空间对称的物理定律仍然成立，它的分量必须做一些改动。不过，新的分量也可以看成是由旧的分量变换而来，但不能先验地说新旧分量之间有什么必然关系。

现在我们规定：只有一个分量，并在任何坐标系中的值都相同的物理量称为 标量。

如果一个物理量 $\boldsymbol{A}$ 有三个分量，并且它们在正交变换下其分量如同点的坐标一样变换：

$$A'_i = \lambda_{ij} A_j$$

则称为 矢量。

注意，向量和矢量在这里的定义并不相同。向量更多指数学上的服从加法和数乘的那个对象。

2.2 张量

当一个物理量有 9 个分量，并且不同坐标系下的分量由一个二重线性映射联系：

$$T'_{ij} = \lambda_{ik}\lambda_{jl} T_{kl}$$

则称为 张量。根据处理矢量时的经验，我们可以根据表象不变的假设和坐标变换关系推知：张量在取定一组标准正交基（表象）后可以用一个矩阵来表示，矩阵的 ij 元就是 T_{ij}。并且在两个不同坐标系下的矩阵正交相似。

2.2.1 并矢

与矢量相同，张量也可以被分解为一些基本张量的和。通过将两个矢量做"并矢"运算，就可以构造这样的"基张量"。对于任意两个给定的矢量 $\vec{A}, \vec{B}$ ，按照下面的形式可以构造出一个张量 $\vec{A}\vec{B}$：

$$(\vec{A}\vec{B})_{ij} = A_i B_j$$

它可以写为一个列矢量左乘一个行矢量。所以如果将坐标系的三个基矢量分别做并矢运算，即是所有二阶张量所组成的线性空间的九个基：

$$\hat{x}_1\hat{x}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \hat{x}_1\hat{x}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \hat{x}_2\hat{x}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

所以，一个张量也可以表示为

$$\mathcal{T} = T_{ij}\hat{x}_i\hat{x}_j$$

与矢量的表示一模一样。

现在，两个矢量之间除了点乘叉乘之外，又有了一种全新的并矢运算。矢量点乘给出一个标量，矢量叉乘给出一个赝矢量，矢量并矢则给出一个张量。

2.2.2 张量与矢量的点乘

由于张量可以表示为并矢的和，所以张量与矢量的点乘可以通过定义并矢与矢量的点乘得到。它服从就近原则：

$$\mathcal{T} \cdot \vec{A} = (T_{ij}\hat{x}_i\hat{x}_j) \cdot (A_k\hat{x}_k) = (T_{ik}A_k)\hat{x}_i$$
$$\vec{A} \cdot \mathcal{T} = (A_k\hat{x}_k) \cdot (T_{ij}\hat{x}_i\hat{x}_j) = (A_kT_{kj})\hat{x}_j$$

可以看出，从左边从右边点乘的结果不一样，点乘一次是矢量，左右都点乘就是一个数了。

进一步地，如果将此时左右点乘的矢量取为欧氏空间中的一组基：

$$T_{ij} = \hat{x}_i \cdot \mathcal{T} \cdot \hat{x}_j$$

则称这个数 T_{ij} 为张量 $\mathcal{T}$ 在这个表象下的 矩阵元。这些也和前面的定义是一致的：左右分别点乘 $\hat{x}_i$ 和 $\hat{x}_i$ 将给出 T_{ij}。

2.2.3 作为线性映射的张量

[5] 中的例 1.3 证明了线性映射是一个张量，因为它可用 9 个分量完全表示，并在正交变换下的变换服从张量的定义。反之，对于任意一个张量，我们也可以构造一个线性映射，例如单位张量即可定义为

$$\mathcal{I} : \vec{A} \mapsto \vec{A}$$

由于线性映射本身也是与坐标系无关的，所以如果按照这样定义张量，则更加强调张量在坐标变换下的不变性，也即是 Representation Invariance。

现在，如果将张量看做是一个线性映射，或者简短一点：算符，我们就可以将这些内容几乎原封不动的搬运到量子力学的物理量表示方法中来。

3 狄拉克表象理论

本文最开始已经说明，Representation Invariance 的信念迫使我们给出了物理量的定义，但无论是标量、矢量还是张量，都是存在于欧氏空间中的，因为经典力学是欧几里得空间中的力学。然而，量子力学是希尔伯特空间中的力学，所以这里的标量、矢量和张量则存在于希尔伯特空间中。

为了凸显量子力学和经典力学在物理量表示方法上的联系，所谓“一个量子态以一个态矢来表示”实际上是在说：它是 Hilbert 空间中的一个矢量，而“一个可观测量对应一个算符”

实际上是在说：它是 Hilbert 空间中的一个张量。同时，取代正交变换地位的，称为 酉变换。

本节内容主要参考 [4] 的第一章，为了体现与经典力学与线性代数的相似之处，省略了许多与本文主题不相关的部分。

3.1 酉变换

两组正交基 $|a_n\rangle$ 和 $|b_n\rangle$ 之间的酉变换可以写作

$$U = |b_n\rangle\langle a_n|$$

它满足下面这个关系：

$$U|a_i\rangle = |b_n\rangle\langle a_n|a_i\rangle = \delta_{in}|b_n\rangle = |b_i\rangle$$

所以一个态矢在 $|b_n\rangle$ 上的投影 $B_i = \langle b_i|\psi\rangle$ 可以被写作 $A_j = \langle a_j|\psi\rangle$ 的线性组合，通过下面的方式：

$$\begin{aligned}
B_i &= \langle b_i|\psi\rangle \\
&= \langle a_i|U|\psi\rangle \\
&= \langle a_i|U|a_j\rangle\langle a_j|\psi\rangle \\
&= U_{ij}\langle a_j|\psi\rangle \\
&= U_{ij}A_j
\end{aligned}$$

很像正交变换吧?

3.2 基的并矢构成张量基

设 $|\beta\rangle = \boldsymbol{T}|\alpha\rangle$，则插入单位张量有

$$\langle x_i|\beta\rangle = \langle x_i|\boldsymbol{T}|\alpha\rangle = \langle x_i|\boldsymbol{T}|x_j\rangle\langle x_j|\alpha\rangle = T_{ij}a_j$$

可见，在 x 表象下分量的变换规律满足线性变换的形式。所以为了取出一个算符在某个表象下的 ij 元，只需左边作用左矢 $\langle x_i|$ ，右边作用右矢 $|x_j\rangle$ 。

通过这种“插入单位算符”的手法，一个算符就可以表示为

$$\begin{aligned}
\hat{A} &= |a_i\rangle\langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle\langle a_j| \\
&= A_{ij}|a_i\rangle\langle a_j|
\end{aligned}$$

和张量的并矢分解的形式是一致的，不过并矢的形式从 $\hat{x}_i\hat{x}_j$ 换成了 $|a_i\rangle\langle a_j|$ 。

现在，再次审视我们对于平均值的定义：

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

则可以认为是取出了 $\mathcal{A}$ 在某组含有 $|\psi\rangle$ 的表象下对应 $|\psi\rangle$ 的对角线上的元素。

3.3 对易

3.3.1 矩阵的乘法交换性

显然，张量空间同构于矩阵空间，从而我们可以通过研究矩阵的对易关系来研究张量，也就是算符的对易关系。

线性代数告诉我们：两个方阵 A, B 对易，当且仅当存在可逆矩阵 P ，使得 $P^{-1}AP$ 和 $P^{-1}BP$ 都是对角阵，也就是能够同时相似对角化，这也表明 A, B 具有完全相同的特征子空间。

厄米算符具有完全类似的性质，所以两个可观测量对易，当且仅当它们所有本征态都相同。

3.3.2 对易与测量

对 n 个处于态 $|\psi\rangle$ 的量子系统进行物理量 A 的测量，有如下假设：

1. 这些测量结果 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ 是 $\hat{A}$ 本征值集合的子集，而本征值集合由 $\hat{A}$ 和量子系统本身的空间限制决定，与状态 $|\psi\rangle$ 无关；

2. 测量值是服从分布 $\mathbb{P}(A = a_i) = |\langle a_i|\psi\rangle|^2$ 的随机变量；

3. 得到 $A = a_i$ 的同时，量子态 $|\psi\rangle$ 坍缩至 a_i 对应的本征矢 $|a_i\rangle$，即将投影算符 $|a_i\rangle\langle a_i|$ 作用于 $|\psi\rangle$。

这时我们发现，如果将测量本身也视为一个算符 M，那么它和其他算符的区别在于，它不是确定的，而是服从分布 $\mathbb{P}(M = |a_i\rangle\langle a_i|) = |\langle a_i|\psi\rangle|^2$ 的随机张量。这是由 J · 施温格发展的量子力学的一种公式形式，但现在不常采用。

对两个对易的物理量做相继观测，将给出相同的本征值，即相继得到 A，B，A，B，A，B，A，B；如果态处于两个不对易算符的共同本征态上，那么测量结果和对易物理量的结果仍然相同：相继得到 A，B，A，B，A，B，A，B。

然而，两个不对易算符可以拆为对易部分和不对易部分：

$$A = \begin{bmatrix} diag_1, & 0 \\ 0, & A_1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} diag_2, & 0 \\ 0, & B_1 \end{bmatrix}$$

其中对角部分对应共同本征态，不对易部分则不存在共同本征态。

这样一来，对于循环测量这件事，如果初始状态处于对角阵对应的一个，那么它将会停留在这个本征态上。如果初始状态处于不对易部分，那么连续测量的结果将被限制在这个不变子空间中，但结果则是一个马尔可夫过程。

3.4 谱分解

实对称正定方阵总可以正交相似对角化，这一现象的抽象推广，即是算子的谱分解。正如其字面含义所指出的那般，既然一个算子的特征值与特征向量包含了这个算子的所有信息，那么我们就可以尝试将它按照自己的特征来实现分离。

用我们熟悉的语言表达，对一个厄米算符 $\hat{A}$ 做谱分解，是指将它写为

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$$

的并矢形式。根据厄米性的推论，厄米算符总是可以做这样的分解。从另一个角度出发，我们同样可以得到这个结果，即在算符 $\hat{A}$ 的本征向量集合的表象下，写出 $\hat{A}$ 的矩阵元。

这里的 $\lambda_i, \lambda_j\ (i \neq j)$ 可以相同，也可以不同，对应有简并与无简并情况。所以我们可以将简并的子空间合成一下：

$$\hat{P}_k = \sum_{j=1}^{g_k} |a_{kj}\rangle\langle a_{kj}|$$
$$\hat{A} = \sum_k \lambda_k \hat{P}_k$$

其中 k 是子空间的标号，而 g_k 是它的简并度。这里定义的 $\hat{P}_k$ 称为投影算符，它满足

$$\hat{P}_k^2 = \hat{P}_k$$

它将会在量子力学变分法以及 von Neumann 的量子统计力学的描述中发扬光大。

3.5 氢原子

作为一个例子，我们考虑将表象理论应用于氢原子的结构分析中。

3.5.1 球谐函数

首先，氢原子系统是一个典型的中心力场模型（势能相仅与 $r = |\boldsymbol{r}|$ 有关），保持正则变量 r 与 p 而不对它们做任何对应于某个表象的替换（例如 $p_i \mapsto \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial y}{\partial x_i}$），它的哈密顿量可以写为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r)$$

经过球坐标变换，哈密顿量写为

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2}\left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta}\right) + V(r)$$

任何一本量子力学教材都会对这个哈密顿量的本征方程做一系列的分离变量，即拆为角向部分和径向部分。其中角向部分在直角坐标表象下的函数形式就是球谐函数 $Y_l^m(\theta,\phi)$：

$$Y_l^m(\theta,\phi)=\epsilon\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}e^{im\phi}P_l^m(\cos\theta)$$

它既是总角动量 $\hat{L}^2$ 以 $\hbar^2 l(l+1)$ 为本征值的本征函数，也是 z 轴角动量 $\hat{L}_z$ 以 $m\hbar$ 为本征值的本征函数。

不过，我们始终可以通过另一种方法：角动量的升降算符得到 $\hat{L}_z$ 对 $\hat{L}^2$ 各本征子空间的细化形式。在使用升降算符的过程中我们并没有用到任何一个表象，只是通过正则对易关系就将每个算符的本征值算了出来：

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2|l,m\rangle&=\hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle;\quad l=0,1,\cdots,n-1\\
\hat{L}_z|l,m\rangle&=\hbar m|l,m\rangle;\quad m=0,\pm1,\cdots,\pm l
\end{aligned}$$

容易猜到，$|l,m\rangle$ 在极坐标表象下的函数形式即是 Y_l^m，[3] 也证明了这一点。那么极坐标表象与直角坐标表象之间也应有一定的变换关系：

$$\langle \mathrm{k}\mid E,l,m\rangle=\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\delta\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)Y_{l,m}(\hat{\mathrm{k}})$$

其中 $|\mathrm{k}\rangle$ 是动量表象的本征函数。

3.5.2 自旋、角动量与李代数

我们发现，电子自旋 S 所满足的本征方程与电子在核外运动的角动量 L 满足的本征方程形式是一致的：

$$\begin{aligned}
\hat{S}^2|s,m\rangle&=\hbar^2 s(s+1)|j,m\rangle\quad[(2s+1)\text{ be integer }]\\
\hat{J}_z|s,m\rangle&=\hbar m|s,m\rangle;\quad m=-s,-s+1,\cdots,s-1,s
\end{aligned}$$

其中必有原因。我们先看核外运动的角动量，在经典力学中，角动量是三维连续转动变换的生成元，经典的中心力场哈密顿量在这样的变换下不变，故其生成元是一个运动常数，它与经典哈密顿量的经典 Poisson 括号为 0 。角动量的基本 Poisson 括号满足如下形式：

$$[L_i,L_j]=\epsilon_{ijk}L_k$$

这样的一组对易关系，其实唯一确定了一个李代数，式子中出现的 ϵ_{ijk} 则被称为结构常数。这样一来，只要对易关系不变，李代数的结构就不变，它的升降算符分解表示也不变，各级的本征值更是不变。

所以我们可以看到，自旋之所以可以被冠以“角动量”的名称，无非就是因为：自然界让对易关系

$$[S_i,S_j]=\epsilon_{ijk}S_k$$

得以实现的最低维度为 2，也就是矩阵

$$\begin{bmatrix} \cos\theta & -sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

物理世界中主要有两种变换：平移变换与转动变换。而诺特定理告诉我们，每一种对称变换都对应了一个守恒的物理量。进一步地，我们选择使用这些守恒量来描述物理世界——即使它们在一些情形下不守恒，但这比起使用其他状态参量而言要方便得多。

所以我们之所以为自旋冠以“角动量”的名称，既不是因为它是某种“叉乘”，也不是因为它在描述一个微观粒子像经典粒子那般正绕某点旋转，而是因为这个量具有旋转对称性 $SU(2)$ 而已。这样的一个二维转动由于数域的扩张，它与日常熟悉的 $SO(3)$ 的三维转动具有李群意义上的同构性。

所以，这样的观点也导致了另一种建立量子力学的方式，即是通过研究系统在某些变换下的不变性。

3.5.3 微扰

表象理论以其简洁的特点与在群表示上的优越性，使得我们不需要直面某些形式复杂的微分方程而直接得到某些算符的本征值。无论是相对论近似、自旋-轨道耦合、塞曼效应还是更精细的结构，如果我们选择在某些表象下写出这些微扰满足的微分方程，求解起来会非常复杂，也没有必要——因为相对于核外电子的坐标概率分布或者动量概率分布，实际上我们更关心原子能级之间究竟有多大距离。

4 总结

本文以表象不变性为线索，揭开了经典力学与量子力学相似的一角。除了表象不变性以外，经典力学与量子力学的联系还体现在最小作用量原理以及哈密顿函数上。

例如，如果从离散体系过渡到连续体系，如果体系的拉格朗日密度 $\mathscr{L}$ 满足

$$\mathscr{L} = \hbar(\psi_2\partial_t\psi_1 - \psi_1\partial_t\psi_2) - \frac{\hbar^2}{2m}[(\nabla\psi_1)^2 + (\nabla\psi_2)^2] - U(\vec{r})(\psi_1^2 + \psi_2^2)$$

则此时场 ψ_1 和 ψ_2 满足的欧拉-拉格朗日方程分别为

$$-\hbar\partial_t\psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1 + U\psi_1 \tag{1}$$

$$+\hbar\partial_t\psi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2 + U\psi_2 \tag{2}$$

将第二式乘上虚数因子 i 再与第一式相加，即可得到薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi$$

其中 $\psi = \psi_1 + i\psi_2$ 。

再比如，不含时力学量 f 的运动方程可以用经典 Poisson 括号写为

$$\frac{df}{dt} = [f, H]$$

而在海森堡表象下，力学量的运动方程也可以使用量子 Poisson 括号表示，只不过多了一个 $i\hbar$ 而已：

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H]$$

对于这些主题，作者水平有限，也限于篇幅不做过多阐述。本文也应当有许多错误，望后之览者不吝赐教。

参考文献

[1] Robert Alicki and Ronnie Kosloff. *Introduction to Quantum Thermodynamics: History and Prospects*. Springer, Cham, 2018.

[2] Goldstein. *Classical Mechanics*. 高等教育出版社, 2005.

[3] Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, 1995.

[4] Nadir Jeevanjee. *An Introduction to Tensors and Group Theory for Physicists*. Birkhauser, 2010.

[5] Ira N.Levine. *Quantum Chemistry*. Pearson, 2012.

[6] 徐光宪. *量子化学：基本原理与从头计算法*. 科学出版社, 2009.

[7] 梁昆淼. *力学. 下册，理论力学*. 高等教育出版社, 2009.

[8] 樱井纯. *现代量子力学*. 世界图书出版公司, 2021.

[9] 潘海俊. *理论力学导论*. 中国科学技术大学出版社, 2022.

[10] 苏禹. 量子物理（英）作业, (17), 2022.