第5章：守恒量与对称性

2017年4月23日　　14:57

- ☐ 力学量随时间的变化——守恒量
- ☐ Virial定理
- ☐ Ehrenfest 定理
- ☐ 守恒量与对称性

力学量平均值随时间的变化

$$\frac{d}{dt}\bar{A}(t) = \overline{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}} + \frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{A},\hat{H}]}$$

（证明过程见教材p159，需要掌握）如果A不显含t (即算符表达式中不含t,以后未作特殊说明，都指这种力学量)，则有$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$,

于是

$$\frac{d}{dt}\bar{A}(t) = \frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{A},\hat{H}]}$$

守恒量

$$\frac{d}{dt}\bar{A} = 0 \Rightarrow [\hat{A},\hat{H}] = 0$$

态叠加原理，对于任一量子态 $\psi(t)$ 可以按照能量本征态 ψ_k 做展开

$$\psi(t) = \sum_k a_k \psi_k,$$

其中 $a_k = (\psi_k, \psi(t))$，那么在 $\psi(t)$ 下测量 A 可得（注意，涉及到测量力学量，或者力学量平均值，一定是以在某个态下为前提，这两个概念都与量子态相关）

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|a_k(t)|^2=\left(\frac{\mathrm{d}a_k^*}{\mathrm{d}t}\right)a_k+\mathrm{c.c.}$$

$$=\left(\frac{\partial\psi(t)}{\partial t},\psi_k\right)(\psi_k,\psi(t))+\mathrm{c.c.}$$

$$=\left(\frac{H}{\mathrm{i}\hbar}\psi(t),\psi_k\right)(\psi_k,\psi(t))+\mathrm{c.c.}$$

$$=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi(t),H\psi_k)(\psi_k,\psi(t))+\mathrm{c.c.}$$

$$=-\frac{E_k}{\mathrm{i}\hbar}|(\psi(t),\psi_k)|^2+\mathrm{c.c.}=0.$$

在量子力学中，如力学量 A 与体系的 Hamilton 量对易，则称为体系的一个守恒量。按上述分析，量子体系的守恒量，无论在什么态下，平均值和几率分布都不随时间改变。

- 如果体系 H 不显含时间，那么能量守恒。
- 对于自由粒子，动量守恒，角动量守恒。
- 对于中心力场中的粒子，$H=\boldsymbol{p}^2/2m+V(\boldsymbol{r})$, 角动量守恒，动量不守恒。

上述三个练习需要掌握

- 不同于经典体系，量子体系的守恒量并不一定取确定值（平均值和几率分布不变，并不等于取确定值），因为体系的状态不一定是这个守恒量的本征态。

若初始时刻体系处于守恒量 A 的本征态，则体系将保持在其本征态．由于守恒址具有此特点，它的量子数称为好最子数．反之，若初始时刻体系并不处于守恒量 A 的本征态，则以后的状态也不是其本征态，但测值几率分布不随时间变化

- 量子体系的守恒量不一定能够同时取确定值，除非相互对易

力学量的相关运算

位力（virial）定理

设粒子处于势场V(r)中，Hamilton量表为

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

考虑 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 的平均值随时间的变化. 按式(3)，有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}}=\overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},H]}$$

$$=\frac{1}{2m}\overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},p^2]}+\overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})]}$$

$$=\mathrm{i}\hbar\left(\frac{1}{m}\overline{p^2}-\overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V}\right).$$

对于定态，$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}}=0$，所以

$$\frac{1}{m}\overline{p^2}=\overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V},$$

或

$$2\overline{T}=\overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V},$$

特例 设 $V(x,y,z)$ 是 x,y,z 的 n 次齐次函数(即 $V(cx,cy,cz)=c^nV(x,y,z)$，c 为常数). 证明

$$n\overline{V} = 2\overline{T} \qquad (12)$$

应用于

(a) 谐振子势，$n=2$，有 $\overline{V}=\overline{T}$；

(b) Coulomb 势，$n=-1$，有 $\overline{V}=-2\overline{T}$；

(c) δ 势，$n=-1$(与 Coulomb 势相同).

- 设体系有两个彼此不对易的守恒量F和G, 即$[F,H]=0, [G,H]=0$, 但$[F,G]| \neq 0$, 则体系能级一般是简并的．

  如$[F,G]=C$(常数），则体系所有能级都简并，而且简并度为无穷大．

  如果体系有一个守恒量F, 而体系的某条能级不简并，即对应于某能量本征值E只有一个本征态ψ_E，则其必为F的本征态

Ehrenfest定理

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

按5.1节(3)式，粒子坐标和动量的平均值随时间变化如下：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{\boldsymbol{r}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{r},H]} = \bar{\boldsymbol{p}}/m,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{p},H]} = \overline{-\nabla V(\boldsymbol{r})} = \overline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})},$$

它们与经典粒子运动满足的正则方程

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}, \quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\nabla V$$

相似. 此之谓 Ehrenfest 定理[①]. (2)式代入(3)式，得

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\bar{\boldsymbol{r}} = \overline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})},$$

Feynman-Hellmann 定理

若λ是$\hat{H}$中的一个参数，则对其束缚态ψ_n, E_n而言，必有

$$\frac{\overline{\partial \hat{H}}}{\partial t} = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}$$

守恒量与对称性

利用对称性可以使问题大大简化，有时不用求解Schödinger方程仅利用对称性也能得到重要结论。

设体系的状态用 ψ 描述. ψ 随时间的演化遵守 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi. \tag{1}$$

考虑某种线性变换 Q(存在逆变换 Q^{-1},不依赖于时间),在此变换下,ψ 变化如下

$$\psi \to \psi' = Q\psi, \tag{2}$$

体系对于变换的不变性表现为 ψ' 与 ψ 遵守相同形式的运动方程,即要求 ψ' 也遵守

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' = H\psi', \tag{3}$$

即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Q\psi = HQ\psi.$$

用 Q^{-1}运算,得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = Q^{-1}HQ\psi.$$

与方程(1)比较,要求 $Q^{-1}HQ=H$,即 $QH=HQ$,或表成

$$[Q,H] = 0,$$

这就是体系(Hamilton 量)在变换 Q 下的不变性的数学表达.

几率守恒:

$(\psi',\psi')=(Q\psi,Q\psi)=(\psi,Q^{+}Q\psi)=(\psi,\psi)$,则 Q 应为幺正

$$QQ^{+} = Q^{+}Q = I. \tag{5}$$

对于连续变换,可以考虑无穷小变换,令

$$Q = I + i\varepsilon F,$$

$\varepsilon\to 0^{+}$,是刻画无穷小变换的实参量.用式(6)代入式(5),

$$\begin{aligned} Q^{+}Q &= (I-i\varepsilon F^{+})(I+i\varepsilon F) \\ &= I+i\varepsilon(F-F^{+})+O(\varepsilon^{2})=I, \end{aligned}$$

即要求

$$F^{+} = F,$$

即 F 为厄米算符,称为变换 Q 的无穷小算符.由于它是厄米算符,可用它来定义一个与 Q 变换相联系的可观测量.按式(4)要求,体系在 Q 变换下的不变性 $[Q,H]=0$,就导致

$$[F,H] = 0, \tag{8}$$

F 就是体系的一个守恒量.