第五章：　对称性及守恒定律

- **证明，在不连续谱的能量本征态（束缚定态）下，不显含 t 的物理量对时间 t 的导数的平均值等于零。**

（证明）设 $\hat{A}$ 是个不含 t 的物理量，ψ 是能量 $\hat{H}$ 的本征态之一，求 $\hat{A}$ 在 ψ 态中的平均值，有：

$$\overline{A} = \iiint_\tau \psi^* \hat{A} \psi d\tau$$

将此平均值求时间导数，可得以下式（推导见课本§5.1）

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \frac{1}{\hbar i}\overline{[\hat{A},\hat{H}]} \equiv \frac{1}{\hbar i}\iiint_\tau \psi^*(\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A})\psi d\tau \qquad (1)$$

今 ψ 代表 $\hat{H}$ 的本征态，故 ψ 满足本征方程式

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (E\text{ 为本征值}) \qquad (2)$$

又因为 $\hat{H}$ 是厄密算符，按定义有下式（ψ 需要是束缚态，这样下述积公存在）

$$\iiint_\tau \psi^* \hat{H}(\hat{A}\psi)d\tau = \iiint (\hat{H}\psi)^*(\hat{A}\psi)d\tau \qquad (3)$$

（题中说力学量导数的平均值，与平均值的导数指同一量）
（2）（3）代入（1）得：

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \frac{1}{\hbar i}\iiint \psi^*\hat{A}(\hat{H}\psi)d\tau - \frac{1}{\hbar i}\iiint(\hat{H}\psi)^*(\hat{A}\psi)d\tau$$

$$= \frac{E}{\hbar i}\iiint \psi^*\hat{A}\psi d\tau - \frac{E^*}{\hbar i}\iiint \psi^*\hat{A}\psi d\tau$$

因 $E = E^*$，而 $\frac{d\overline{A}}{dt} = 0$ **(跟守恒量的区别是什么？)**

（证明）体系的束缚态势能量本征态，任取该体系的一个束缚态 ψ，设其相应的能量本证值为 E,有

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

由于 H 具有 Hermite 性，其 Hermite 共轭式为

$$\langle\psi|H = E\langle\psi|$$

设有任意不显含 t 的力学量 A,设 $|\psi\rangle$ 已经归一化，利用前述 $|\psi\rangle$ 的本征方程及其 Hermite 共轭式， A 的平均值对 t 的导数有

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=\left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t}\middle|A\middle|\psi\right\rangle+\left\langle\psi\middle|A\middle|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle+\left\langle\psi\middle|\frac{\partial A}{\partial t}\middle|\psi\right\rangle$$
$$=-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|HA|\psi\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|AH|\psi\rangle+0$$
$$=-\frac{1}{i\hbar}E\langle\psi|A|\psi\rangle+\frac{1}{i\hbar}E\langle\psi|A|\psi\rangle=0$$

● 求 Heisenberg 表象中自由粒子的坐标的算符。

（解）根据海森堡表象（绘景）的定义可导得海森堡运动方程式，即对于任何用海氏表象的力学算符 $\hat{A}(t)$ 应满足：

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

又对于自由粒子，有 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}$ （ $\hat{p}$ 不随时间 t 变化，因为是守恒量）

令 $\hat{A}(t)=\hat{x}(t)$ 为海氏表象座标算符；代入（1）

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=\frac{1}{\hbar i}[\hat{x}(t),\frac{\hat{p}^2}{2\mu}]$$

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=\frac{1}{2\mu\hbar i}[\hat{x}(t),\hat{p}^2] \qquad (2)$$

但 $[\hat{x}(t),\hat{p}^2]=\hat{x}\hat{p}^2-\hat{p}^2\hat{x}$

$$=\hat{x}\hat{p}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{p}\hat{x}$$

$$=[\hat{x},\hat{p}]\hat{p}+\hat{p}[\hat{x},\hat{p}]=2\hbar i\hat{p} \qquad (3)$$

代入（2），得： $\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=2\hbar i\hat{p}\frac{1}{2\mu\hbar i}=\frac{\hat{p}}{\mu}$

积分得 $\hat{x}(t)=\frac{\hat{p}}{\mu}t+C$

将初始条件 $t=0$ 时， $\hat{x}(t)=\hat{x}(0)$ 代入得 $C=x(0)$，因而得到一维座标的海氏表象是：

$$\hat{x}(t)=\frac{\hat{p}}{\mu}t+\hat{x}(0),$$ (注意：p 不随时间变)

● 求海森伯表象中谐振子的坐标与动量算符。

（解）用薛氏表象时，一维谐振子的哈氏算符是：

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+\frac{\mu\omega^2x^2}{2} \qquad (1)$$

解法同于前题，有关坐标 $\hat{x}(t)$ 的运动方程式是：

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=\frac{1}{\hbar i}[\hat{x}(t),\frac{\hat{p}^2(t)}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2\hat{x}^2(t)}{2}] \qquad (2)$$

将等式右方化简，用前一题的化简方法：

$$\frac{1}{\hbar i}[\hat{x},\frac{p^2}{\partial\mu}+\frac{\mu\omega^2x^2}{2}]=\frac{1}{2\mu\hbar i}[\hat{x},\hat{p}^2]+\frac{\mu\omega^2}{2\hbar i}[\hat{x},\hat{x}^2]=\frac{\hat{p}(t)}{\mu}$$

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=\frac{1}{\mu}\hat{p}(t) \qquad (3)$$

但这个结果却不能直接积分（与前题不同， $\hat{p}$ 与 t 有关），为此需另行建立动量算符的运动方程式：

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt}=\frac{1}{\hbar i}[\hat{p}(t),\frac{\hat{p}^2(t)}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2x^2(t)}{2}]$$

化简右方 $\quad \frac{1}{hi}[p(t),\frac{\mu\omega^2x^2(t)}{2}]=\frac{\mu\omega^2}{2hi}\{\hat{p}\hat{x}^2-\hat{x}^2\hat{p}\}$

$$=\frac{\mu\omega^2}{2hi}\{\hat{p}\hat{x}\hat{x}-\hat{x}\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p}\hat{x}-\hat{x}\hat{x}\hat{p}\}$$

$$=\frac{\mu\omega^2}{2hi}\{[\hat{p},\hat{x}]\hat{x}-\hat{x}[\hat{p},\hat{x}]\}=-\mu\omega^2\hat{x}(t)$$

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt}=-\mu\omega^2\hat{x}(t) \quad (4)$$

将(3)对时间求一阶导数,并与(4)式结合,得算符 $\hat{x}(t)$ 的微分方程式:

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt^2}+\omega^2\hat{x}(t)=0 \qquad (5)$$

这就是熟知的谐振动方程式，振动角频率ω，它的解是：

$$\hat{x}(t)=\hat{A}\cos\omega t+\hat{B}\sin\omega t \qquad (6)$$

$\hat{A}$，$\hat{B}$ 待定算符，将它求导，并利用(3)：

$$\hat{p}(t) = \mu\omega(\hat{B}\cos\omega t - \hat{A}\sin\omega t) \quad (7)$$

将 t=0 代入：x(0)=A　 P（0）= $\mu\omega$ B，最后得解：

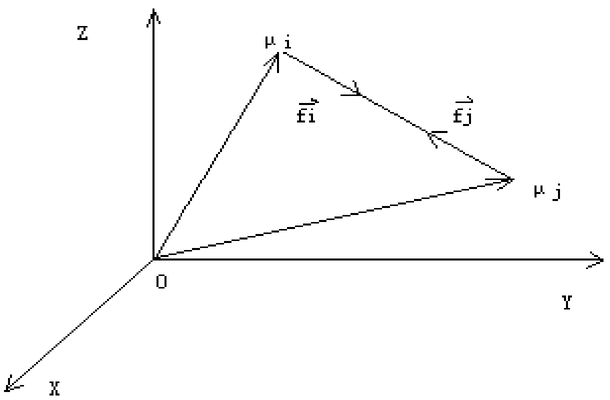
$$\begin{cases} \hat{x}(t) = \hat{x}(0)\cos\omega t + \dfrac{1}{\mu\omega}\hat{p}(0)\sin\omega t & (8) \\ p(t) = p(0)\cos\omega t - \mu\omega x(0)\sin\omega t) & (9) \end{cases}$$

5.6 多粒子系如所受外力矩为 0，则总动量 $\hat{\vec{L}} = \sum \hat{l}_i$ 为守恒。

[证明]对粒子系，外力产生外力势能和外力矩，内力则产生内力势能 $V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$，但因为内力成对产生，所以含内力矩为 0，因此若合外力矩为零，则总能量中只含内势能：

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu_i}\hat{p}_i^{\ 2} + \sum_{i,j} V[\vec{r}_i - \vec{r}_j] \quad (1)$$

要考察合力矩是否守恒，可以计算 $[\hat{\vec{L}}, \hat{H}]$ 的分量看其是否等于零。



$$[\hat{\vec{L}}_x, \hat{H}] = [\sum_i (y_i p_{iz} - z_i p_{iy}), \sum_i \frac{1}{2\mu_i}\hat{p}_i^{\ 2} + \sum_{i,j} V[\vec{r}_i - \vec{r}_j]]$$

$$=\sum_i \frac{1}{2\mu_i}[(y_i p_{iz}-z_i p_{iy})(\hat{p}_{ix}{}^2+\hat{p}_{iy}{}^2+\hat{p}_{iz}{}^2)-(\hat{p}_{ix}{}^2+\hat{p}_{iy}{}^2+\hat{p}_{iz}{}^2)(y_i p_{iz}-z_i p_{iy})]+$$

$$\sum_i\sum_j[(y_i p_{iz}-z_i p_{iy})V(x_i-x_j,y_i-y_j,z_i-z_j)-V(x_i-x_j,y_i-y_j,z_i-z_j)(y_i p_{iz}-z_i p_{iy})]$$

$$=\sum_i \frac{1}{2\mu_i}[(y_i p_{iz}\hat{p}_{ix}{}^2-\hat{p}_{ix}{}^2 y_i p_{iz})+(y_i p_{iz}\hat{p}_{iy}{}^2-\hat{p}_{iy}{}^2 y_i p_{iz})+(y_i\hat{p}_{iz}{}^3-\hat{p}_{iz}{}^2 y_i p_{iz})+$$

$$(\hat{p}_{ix}{}^2 z_i p_{iy}-z_i p_{iy}\hat{p}_{ix}{}^2)+(\hat{p}_{iy}{}^2 z_i p_{iy}-z_i\hat{p}_{iy}{}^3)+(\hat{p}_{iz}{}^2 z_i p_{iy}-z_i p_{iy}\hat{p}_{iz}{}^2)]+$$

$$\sum_i\sum_j[(y_i p_{iz}V-Vy_i p_{iz})+(V_{zi}z_i p_{iy}-z_i p_{iy}V)]$$

最后一式中，因为

$$[p_{ix}{}^2,p_{iy}]=[p_{iz}{}^2,p_{iz}]=[p_{iz},p_{ix}{}^2]=[p_{iz}{}^2,p_{iy}]=0$$

因而⑶可以化简：

$$[\hat{\vec{L}}_x,\hat{H}]=\sum_i\frac{1}{2\mu_i}\{[0+[y_i,\hat{p}_{iy}{}^2]\hat{p}_{iz}+0+0+0+[\hat{p}_{iz}{}^2,z_i]p_{iy}\}$$
$$+\sum_i\sum_j\{[p_{iz},y_iV]+[z_iV,p_{iy}]\}$$

用对易关系：

$$[\hat{\vec{L}}_x,\hat{H}]=\sum_i\frac{1}{2\mu_i}\{2\hbar i p_{iy}p_{iz}-2\hbar i p_{iz}p_{iy}\}+\sum_i\sum_j\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z_i}[y_iV]-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y_i}[z_iV]\}$$

$$=\frac{\hbar}{i}\sum_{i,j}\{y_i\frac{\partial V}{\partial z_i}-z_i\frac{\partial V}{\partial y_i}\} \qquad (4)$$

最后一式第一求和式用了 $[y_i,p_{iy}{}^2]=2\hbar i p_y$ 等，第二求和式用了：

$$[p_x,f(x)]=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial x}$$

最后的结果可用势能梯度[内力]表示，因内力合矩为零，故有

$$[\hat{\vec{L}}_x,\hat{H}]=\frac{\hbar}{i}\sum_{i,j}\vec{r}\times\nabla_i V=-\frac{\hbar}{i}\sum_{i,j}\vec{r}_i\times\vec{f}_i=0$$

同理可证 $[\hat{\vec{L}}_y,\hat{H}]=0$ $[\hat{\vec{L}}_z,\hat{H}]=0$

因此 $\hat{\vec{L}}$ 是个守恒量。

5.15 验证积分方程式

$$\hat{B}(t)=\hat{B}_0+i[\hat{A},\int_o^t B(\tau)d\tau]$$

有下列解：$\hat{B}(t)=e^{i\hat{A}t}B(0)e^{-i\hat{A}t}$ （$\hat{A}$ 与时间无关）

（证明）根据第四章习题，有：

$$e^{\hat{L}}\hat{A}'e^{-\hat{L}}=\hat{A}'+[\hat{L},A']+\frac{1}{2!}[\hat{L},[\hat{L},\hat{A}']]+\ldots\ldots \qquad (2)$$

因此令题给一式中的 $i\hat{A}t=\hat{L}$ ， $\hat{B}(0)=\hat{A}'$ （前式中的）

则 $\hat{B}(t)=\hat{B}(0)+[i\hat{A}t,\hat{B}(0)]+\frac{1}{2!}[i\hat{A}t,[i\hat{A}t,\hat{B}(0)]]+\ldots\ldots$

$$=\hat{B}(0)+(it)[\hat{A},\hat{B}(0)]+\frac{(it)^2}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}(0)]]+\ldots\ldots \qquad (3)$$

将（3）积分：$\int_0^t\hat{B}(\tau)d\tau=\frac{1}{i}\{B(0)(it)+\frac{(it)^2}{2!}[\hat{A},\hat{B}(0)]+\frac{(it)^3}{3!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}(0)]]+\ldots\ldots\}$ （4）

将（4）代入（1）式右方：

$$\hat{B}(0)+i[A,\int_0^t\hat{B}(\tau)d\tau]=B_0+[iAt,\hat{B}(0)]+\frac{1}{2!}[i\hat{A}t,[iAt,\hat{B}(0)]]+\ldots\ldots=\hat{B}(t)$$

题得证。