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）

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|a_k(t)|^2 &= \left(\frac{\mathrm{d}a_k^*}{\mathrm{d}t}\right)a_k + \text{c.c.} \\
&= \left(\frac{\partial\psi(t)}{\partial t},\psi_k\right)(\psi_k,\psi(t)) + \text{c.c.} \\
&= \left(\frac{H}{\mathrm{i}\hbar}\psi(t),\psi_k\right)(\psi_k,\psi(t)) + \text{c.c.} \\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi(t),H\psi_k)(\psi_k,\psi(t)) + \text{c.c.} \\
&= -\frac{E_k}{\mathrm{i}\hbar}|(\psi(t),\psi_k)|^2 + \text{c.c.} = 0.
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}} &= \overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},H]} \\
&= \frac{1}{2m}\overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},p^2]} + \overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})]} \\
&= \mathrm{i}\hbar\left(\frac{1}{m}\overline{p^2} - \overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V}\right).
\end{aligned}
$$

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

$$n\overline{V} = 2\overline{T} \tag{12}$$

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：

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

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

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

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

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

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

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.

空间的均匀性（平移不变性）与动量守恒

考虑无穷小平移

$x \to x' = x + \delta x$

设体系波函数相应变化表示为

$\psi \to \psi' = \hat{D}\psi$

满足 $\hat{D}\psi(x) = \psi(x - \delta x)$

展开为Taylor级数有

$$\psi(x-\delta x) = \psi(x) - \delta x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \cdots = e^{-\delta x \partial/\partial x}\psi(x) = e^{-i\delta x \hat{p}_x/\hbar}\psi(x)$$

也就是说无穷小平移算符是动量算符的函数

$\hat{D}(\delta x) = e^{-(i\delta x \hat{p}_x)/\hbar}$

推广到三维空间

$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r} + \boldsymbol{\delta r}$

无穷小平移算子

$\hat{\boldsymbol{D}}(\delta \boldsymbol{r}) = e^{-(i\delta \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})/\hbar}$

所以空间平移不变性要求

$[\hat{D}, H] = 0$

也就要求

$[\hat{p}, H] = 0$

即动量守恒

空间各向同性（旋转不变性）与角动量守恒

考虑系绕定轴（取为z轴）的旋转，角坐标

$\varphi \to \varphi' = \varphi + \delta\varphi$

波函数相应变为

$\psi \to \psi' = \hat{R}\psi$

满足 $\hat{R}\psi(\varphi) = \psi(\varphi - \delta\varphi)$

展开为Taylor级数有

$$\psi(\varphi-\delta\varphi) = \psi(\varphi) - \delta\varphi \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \cdots = e^{-\delta\varphi \partial/\partial\varphi}\psi(\varphi) = e^{-i\delta\varphi\, \hat{L}_z/\hbar}\psi(\varphi)$$

也就是说无穷小平移算符是角动量算符的函数

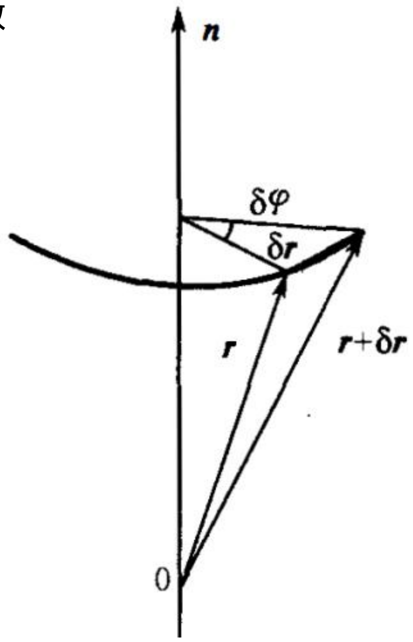
$\hat{R}(\delta\varphi) = e^{-(i\delta\varphi\, \hat{L}_z)/\hbar}$

推广到三维空间旋转

$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}$

由空间旋转引起的$\delta\boldsymbol{r}$为

$\delta\boldsymbol{r} = \delta\boldsymbol{\varphi}\times\boldsymbol{r} = \delta\varphi\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}$



$$\begin{aligned} R\psi(\boldsymbol{r}) &= \psi(\boldsymbol{r}-\delta\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}-\delta\varphi\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}) \\ &\approx \psi(\boldsymbol{r}) - \delta\varphi(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r}) \\ &= \psi(\boldsymbol{r}) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\varphi(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{p}\psi(\boldsymbol{r}) \\ &= \left[1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\varphi(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{l})\right]\psi(\boldsymbol{r}) \end{aligned}$$

无穷小平移算子

无穷小平移算子

$\hat{\boldsymbol{R}}(\delta\varphi) = e^{-(i\delta\varphi \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})/\hbar}$

所以空间旋转不变性要求

$[\hat{\boldsymbol{R}}, H] = 0$

也就要求

$[\hat{\boldsymbol{L}}, H] = 0$

即角动量守恒

空间反射不变性与宇称守恒

空间反射变换P作用下

$\psi(x,y,z) \rightarrow \hat{P}\psi(x,y,z) = \psi\,(-x,-y,-z)$

$\hat{P}$为厄米算符和幺正算符

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})P\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\varphi(-\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x\text{(积分变量 }\boldsymbol{r}\rightarrow -\boldsymbol{r}\text{)}$$

$$= -\int_{+\infty}^{-\infty}\psi^*(-\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x = \int_{-\infty}^{+\infty}[P\psi^*(\boldsymbol{r})]\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x$$

$\hat{P}^2 = I \Rightarrow \hat{P} = \hat{P}^{-1} \Rightarrow \hat{P}^\dagger = \hat{P}^{-1}$

P 的本征值(实数)可如下求出,设

$$P\psi = \lambda\psi$$

再用 P 对两边运算,左边$=P^2\psi=\psi$,右边$=\lambda P\psi=\lambda^2\psi$,所以

$$\lambda^2 = 1,\quad \lambda = \pm 1$$

即 P 的本征值只有两个,即±1. $\lambda=+1$ 对应的本征态,即

$$P\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r}) = +\psi(\boldsymbol{r})$$

称为偶宇称态. $\lambda=-1$ 对应的本征态,即

$$P\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r}) = -\psi(\boldsymbol{r})$$

称为奇宇称态.

空间反射不变性，有

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

即

$[\hat{P}, \hat{H}] = 0$

若体系的能量本征态不简并，则该能量本征态必有确定宇称. 但如能级有简并，则能量本征态并不一定有确定宇称但总可以把诸简并态适当线性叠加，构成宇称的本征态

时间的均匀性与能量守恒

$$\psi(\delta t) = D(\delta t)\psi(0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H\delta t/\hbar}\psi(0) \simeq (1 - \mathrm{i}H\delta t/\hbar)\psi(0)$$

$$D(\delta t) = \exp(-\mathrm{i}H\delta t/\hbar)$$