第五章　量子力学中的对称性与守恒量

§5.1 量子力学里的守恒量

5.1.1 力学量的平均值随时间的演化

力学量 $\hat{A}$ 在态 Ψ 上的平均值是（设 Ψ 与时间有关，但已归一）

$$\overline{A} = (\Psi, \hat{A}\Psi).$$

设 Ψ 满足 Schrödinger 方程

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{H}\Psi,$$

在一般情况下，$\hat{H}$ 和 $\hat{A}$ 都可能与时间有关。那么 $\overline{A}$ 对时间的变化率是

$$\begin{aligned}\frac{d\overline{A}}{dt} &= \left(\Psi, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi\right) + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}, \hat{A}\Psi\right) + \left(\Psi, \hat{A}\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)\\
&= \left(\Psi, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi\right) + \left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{H}\Psi, \hat{A}\Psi\right) + \left(\Psi, \hat{A}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{H}\Psi\right)\\
&= \left(\Psi, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi\right) - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\Psi, \hat{H}\hat{A}\Psi) + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\Psi, \hat{A}\hat{H}\Psi)\\
&= \overline{\left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right)} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{A}, \hat{H}]}.\end{aligned}$$

其中注意 $\hat{H}$ 是 Hermitian 算符。这称为（广义的）**埃伦费斯特**(Ehrenfest)**定理**。通常来说，我们考虑的算符 $\hat{A}$ 是不显含时间的，即 $\partial\hat{A}/\partial t = 0$，所以

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{A}, \hat{H}]}.$$

如果取 $\hat{A} = \hat{\vec{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla,\ \hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r})$，那么 $\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\vec{p}}, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r})\right] = -[\nabla, V(\vec{r})] = -\nabla V(\vec{r})$，所以

$$\frac{d\overline{\vec{p}}}{dt} = -\overline{\nabla V(\vec{r})} = \overline{\vec{f}(\vec{r})}.$$

这是 Ehrenfest 定理的最初形式(1927)。

我们看到，量子力学里关于力学量平均值随时间演化的方程

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{A}, \hat{H}]}.$$

与经典力学里的正则运动方程

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}_{\text{P.B.}}$$

非常类似，其中 $\{A, B\}_{\text{P.B.}}$ 是力学量 $A(q_i, p_i)$ 和 $B(q_i, p_i)$ 的泊松(Poisson)括号，定义为

$$\{A, B\}_{\text{P.B.}} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i}\right) = -\{B, A\}_{\text{P.B.}},$$

而 $\{A, H\}_{\text{P.B.}}$ 中的 $H(q_i, p_i)$ 就是经典的 Hamiltonian。所以，在形式上，量子力学里的对易括号除以 $\mathrm{i}\hbar$ 与经典力学里的 Poisson 括号的地位是一样的。事实上，把 Poisson 括号换成对易括号除以 $\mathrm{i}\hbar$，是把经典力学的量子化的途径之一。

5.1.2 量子力学里的守恒量　好量子数

我们发现：如果

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

那么就有

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=0.$$

实际上我们还可以证明：在$[\hat{A},\hat{H}]=0$的时候，不仅$\bar{A}$不随时间而改变，而且A的几率分布也不随时间而改变。所以这时我们称力学量A是量子力学意义上的守恒量，描写力学量A的本征值的那个量子数称为**好量子数**。

量子力学里所考虑的算符通常都不显含时间，例如坐标算符和动量算符，但是 Hamiltonian 算符却可能与时间明显相关。所以对算符$\hat{H}$而言，尽管$\hat{H}$和它自己总是对易的，但 Ehrenfest 定理中的第一项却应该保留，也就是

$$\frac{d\bar{H}}{dt}=\overline{\left(\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}\right)}.$$

当然，如果$\hat{H}$与时间无关的话，那么$\hat{H}$也是守恒量。这时的 Hamiltonian 就是能量，所以$\hat{H}$的平均值不记为$\bar{H}$而记为$\bar{E}$。

有几个问题要说明一下。

（1）注意区别某个量“有确定值”和它“守恒”。力学量A有确定值意味着系统处于A的本征态，但这并不涉及状态如何随时间演化。反之，力学量A守恒意味着它的测量结果不随时间而改变，然而系统并不一定处于它的本征态。当然，在A是守恒量的时候，如果系统在初始时刻处于A的本征态，那么此后它在任意时刻都处于A的本征态。

（2）一个量子系统可能有许多守恒量，但是他们未必都彼此对易，也就是说，未必同时都能有确定值。这与它们都守恒并不矛盾。

（3）注意区别“定态”与“守恒”。如果系统处于**定态**，那么**任何**力学量的测量结果都不随时间而改变，但是这只是系统的一种**特殊**状态，我们不能因此就说任何力学量都是守恒的。

*5.1.3 能级简并与守恒量

定理：若系统有两个彼此不对易的守恒量$\hat{F}$和$\hat{G}$，即$[\hat{F},\hat{H}]=[\hat{G},\hat{H}]=0$但是$[\hat{F},\hat{G}]\neq 0$，那么系统的能级一般说是简并的。

证明：由于$[\hat{F},\hat{H}]=0$，所以$\hat{F}$和$\hat{H}$可以有同时本征函数，记为ψ，即$\hat{H}\psi=E\psi,\ \hat{F}\psi=f\psi$。再考虑到$[\hat{G},\hat{H}]=0$，所以$\hat{H}\hat{G}\psi=\hat{G}\hat{H}\psi=\hat{G}E\psi=E\hat{G}\psi$，即$\hat{G}\psi$也是属于同一能量的本征态。但是$[\hat{F},\hat{G}]\neq 0$，所以一般说来（也有例外）$\hat{F}\hat{G}\psi\neq\hat{G}\hat{F}\psi=\hat{G}f\psi=f\hat{G}\psi$，即$\hat{G}\psi$不是$\hat{F}$的本征态，所以$\hat{G}\psi$不同于$\psi$，所以$\hat{H}\psi=E\psi$有简并。█

推论：如果$\hat{F}$是一个守恒量，能量本征态ψ_E不简并，那么ψ_E也一定是$\hat{F}$的本征态。证明从略。

事实上，我们已经在一维问题中看到了这样的例子：在$V(x)=V(-x)$的情况下一维束缚定态也一定是宇称本征态。

*5.1.4 维里(Virial)定理

假设系统处于定态，那么$\overline{\vec{r}\cdot\vec{p}}=\overline{\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z}$就不随时间而改变，而另一方面我们又有

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{x}\hat{p}_x,\hat{H}]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{x}[\hat{p}_x,\hat{H}]+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{x},\hat{H}]\,\hat{p}_x=-\hat{x}\frac{\partial H}{\partial x}+\frac{\partial H}{\partial p_x}\hat{p}_x=-\hat{x}\frac{\partial V}{\partial x}+\frac{\hat{p}_x^2}{m},$$

所以

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}},\hat{H}]=-\hat{\vec{r}}\cdot\nabla V+\frac{\vec{p}^2}{m}.$$

根据 Ehrenfest 定理就有

$$\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}=\overline{\frac{\vec{p}^2}{m}}=2\bar{T}.$$

这个关系称为 Virial 定理。对于中心势场，假设$V(r)\propto r^n$，那么$\vec{r}\cdot\nabla V=nV$，所以$\bar{T}=(n/2)\bar{V}$。以后我们会有许多具体的例子来验证这个定理。

§5.2　对称性与守恒量

5.2.1 体系的对称性变换　幺正变换

许多物理系统对于某些变换是不变的。这种不变性也称为对称性。

设系统的状态用 Ψ 描写，Ψ 随时间的演化服从 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi.$$

假设 Ψ 受到了某种不依赖于时间的可逆的线性变换 $\Psi\to\Psi'$，它借助于算符 $\hat{Q}$ 来完成，即

$$\Psi'=\hat{Q}\Psi \quad \text{或者} \quad \Psi=\hat{Q}^{-1}\Psi',$$

那么系统对于变换的不变性表现为 Ψ' 服从与 Ψ 相同的运动方程，即有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t}=\hat{H}\Psi'.$$

将上式代入，得到

$$\mathrm{i}\hbar\hat{Q}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\hat{Q}\Psi,$$

也就是说 $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{Q}^{-1}\hat{H}\hat{Q}\Psi$，所以

$$\hat{Q}^{-1}\hat{H}\hat{Q}=\hat{H},$$

或者

$$[\hat{Q},\hat{H}]\equiv\hat{Q}\hat{H}-\hat{H}\hat{Q}=0.$$

这就是系统在变换 $\hat{Q}$ 的作用下保持不变的数学表达，此时 $\hat{Q}$ 称为系统的**对称变换**。由于量子力学的可观察量都是和波函数的内积联系在一起的，所以变换后波函数内积应该保持不变，即

$$(\Psi',\Phi')=(\hat{Q}\Psi,\hat{Q}\Phi)=(\Psi,\hat{Q}^{\dagger}\hat{Q}\Phi)=(\Psi,\Phi),$$

所以

$$\hat{Q}^{\dagger}\hat{Q}=\hat{Q}\hat{Q}^{\dagger}=\hat{I}.$$

满足这种条件的变换称为**幺正变换**(unitary transformation)，$\hat{Q}$ 称为幺正算符。

“对称变换”的条件 $[\hat{Q},\hat{H}]=0$ 在形式上和“守恒量”的条件完全一样，我们似乎可以得出 Q 是守恒量的结论，但问题是 $\hat{Q}$ 不一定是 Hermitian 算符。如果这个对称变换依赖于一个连续的实参数，那么可以利用下面的方法由幺正算符得到一个 Hermitian 算符。考虑恒等变换附近的无穷小邻域，即取

$$\hat{Q}=\hat{I}+\mathrm{i}\varepsilon\hat{F},$$

其中 ε 是一个无穷小的实参数，$\hat{F}$ 是一个新的算符。将它代入幺正条件，略去 ε 的高阶项，得到

$$\hat{Q}^{\dagger}\hat{Q}=(\hat{I}-\mathrm{i}\varepsilon\hat{F}^{\dagger})(\hat{I}+\mathrm{i}\varepsilon\hat{F})=\hat{I}+\mathrm{i}\varepsilon(\hat{F}-\hat{F}^{\dagger})=\hat{I},$$

所以

$$\hat{F}=\hat{F}^{\dagger},$$

就是说，$\hat{F}$ 是一个 Hermitian 算符，而且它显然也满足

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

所以它是一个守恒量。这样我们就从对称性得到了守恒量。$\hat{F}$ 称为 $\hat{Q}$ 的无穷小算符，或者 $\hat{Q}$ 的生成元。当然，这样导出的 $\hat{F}$ 可以包含任意的常数因子，也就是说 $\hat{F}$ 的单位并没有确定。

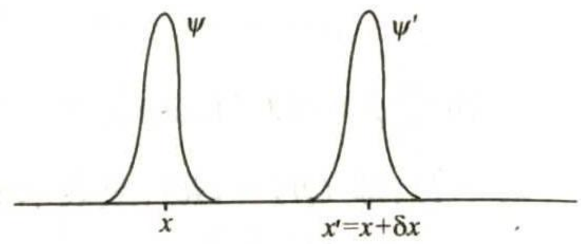
5.2.2 空间平移不变性与动量守恒

先以一维系统为例。考虑沿 x 方向的无穷小平移

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

对于这个式子（变换）可以有两种理解。一种是坐标系并没有移动，物理系统整个地移动了一个小距离；另一种是物理系统没有移动，坐标系移动了一个小距离。通常前者称为“主动的”变换，后者称为“被动的”变换。容易发现，这两种理解是互逆的关系。由于运动是相对的，所以它们没有本质的差别。我们将采用“主动”变换的理解。所以波函数的变换是（见下图）

$$\Psi'(x')=\Psi(x),$$



把无穷小平移变换代入，得到

$$\Psi'(x+\delta x)=\Psi(x),$$

但 x 是变量，所以也可以写

$$\Psi'(x)=\Psi(x-\delta x).$$

如果 δx 是小量，那么

$$\Psi'(x)=\Psi(x-\delta x)=\Psi(x)-\delta x\frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}=\left(1-\delta x\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x).$$

与无穷小对称变换 $\Psi'=(\hat{I}+\mathrm{i}\varepsilon\hat{F})\Psi$ 对比，可以写

$$\Psi'(x)=\left(1-\mathrm{i}\frac{\delta x}{\hbar}\hat{p}_x\right)\Psi(x),$$

其中

$$\hat{p}_x\equiv-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

是一个 Hermitian 算符，而它正是沿 x 方向的动量算符。如果进行的是非无穷小平移变换 $x'=x+a$，那么波函数的变换是

$$\Psi'(x)=\Psi(x-a)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-a)^n}{n!}\frac{\partial^n\Psi}{\partial x^n}=\mathrm{e}^{-a(\partial/\partial x)}\Psi(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,a\,\hat{p}_x/\hbar}\,\Psi(x),$$

$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,a\,\hat{p}_x/\hbar}$ 是一个幺正算符，这称为幺正算符的指数化。另一方面，当系统具有空间平移不变性时，

$$\hat{H}(x+\delta x)=\hat{H}(x),$$

即是

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial x}=0,$$

利用公式 $-\mathrm{i}\hbar(\partial\hat{F}/\partial x)=[\hat{p}_x,\hat{F}]$，发现这导致

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

也就是说，p_x 是一个守恒量。同样的论述也适用于沿 y 和 z 方向的平移，所以三维空间的平移变换是

$$\vec{r}\to\vec{r}'=\vec{r}+\delta\vec{r},$$

这时波函数的变换是

$$\Psi'(\vec{r})=\left(1-\mathrm{i}\frac{\delta\vec{r}}{\hbar}\cdot\hat{\vec{p}}\right)\Psi(x),$$

其中

$$\hat{\vec{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$$

就是三维动量算符。同时，系统的空间平移不变性变为

$$\hat{H}(\vec{r}+\delta\vec{r})=\hat{H}(\vec{r}),$$

所以

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

即三维动量 $\vec{p}$ 是守恒量。

与“空间平移不变性导致动量守恒”相平行的陈述是“时间平移不变性导致能量守恒”。其实我们已经知道：如果 $\hat{H}$ 与时间无关（也就是在时间平移下不变），那么它（也就是能量）是守恒的。

5.2.3 空间旋转不变性与角动量守恒

先考虑一个比较简单的情形：系统绕z轴旋转一个小角度$\delta\varphi$，即做变换$\varphi \to \varphi' = \varphi + \delta\varphi$（$\varphi$就是球坐标中的方位角），那么进行与前面完全类似的推导，可以证明这个变换所对应的无穷小算符是

$$\hat{L}_z = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

即角动量算符的z分量。同理，系统绕x轴或y轴旋转所对应的无穷小算符分别是$\hat{L}_x$和$\hat{L}_y$。

更一般地说，三维空间围绕某个方向的无穷小旋转可以写为

$$\vec{r} \to \vec{r}\,' = \vec{r} + \overrightarrow{\delta\varphi} \times \vec{r},$$

其中$\overrightarrow{\delta\varphi} \equiv \delta\varphi\, \vec{n}$，$\delta\varphi$是旋转的角度，$\vec{n}$是该方向上的单位矢量。假设波函数是标量函数，那么仍然有

$$\Psi'(\vec{r}\,') = \Psi(\vec{r}),$$

所以

$$\Psi'(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} - \overrightarrow{\delta\varphi} \times \vec{r}) = \Psi(\vec{r}) - (\overrightarrow{\delta\varphi} \times \vec{r}) \cdot \nabla\Psi(\vec{r}) = \Big(1 - (\overrightarrow{\delta\varphi} \times \vec{r}) \cdot \nabla\Big)\Psi(\vec{r}),$$

其中$(\overrightarrow{\delta\varphi} \times \vec{r}) \cdot \nabla$可以改写为$\overrightarrow{\delta\varphi} \cdot (\vec{r} \times \nabla)$（因为$\overrightarrow{\delta\varphi}$是常矢量），所以

$$\Psi'(\vec{r}) = \Big(1 - \overrightarrow{\delta\varphi} \cdot (\vec{r} \times \nabla)\Big)\Psi(\vec{r}) = \left(1 - \mathrm{i}\frac{\overrightarrow{\delta\varphi}}{\hbar} \cdot \hat{\vec{L}}\right)\Psi(\vec{r}),$$

其中

$$\hat{\vec{L}} = -\mathrm{i}\hbar\vec{r} \times \nabla = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$$

正是作为矢量的角动量算符。另一方面，空间的旋转不变性直观说来就是空间没有特殊的方向，或者说空间是各向同性的，写成式子就是

$$\hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r} + \overrightarrow{\delta\varphi} \times \vec{r}),$$

在这个时候我们就有

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

所以角动量是守恒的。

5.2.4 离散对称性及离散守恒量

其实，也不能排除幺正算符同时是 Hermitian 算符的情形，就是说$\hat{Q}$同时满足

$$\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger = \hat{Q}^{-1},$$

那么Q本身就是可观察量了。从上式我们发现

$$\hat{Q}^2 = \hat{I},$$

所以$\hat{Q}$的本征值只可能是± 1。所以这是离散的对称性，对应的也是离散的守恒量。

一个典型的例子是空间反射变换$\hat{P}$，

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r}), \quad \hat{P}^2 = \hat{I},$$

它就是一个离散变换。如果

$$\hat{H}(-\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r}),$$

那么就有

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

它导致的守恒量就是宇称。

科学家对于自然界中的对称性一向情有独钟。事实上，能量守恒、动量守恒、角动量守恒、电荷守恒、宇称守恒等等，也确实是经典力学和经典电动力学的基本规律。到了 20 世纪中期，基本粒子物理得到了长足的发展，人们在这里发现了许多与经典世界和宏观世界非常不同的现象，其中包括一些用宇称守恒的概念很难解释的现象，但是大部分人仍然不自觉地把“自然规律满足宇称守恒”当作了一件“不言而喻”的事情。直到 1956 年，李政道和杨振宁基于对实验现象的仔细分析，提出“弱相互作用中宇称不守恒”，并随后被吴健雄领导的小组用非常巧妙的实验所证实，这个“迷信”才被打破。这个发现对现代物理学的发展所做的贡献，是划时代的和影响深远的。我们应该说，在物理学中，对称（守恒）与不对称（不守恒）都是重要的，都是美妙的，二者相辅相成，缺一不可。

§5.3 全同粒子系统波函数的交换对称性

5.3.1 多粒子体系的描写

假设我们有 N 个粒子组成的体系，那么体系的波函数应该和所有粒子的坐标以及时间有关，即 $\Psi=\Psi(q_1,q_2,\cdots,q_N;t)$，其中的“坐标” q 包括了粒子的空间坐标 $\vec{r}$ 和其它一些内部的量子数（比如自旋）。体系的 Hamiltonian 是

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2+U_i(q_i)\right)+V(q_1,\cdots,q_N),$$

其中包括了各个粒子的动能、在外场中的势能以及粒子和粒子之间的相互作用，由此即可写下体系的 Schrödinger 方程。

5.3.2 全同粒子的不可区别性

现在假设多粒子体系中的 N 个粒子是全同粒子。

全同粒子就是质量、电荷、自旋等**内在性质**完全相同的粒子。全同粒子体系例如多电子原子中的电子、固体中的公用电子、原子核中的核子、处在同一个势中的许多原子、等等。显然，对于全同粒子体系，Hamiltonian 中的 m_i 都相同，q_i 也都有相同的组成。但是在量子力学中，全同粒子体系与非全同粒子体系有更深刻的区别。

在经典力学中，即使两个粒子是全同的，它们也仍然是可区别的，因为它们各有自己的轨道。但是在量子力学中，轨道失去了意义，粒子的状态用波函数描写。当两个粒子的波函数在空间中发生重叠的时候，我们无法区分哪个是“第一个”粒子，哪个是“第二个”粒子。所以在量子理论中有**全同粒子不可区别性原理：**

当一个全同粒子体系中各粒子的波函数有重叠的时候，这些全同粒子是不可区别的。

5.3.3 波函数的交换对称性和粒子的统计性质

对全同粒子体系的波函数引入交换算符 $\hat{P}_{ij}$，它的作用是把第 i 个粒子和第 j 个粒子交换位置：

$$\hat{P}_{ij}\Psi(\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots;t)=\Psi(\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots;t),\quad (i\neq j)$$

那么全同粒子的不可区别性告诉我们：这样交换以后的状态与原来的状态是不可区分的，所以

$$\hat{P}_{ij}\Psi=C\,\Psi,\quad (C\text{是常数})$$

而

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}\Psi=\Psi,$$

所以，

$$C^2=1,$$

解得

$$C=+1\ \text{或者}\ -1,$$

也就是说，

$$\hat{P}_{ij}\Psi=+\Psi\ \text{或者}-\Psi.\quad (\text{对任何}i\neq j)$$

假如

$$\hat{P}_{ij}\Psi=+\Psi,$$

则称 Ψ 为交换对称波函数；假如

$$\hat{P}_{ij}\Psi=-\Psi,$$

则称 Ψ 为交换反对称波函数。

交换对称或反对称是全同粒子体系波函数的特殊的、固有的性质，因此也是微观粒子的特殊的、固有的性质。它决定了粒子所服从的统计。实验表明，粒子的统计性和它的自旋有完全确定的关系。

自旋为整数的粒子，波函数是交换对称的，服从 Bose-Einstein 统计，称为玻色子(boson)。例如光子（自旋为 1）、介子（自旋为 0）。

自旋为半整数的粒子，波函数是交换反对称的，服从 Fermi-Dirac 统计，称为费米子(fermion)。例如电子、质子、中子（自旋都是$1/2$）。

原子核、原子、分子这样的粒子是由质子、中子、电子这些更基本的粒子组成的，称为复合粒子。决定复合粒子的统计性质的规则是：如果一个复合粒子包含偶数个费米子，那么它是玻色子；如果它包含奇数个费米子，那么它还是费米子；它包含的玻色子的数目对此没有影响。这个规则从交换对称性的

角度来看是不难理解的，而且，偶数个费米子的总自旋一定是整数，而奇数个费米子的总自旋一定是半整数，所以这个规则也和自旋-统计性关系一致。

对于全同粒子体系，它的 Hamiltonian 变成了

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\left(\nabla_i^2+U(q_i)\right)+V(q_1,\cdots,q_N),$$

其中的m和$U(q)$对所有的粒子都一样，$V(q_1,\cdots,q_N)$对任何两个粒子的交换也不变，所以交换算符$\hat{P}_{ij}$和这个$\hat{H}$是对易的：

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

这意味着$\hat{P}_{ij}$是守恒量，也就是说，只要在初始时刻波函数具有某种交换对称性，那么在此后的任何时刻它永远保持同样的交换对称性。所以，波函数的交换对称性是与量子力学的基本动力学相容的。

5.3.4 交换对称或反对称波函数的构成　泡利(Pauli)不相容原理

一般地说，一个全同粒子体系的波函数是解 Schrödinger 方程得到的，原始的解未必有确定的交换对称性。所以我们要对它进行对称化或反对称化。这里我们只考虑比较简单的情形：无耦合体系，即体系的总波函数是单个粒子波函数的乘积：

$$\psi(q_1,\cdots,q_N)=\psi_1(q_1)\cdots\psi_N(q_N).$$

这称为独立粒子近似。以二粒子体系为例，未进行对称化或反对称化的波函数是

$$\psi_{\mathrm{I}}(q_1,q_2)=\psi_1(q_1)\psi_2(q_2),$$

假设ψ_1和ψ_2是不同的函数，那么对称化的波函数是：

$$\psi_{\mathrm{S}}(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)+\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)\right],$$

而反对称化的波函数是：

$$\psi_{\mathrm{A}}(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)-\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)\right].$$

所以，对于不可区别的粒子，我们只能说体系中“有一个粒子处在状态ψ_1，一个粒子处在状态ψ_2”，而不能说“第一个粒子处在状态ψ_1，第二个粒子处在状态ψ_2”。

类似的方法可以推广到N个粒子的体系。特别是，N个费米子的反对称化波函数是：

$$\psi_{\mathrm{A}}(q_1,\cdots,q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_1(q_1) & \psi_1(q_2) & \cdots & \psi_1(q_N)\\ \psi_2(q_1) & \psi_2(q_2) & \cdots & \psi_2(q_N)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \psi_N(q_1) & \psi_N(q_2) & \cdots & \psi_N(q_N)\end{vmatrix}.$$

这称为 Slater 行列式。从这个表达式很容易看出：如果在$\psi_1,\cdots,\psi_N$当中有任何两个是相同的函数，那么$\psi_{\mathrm{A}}(q_1,\cdots,q_N)\equiv 0$。所以我们有

Pauli 不相容原理：不可能有两个或更多的费米子处于完全相同的量子状态中。

要注意这是一个纯量子力学的原理，在经典力学中不存在对应的概念。多粒子体系的对称化波函数的构成要复杂得多，它强烈地依赖于$\psi_1,\cdots,\psi_N$当中有多少个是相同的，这里不再细讲。

波函数的对称化或者反对称化会对系统的性质产生重要的影响。假设q是粒子的空间坐标，让我们考虑一个双粒子体系的两个粒子的位置互相重合（$\vec{r}_1=\vec{r}_2=\vec{r}$）的几率。对于波函数$\psi_{\mathrm{I}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$，这个几率是$|\psi_1(\vec{r})\psi_2(\vec{r})|^2$，对于交换对称波函数$\psi_{\mathrm{S}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$，它是$2|\psi_1(\vec{r})\psi_2(\vec{r})|^2$，而对于交换反对称波函数$\psi_{\mathrm{A}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$，它是$0$。所以，空间波函数的对称化使得粒子趋向于互相靠拢，而反对称化使得粒子趋向于互相远离。注意，这完全是**统计的规律**在起作用，实际上并不存在粒子之间“实在的”相互作用，但是它显然也有物理上可观察的效应。比如：所谓 Bose-Einstein 凝聚，就是全同玻色子系统在统计规律的作用下在温度接近绝对零度时发生的大量粒子凝聚在基态的现象，而在白矮星和中子星中因统计规律产生的费米压强抵抗了万有引力产生的引力坍缩而使星体保持平衡。Pauli 不相容原理在解释多电子原子中的电子壳层、固体中的能带填充、化学中的两电子共价键等等现象方面起了决定性的作用。在自然界

这个大厦中，费米子起着砖块的作用，而玻色子起着粘合剂的作用，它们合一起构建出了我们所看到的如此丰富多彩的宇宙世界，二者缺一不可。

*5.3.5 自由电子气 费米面

考虑由 N 个无相互作用的电子构成的系统，这样的系统称为自由电子气。假设系统占有的体积是 V，系统中的电子都处在动量本征态。根据动量本征函数的箱归一化方法，在动量空间中，动量本征值都出现在以 h/L 为晶格常数的立方晶格上，所以一个量子态平均占有的体积是 $h^3/V\ (V=L^3)$（只考虑粒子的空间运动）。电子的能量是 $\varepsilon=\vec{p}^2/2m$，在温度 $T=0\,\mathrm{K}$ 的时候，由于电子是费米子，所以系统中的电子将从 $\varepsilon=0$ 的能级开始填充，一直填充到某个 $\varepsilon=\varepsilon_{\mathrm{F}}$（称为费米能量）的能级，对应的电子动量是 $p_{\mathrm{F}}\equiv\sqrt{2m\varepsilon_{\mathrm{F}}}$。动量空间的体积元 $p^2dp\,d\Omega$ 对方向积分以后成为 $4\pi p^2dp$，所以有关系

$$\int_0^{p_{\mathrm{F}}}\frac{V}{h^3}8\pi p^2dp=N,\qquad (p_{\mathrm{F}}=\sqrt{2m\varepsilon_{\mathrm{F}}})$$

其中 4π 变为 8π 的原因是每一个空间运动状态可以容纳自旋向上和向下的两个电子，这就决定了系统的费米能量为

$$\varepsilon_{\mathrm{F}}=\frac{h^2}{2m}\left(\frac{3}{8\pi}\frac{N}{V}\right)^{2/3},$$

对应的电子动量为

$$p_{\mathrm{F}}=h\left(\frac{3}{8\pi}\frac{N}{V}\right)^{1/3}.$$

在动量空间中以 p_{F} 为半径的球面称为费米面。所以，在 $T=0$ 时，系统中的电子将填满被费米面包围的一个球体，当温度升高时，将首先是靠近费米面的那些电子被激发到费米面之外。这个图像能够说明自由电子气的许多性质。费米面是固体物理中的一个重要概念。

*§5.4　Schrödinger 图画和 Heisenberg 图画

*5.4.1 Schrödinger 方程初值问题的形式解

Schrödinger 方程是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t}=\hat{H}\,\Psi(t),$$

通常还给出$\Psi(t)$的初始条件

$$\Psi(t)\big|_{t=0}=\Psi_0.$$

假如$\hat{H}$与时间无关，那么这个问题的形式解是

$$\Psi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\Psi_0,$$

因为这时

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar})\Psi_0=\hat{H}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\Psi_0=\hat{H}\,\Psi(t).$$

通常记

$$U(t,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}$$

称为时间演化算符。直接计算就可以证明$U(t,0)$是幺正算符，即

$$U^\dagger(t,0)U(t,0)=U(t,0)U^\dagger(t,0)=\hat{I},$$

所以它保证了几率守恒。更一般地，定义从时间t_0到时间t_1的演化算符为

$$U(t_1,t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t_1-t_0)/\hbar},$$

也就是说

$$\Psi(t_1)=U(t_1,t_0)\Psi(t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t_1-t_0)/\hbar}\,\Psi(t_0),$$

那么$U(t_1,t_0)$满足如下的乘法规则

$$U(t_2,t_1)U(t_1,t_0)=U(t_2,t_0).$$

所以，在量子力学里，系统的状态随时间的演化是一系列的幺正变换，类似于在经典力学里，系统的状态随时间的演化是一系列的正则变换。

*5.4.2　Schrödinger 图画

在量子力学里，波函数和算符其实并不是物理上可以直接观察的对象。量子力学里可以观察的量是内积(Ψ,Φ)（如果它是复数，就观察它的模和相位）。在这个意义上，只要内积不变，我们用什么波函数和算符来计算它，实际上是有选择的余地的。

到目前为止，我们一直采用这样的形式来表达量子力学：波函数与时间有关并且服从 Schrödinger 方程，而力学量算符与时间无关。用式子写出来就是

$$\begin{cases}\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\Psi(t)}{\partial t}=\hat{H}\,\Psi(t),\\[2ex]\dfrac{\partial\hat{F}}{\partial t}=0.\end{cases}$$

这种形式称为 Schrödinger 图画(picture)。为明确起见，以下在Ψ和$\hat{F}$的右上角都加注一个(S)来表明它们是在 Schrödinger 图画中：

$$\begin{cases}\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\Psi^{(\mathrm{S})}(t)}{\partial t}=\hat{H}\,\Psi^{(\mathrm{S})}(t),\\[2ex]\dfrac{\partial\hat{F}^{(\mathrm{S})}}{\partial t}=0.\end{cases}$$

但是对于算符$\hat{H}$我们没有加注(S)，其原因下面就会见到。

*5.4.3　Heisenberg 图画

现在我们对$\Psi^{(\mathrm{S})}$和$\hat{F}^{(\mathrm{S})}$进行如下的变换

$$\begin{cases}\Psi^{(\mathrm{H})}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\Psi^{(\mathrm{S})}(t),\\ \hat{F}^{(\mathrm{H})}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\hat{F}^{(\mathrm{S})}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}.\end{cases}$$

我们知道，这是一个幺正变换。$\Psi^{(\mathrm{H})}$ 和 $\hat{F}^{(\mathrm{H})}$ 分别称为 Heisenberg 图画中的波函数和算符。从第二个变换式可以看出 $\hat{H}^{(\mathrm{H})}=\hat{H}^{(\mathrm{S})}$，所以这两个图画中的 Hamiltonian 是完全一样的，因此 $\hat{H}$ 不必加注。

注意到前面的公式 $\Psi^{(\mathrm{S})}(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\Psi_0^{(\mathrm{S})}$，我们发觉实际上

$$\Psi^{(\mathrm{H})}=\Psi_0^{(\mathrm{S})}.$$

所以 $\Psi^{(\mathrm{H})}$ 是与时间无关的。再计算一下 $\hat{F}^{(\mathrm{H})}$ 随时间的演化，

$$\begin{aligned}\frac{\partial\hat{F}^{(\mathrm{H})}}{\partial t}&=\left(\frac{\partial\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}}{\partial t}\right)\hat{F}^{(\mathrm{S})}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\hat{F}^{(\mathrm{S})}\left(\frac{\partial\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}}{\partial t}\right)\\&=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\hat{F}^{(\mathrm{S})}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\hat{F}^{(\mathrm{S})}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\hat{H}\\&=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\hat{F}^{(\mathrm{H})}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{F}^{(\mathrm{H})}\hat{H}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F}^{(\mathrm{H})},\hat{H}].\end{aligned}$$

所以总起来说 $\Psi^{(\mathrm{H})}$ 和 $\hat{F}^{(\mathrm{H})}$ 服从下面的方程：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial\Psi^{(\mathrm{H})}}{\partial t}=0,\\[2ex] \dfrac{\partial\hat{F}^{(\mathrm{H})}}{\partial t}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F}^{(\mathrm{H})},\hat{H}].\end{cases}$$

这就是 Heisenberg 图画中的基本方程组。由于上述变换是幺正变换，所以在这两种图画中算出的波函数内积和算符平均值都是一样的，也就是说，它们给出完全一样的物理预言。不难发现，对第二个方程取平均值，就直接得到了 Ehrenfest 定理。

量子力学的 Schrödinger 图画比较难于和经典力学对比，因为在 Schrödinger 图画中力学量算符是与时间无关的，而在经典力学中力学量是随时间变化的。但是 Heisenberg 图画的形式却和经典力学相当接近。比如，经典力学里的正则运动方程是

$$\frac{dF}{dt}=\{F,H\}_{\mathrm{P.B.}},$$

在其中把各个力学量换成算符，并且用对易括号除以 $\mathrm{i}\hbar$ 代替 Poisson 括号，我们就得到了 Heisenberg 图画里力学量算符所满足的方程

$$\frac{\partial\hat{F}^{(\mathrm{H})}}{\partial t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F}^{(\mathrm{H})},\hat{H}].$$

所以这个方程也被称为量子力学的 Heisenberg 运动方程。

本课此后仍将使用 Schrödinger 图画，但是在量子场论中更经常使用 Heisenberg 图画。