第四章 对称性理论

§ 19 空间对称性和守恒定律

§ 19−1 概述

一、研究内容

研究时空变换和相关的算符 研究变换下的对称性和相应的守恒定律

二、对称性和守恒定律

空间平移对称性与动量守恒 空间转动对称性与角动量守恒 时间平移对称性与能量守恒 空间反演对称与宇称守恒 量子力学相移对称与电荷守恒······

§ 19-2 空间对称变换

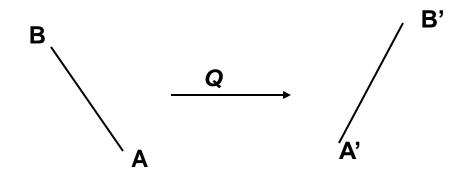
一、位置变换

设变换 Q是三维位形空间的算符,它将点 \mathbf{r}' 变为另一点 \mathbf{r}'

$$\mathbf{r}' = Q\mathbf{r} \tag{19.1}$$

对每一个r,r′都有确定值。

变换 Q 是不改变任何两点距离的那些变换:



对称变换群:对某些物理系统,若位置变换的一个集合 $\{Q_i\}_{(i=1,2,3,\cdots)}$ 是此系统的对称变换,即保持这个系统不变的变换,则这个集合必构成一个群,称为这个系统的对称变换群。

满足群的四个条件:

1. 单位元存在:

$$1 \cdot \vec{r} = \vec{r}$$

$$Q = 1$$

2. 结合律成立:

$$Q_1(Q_2Q_3) = (Q_1Q_2)Q_3$$

3. 封闭性:

$$Q = Q_1 Q_2$$

4. 逆元存在:

$$\vec{r}' = Q\vec{r} \Rightarrow \vec{r} = Q'\vec{r}', \quad Q' = Q^{-1}$$

二、态函数的变换

态函数 $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ 用算符 Q 作一个整体的变换。

整体变换:新函数在新点处的值等于老函数在老点上的值,即

$$\psi'(r') = \psi(r)$$
 $\psi'(Q\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$ $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(Q^{-1}\mathbf{r})$ (19.3)

新老函数的关系用一个函数空间的变换算符 D(Q) 表示:

$$\psi'(\mathbf{r}) = \hat{D}(Q)\psi(\mathbf{r}) = \psi(Q^{-1}\mathbf{r})$$
(19.4)

变换不影响其归一化, D(Q)是幺正算符:

$$\hat{D}^{+}(Q)\hat{D}(Q) = \hat{D}(Q)\hat{D}^{+}(Q) = 1$$

考虑连续两次变换: $(Q \cup P)$ r作用)

$$\hat{D}(Q_1)\hat{D}(Q_2)\psi(\mathbf{r}) = \hat{D}(Q_1)\psi(Q_2^{-1}\mathbf{r}) = \psi[Q_2^{-1}(Q_1^{-1}\mathbf{r})]$$

$$= \psi[(Q_2^{-1}Q_1^{-1})\mathbf{r}] = \psi[(Q_1Q_2)^{-1}\mathbf{r}] = \hat{D}(Q_1Q_2)\psi(\mathbf{r})$$

得
$$\hat{D}(Q_1)\hat{D}Q_2) = \hat{D}(Q_1Q_2)$$

(19.5)

 $\{\hat{D}(Q)\}$ 构成一个群。

▲ 群 {*p̂*(*Q*) 与群 {*Q*} 是什么关系呢?

$$\hat{D}(Q)\hat{D}(Q^{-1}) = \hat{D}(QQ^{-1}) = \hat{D}(1) = 1$$

所以

$$\hat{D}^{-1}(Q) = \hat{D}(Q^{-1})$$

(19.6)

同态,即 $Q \rightarrow \hat{D}(Q)$

三、态矢量的变换

在Hilbert空间中,状态 $|\psi\rangle$ 经过变换 Q 之后成为新态 $|\psi'\rangle$,则可定出一个幺正变换算符 D(Q):

$$|\psi'\rangle = D(Q)|\psi\rangle$$

(19.7)

由于
$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$
 $\psi'(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi' \rangle$ $\psi'(\mathbf{r}) = \hat{D}(Q)\psi(\mathbf{r}) = \psi(Q^{-1}\mathbf{r})$

可得

$$\psi'(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi' \rangle = \hat{D}(Q) \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \langle Q^{-1} \mathbf{r} | \psi \rangle$$

即

$$\langle \mathbf{r} | D(Q) | \psi \rangle = \hat{D}(Q) \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \langle Q^{-1} \mathbf{r} | \psi \rangle$$

所以

$$\langle \mathbf{r} | D(Q) = \langle Q^{-1} \mathbf{r} |$$

(19.8)

$$\langle \mathbf{r} | D(Q) = \hat{D}(Q) \langle \mathbf{r} |$$

(19.9)

(19.8): Hilbert空间中D(Q)的定义式。

(19.9): D(Q)与 $\hat{D}(Q)$ 的形式关系。

右矢形式:
$$D^{+}(Q)|\mathbf{r}\rangle = D^{-1}(Q)|\mathbf{r}\rangle = |Q^{-1}\mathbf{r}\rangle$$

两边乘
$$D(Q)$$
,有 $|\mathbf{r}\rangle = D(Q)|Q^{-1}\mathbf{r}\rangle$

令
$$\mathbf{r} \to Q\mathbf{r}$$
 , 得 $|Q\mathbf{r}\rangle = D(Q)|\mathbf{r}\rangle$

則
$$D(Q)|\mathbf{r}\rangle = |Q\mathbf{r}\rangle$$

四、算符的变换

设对称变换前, $|\varphi\rangle = A|\psi\rangle$

现在分别对 $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ 作对称变换Q,即

$$\left|\varphi'\right\rangle = D(Q)\left|\varphi\right\rangle, \qquad \left|\psi'\right\rangle = D(Q)\left|\psi\right\rangle$$

$$\left|\varphi'\right\rangle = A'\left|\psi'\right\rangle$$

则
$$A' = D(Q)AD^{-1}(Q)$$

$$\mathbf{R}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$$

用
$$D(Q)$$
作用,得

用
$$D(Q)$$
作用,得 $D(Q)RD^{-1}(Q)D(Q)|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}D(Q)|\mathbf{r}\rangle$

所以
$$\mathbf{R}'|Q\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|Q\mathbf{r}\rangle$$
 (19.13)

用Q-1作用在等式 $\mathbf{R}|Q\mathbf{r}\rangle = Q\mathbf{r}|Q\mathbf{r}\rangle$

$$\mathbf{R}|Q\mathbf{r}\rangle = Q\mathbf{r}|Q\mathbf{r}\rangle$$

(本征值为<math>Or的R的本征方程)

$$Q^{-1}\mathbf{R}|Q\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|Q\mathbf{r}\rangle \qquad (19.14)$$

因为|Qr>为任意矢量,所以比较(19.13)和(19.14),

得

$$\mathbf{R}' = Q^{-1}\mathbf{R} = D(Q)\mathbf{R}D^{-1}(Q)$$

$$\mathbf{R}' = Q^{-1}\mathbf{R} = D(Q)\mathbf{R}D^{-1}(Q)$$

$$\mathbf{R}$$
 的双重身份: $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} R_i \mathbf{e}_i$

- ightharpoonupHilbert空间中的算符,D(Q) 只对 R_i 作用
- ightharpoonup位形空间中的矢量, Q^{-1} 只对 $\mathbf{e}_{\mathbf{i}}$ 作用。

§ 19-3 空间反演

一、空间反演算符

空间反演变换 P 的定义是: $P\mathbf{r} = -\mathbf{r}$

空间反演算符 P 是: $D(P)|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle$

$$D(P)|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle$$

通常: $D(P) \rightarrow P$, $P|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle$

空间反演群 $\{1,P\}$: PP=1, $P^{-1}=P$, 1P=P1=P

函数空间的空间反演算符 \hat{P} :

根据19.4式: $\hat{D}(Q)\psi(\mathbf{r}) = \psi(Q^{-1}\mathbf{r})$ 和 $P^{-1} = P$

$$\hat{P}\psi(r) = \psi(-r), \quad \hat{P}^2 = 1$$

因为 $\hat{P}^2 = 1$, 所以 \hat{P} 的本征值为 ± 1 :

$$\hat{P}\psi(r) = \psi(-r) = \begin{cases} \psi(r) & \text{偶宇称} \\ -\psi(r) & \text{奇宇称} \\ \pm \text{他情况} & \text{无确切宇称} \end{cases}$$

空间反演算符既是幺正算符 $P^+ = P^{-1}$

又是厄米算符 $P^+ = P$

$$P^{+} = P^{-1} = P$$

与 $P|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle$ 相应的左矢形式为:

$$\langle r|P^{+} = \langle r|P = \langle -r| = \hat{P}\langle r|$$

二、算符在空间反演下的变换

1. 位置算符R

在Hilbert空间中:

$$PRP|\mathbf{r}\rangle = PR|-\mathbf{r}\rangle = P(-\mathbf{r})|-\mathbf{r}\rangle = (-\mathbf{r})P|-\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{R}|\mathbf{r}\rangle$$

所以 $PRP = -\mathbf{R}$ (19.23)

在函数空间中:

$$\hat{P}\hat{\mathbf{R}}\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \hat{P}\hat{\mathbf{R}}\psi(-\mathbf{r}) = \hat{P}[\mathbf{r}\psi(-\mathbf{r})] = (-\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = -\hat{R}\psi(\mathbf{r})$$

所以

$$\hat{P}\hat{\mathbf{R}}\hat{P} = -\hat{\mathbf{R}}$$

(19.24)

2. 动量算符P

曲于
$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}} = \langle -\mathbf{r} | -\mathbf{p} \rangle$$

順
$$P|\mathbf{p}\rangle = P\sum |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \sum |-\mathbf{r}\rangle\langle-\mathbf{r}|-\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$$
(19.25)

所以

$$PPP|\mathbf{p}\rangle = PP|-\mathbf{p}\rangle = P(-\mathbf{p})|-\mathbf{p}\rangle = -\mathbf{p}P|-\mathbf{p}\rangle = -\mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle = -\mathbf{P}|\mathbf{p}\rangle$$

$$PPP = -\mathbf{P}$$
(19.26)

3. 轨道角动量算符L

$$P\mathbf{L}P = (P\mathbf{R}P) \times (P\mathbf{P}P) = (-\mathbf{R}) \times (-\mathbf{P}) = \mathbf{L}$$

 $P\mathbf{L}P = \mathbf{L}$

所以:

$$PLPP = PL = LP$$
 (19.27)

即P与L对易

共同的本征函数是球谐函数

矢量算符: 在空间反演下改变符号,如R,P 轴矢量(赝矢量)算符:

在空间反演下不变,如角动量算符L 并规定自旋算符是轴矢量算符。

真标量: 在空间反演下不改变符号

赝标量: 在空间反演下改变符号

§ 19-4 空间平移

一、平移群

无限小空间平移变换 Q(dh)

$$\mathbf{r}' = Q(d\lambda)\mathbf{r} = \mathbf{r} + d\lambda \qquad (19.28)$$

 $Q(\lambda)$ 不是线性算符, $Q(\lambda)2r \neq 2Q(\lambda)r$

在位置表象中,将 $\hat{D}(d\lambda)$ 作用于态函数 $\psi(\mathbf{r})$ 上,

得
$$\psi'(\mathbf{r}) = \hat{D}(d\lambda)\psi(\mathbf{r}) = \psi[Q^{-1}(d\lambda)\mathbf{r}] = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{d}\lambda)$$

$$= \psi(\mathbf{r}) - d\lambda \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) = (1 - \frac{i}{\hbar}d\lambda \cdot \hat{\mathbf{P}})\psi(\mathbf{r})$$

$$\hat{D}(d\lambda) = 1 - \frac{i}{\hbar}d\lambda \cdot \hat{\mathbf{P}}$$

对于有限的平移,有

$$\hat{D}(\lambda) = \hat{D}(d\lambda) \cdot \hat{D}(d\lambda) \cdot \hat{D}(d\lambda) \cdots \hat{D}(d\lambda)$$

$$= \lim_{n \to \infty} (1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda}{n} \cdot \hat{\mathbf{P}})^n = e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda \cdot \hat{\mathbf{P}}}$$
(19.30)

 $\hat{D}(\lambda)$ 是线性算符, $\{\hat{D}(\lambda)\}$ 与 $\{Q(\lambda)\}$ 同构。

二、态矢量的平移算符

在Hilbert空间中,有
$$|\psi'\rangle = D(\lambda)|\psi\rangle$$
 (19.31)

$$D(\lambda) = e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda \cdot \mathbf{P}}$$
 (19.32)

由 $D(Q)|\mathbf{r}\rangle = |Q\mathbf{r}\rangle$,知

$$D(\lambda)|\mathbf{r}\rangle = |Q(\lambda)\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \lambda\rangle$$
 (19.33)

所以态矢量的平移算符正是位置本征矢量的上升算符

$$Q^+(\lambda)$$

三、位置算符和动量算符的平移变换

对位置算符R:由(19.15)式

$$\mathbf{R}' = Q^{-1}\mathbf{R} = D(Q)\mathbf{R}D^{-1}(Q)$$

得
$$\mathbf{R}' = D(\lambda)\mathbf{R}D^{-1}(\lambda) = Q^{-1}(\lambda)\mathbf{R} = \mathbf{R} - \lambda$$
 (19.34)

对动量算符**P**,由
$$D(\lambda) = e^{-\frac{l}{\hbar}\lambda \cdot \mathbf{P}}$$
 知 $[D(\lambda), \mathbf{P}] = 0$

所以
$$\mathbf{P}' = D(\lambda)\mathbf{P}D^{-1}(\lambda) = \mathbf{P}$$
 (19.35)

即动量算符在平移变换下是不变的。

§ 19-5 空间转动

一、空间转动和转动群

绕n轴转 $d\varphi$ 角的无限小转动算符 $Q(nd\varphi)$:

$$\mathbf{r}' = Q(\mathbf{n}d\varphi)\mathbf{r} = \mathbf{r} + d\mathbf{r} = \mathbf{r} + d\varphi\mathbf{n} \times \mathbf{r}$$

3D正当转动群:绕所有的轴转一切角度的正当转动 算符的集合 $\{Q(\mathbf{n}\varphi)$ 构成的群。

二、函数空间和Hilbert空间中的转动算符

在位置表象中态函数 $\psi(\mathbf{r})$ 的转动变换是

$$\psi'(\mathbf{r}) = \hat{D}(\mathbf{n}d\varphi)\psi(\mathbf{r}) = \psi[Q^{-1}(\mathbf{n}d\varphi)\mathbf{r}] \qquad (\mathbf{由 19.4})$$

$$= \psi(\mathbf{r} - d\varphi\mathbf{n} \times \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - d\varphi\mathbf{n} \times \mathbf{r} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) \quad (\mathbf{略高阶项})$$

$$= (1 - \frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n} \cdot \mathbf{L})\psi(\mathbf{r})$$

$$(\hat{\mathbf{D}} \mathbf{H} \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{C} = \mathbf{A} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{C} \mathbf{\hat{n}} \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla)$$

函数空间中:
$$\hat{D}(\mathbf{n}d\varphi) = 1 - \frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}$$

$$\hat{D}(\mathbf{n}\varphi) = \lim_{m \to \infty} (1 - \frac{i}{\hbar}\frac{\varphi}{m}\mathbf{n} \cdot \mathbf{L})^m = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}}$$

Hilbert空间中:

$$D(\mathbf{n}d\varphi) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\varphi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}$$

$$D(\mathbf{n}\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}}$$

三、算符的变换

1.位置算符R

$$\mathbf{R}' = D(\mathbf{n}d\varphi)\mathbf{R}D^{-1}(\mathbf{n}d\varphi)$$

$$= (1 - \frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n} \cdot \mathbf{L})\mathbf{R}(1 + \frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{n} \cdot \mathbf{L})$$

$$= \mathbf{R} - \frac{i}{\hbar}d\varphi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{L})\mathbf{R} + \frac{i}{\hbar}d\varphi\mathbf{R}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}) + \frac{(d\varphi)^{2}}{\hbar^{2}}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{L})^{2}\mathbf{R}$$

$$= \mathbf{R} - \frac{i}{\hbar}d\varphi[\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{R}]$$

$$\therefore (d\varphi)^{2} \to 0$$

$$= \mathbf{R} - \frac{i}{\hbar} d\varphi \sum_{ij} n_i [L_i, R_j] \mathbf{j}$$

$$= \mathbf{R} - \frac{i}{\hbar} d\varphi \sum_{ijk} i\hbar \varepsilon_{ijk} n_i R_k \mathbf{j} \qquad \qquad :: (6.19) \ \, \mathbf{R}$$

$$= \mathbf{R} - d\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{R} = Q^{-1} (\mathbf{n} d\varphi) \mathbf{R} \qquad \qquad :: \mathbf{A} \times \mathbf{B} = \sum_{i:i} \varepsilon_{ijk} A_i B_j \mathbf{e}_k$$

 \mathcal{E}_{ijk} : Levi-Civita symbol

2.动量算符P和角动量算符L:

$$\mathbf{P}' = D(\mathbf{n}d\varphi)\mathbf{P}D^{-1}(\mathbf{n}d\varphi) = \mathbf{P} - d\varphi\mathbf{n} \times \mathbf{P} = Q^{-1}(\mathbf{n}d\varphi)\mathbf{P}$$
$$\mathbf{L}' = D(\mathbf{n}d\varphi)\mathbf{L}D^{-1}(\mathbf{n}d\varphi) = \mathbf{L} - d\varphi\mathbf{n} \times \mathbf{L} = Q^{-1}(\mathbf{n}d\varphi)\mathbf{L}$$

四、标量算符和矢量算符

1. 标量算符: 在转动下不变得单分量算符, 满足

$$D(\mathbf{n}\varphi)SD^{-1}(\mathbf{n}\varphi) = S$$
 \mathbf{g} $[S, D(\mathbf{n}d\varphi)] = 0$

2. 矢量算符:在3D位形空间转动下,函数空间或Hilbert空间中与位置算符有同样变换特性的三分量算符,满足 $D(\mathbf{n}\varphi)\mathbf{V}D^{-1}(\mathbf{n}\varphi)=Q^{-1}(\mathbf{n}\varphi)\mathbf{V}$

标量和矢量算符按空间反演变换下的性质分别有"真"和"赝"或"真"和"轴"之分。

矢量算符的任意分量与轨道角动量算符的任意分量的对易关系:

$$[\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{m} \cdot \mathbf{V}] = i\hbar \mathbf{n} \times \mathbf{m} \cdot \mathbf{V}$$

五、自旋空间中的转动变换

自旋是一种角动量,S与L一样是轴矢量,即在空间反演下不改变符号;S与L三个分量的对易关系类似:

$$[S_i, S_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k$$

自旋空间中与空间转动 $Q(\mathbf{n}d\varphi)$ 对应的

变换算符 $D'(\mathbf{n}d\varphi)$ 为:

$$D'(\mathbf{n}\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}}$$

在带有自旋粒子的态空间(直积空间)中:

空间平移算符为 $D(\lambda) = e^{-\frac{l}{\hbar}\lambda \cdot \mathbf{P}}$,并只对位形 Hilbert空间有作用:

空间反演算符为 $P|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle$, 对自旋算符的作用为

$$PSP = S$$

空间转动算符为 $D(\mathbf{n}\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}}$

§ 19-6 空间变换对称性和守恒定律

一、系统在空间变换下的对称性

系统在某一空间对称变换下具有不变性或对称性, 不是指系统在变换后状态不变,而是指系统在变换 前后运动规律不变。

设系统的运动满足Schrödinger方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

施以一个空间变换 $\mathbf{r} \to Q(\lambda)\mathbf{r} = \mathbf{r}'$

在空间变换下,Schrödinger方程变为:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} D(Q) |\psi(t)\rangle = D(Q) H D^{-1}(Q) D(Q) |\psi(t)\rangle$$

如果系统在这一变换下具有不变性或对称性,则要求:

$$D(Q)HD^{-1}(Q) = H$$

即
$$[D(Q), H] = 0$$

二、守恒量

1. 平移对称性与动量守恒:

空间平移算符:
$$D(\lambda) = e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda \cdot \mathbf{P}}$$
 如果 $[H, D(\lambda)] = 0$ 有 $[H, \lambda \cdot \mathbf{P}] = 0$

则此系统具有 λ 方向上的平移对称性, λ 方向的动量分量是守恒量。

如果 $[H, \mathbf{P}] = 0$, 则所有方向上的动量守恒。

2. 转动对称性与角动量守恒:

空间转动算符
$$D(\mathbf{n}\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}}$$

如果 $[H, \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}] = 0$ 则角动量在 \mathbf{n} 方向上的分量守恒。

如果 $[H, \mathbf{J}] = 0$ 则角动量 \mathbf{J} 是一个守恒量。

3. 空间反演对称性与宇称守恒:

如果 [H,P]=0 则宇称守恒。

三、其他空间变换对称性

晶体点群对称性: 离散的对称性,没有守恒量相对应。