幺正算符和体系对称性

幺正算符

如果线性算符 $\hat{U}$ 的逆算符 $\hat{U}^{-1}$ 存在，且对任意 ψ, φ 满足

$$\int \psi^* \varphi d\tau = \int \left(\hat{U}\psi\right)^* \left(\hat{U}\varphi\right) d\tau$$

则称算符 $\hat{U}$ 为幺正算符（Unitary）

幺正算符相当于对波函数做幺正变换，而不改变波函数的内积，保持了波函数的正交归一性(经典物理中坐标变换)

$$\boxed{\text{求证：若 } \hat{U} \text{ 是幺正算符，则 } \hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = I,\ \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}}$$

$$\boxed{\text{求证：若 } \hat{U} \text{ 是幺正算符，则 } \hat{U}^+ \text{ 也是幺正算符}}$$

$$\boxed{\text{求证：若 } \hat{U}_1,\ \hat{U}_2 \text{ 是幺正算符，则 } \hat{U}_1\hat{U}_2 \text{ 也是幺正算符}}$$

幺正算符和厄密算符的关系

$\hat{U} = I$ 显然是一个平凡的幺正算符。设 $\hat{U}$ 无限接近于单位算符I，则可以用一个极小参量 ε （连续变化）表示 $\hat{U}$：

$$\hat{U} = I + i\varepsilon\hat{F}, \quad (\varepsilon \rightarrow 0)$$

利用 $\hat{U}$ 的幺正性得(省略 ε 的高次项)：

$$\hat{U}^{+}\hat{U} = \left(I - i\varepsilon\hat{F}^{+}\right)\left(I + i\varepsilon\hat{F}\right) = 1 + i\varepsilon\left(\hat{F} - \hat{F}^{+}\right) = I$$

于是 $\hat{F} = \hat{F}^{+}$ ， 也就是说 $\hat{F}$ 必须是一个厄密算符。我们称 $\hat{F}$ 是 $\hat{U}$ 的生成元（generator）

如果 $\hat{U}$ 不是无限接近I的，我们可以通过n次无限小的幺正操作实现任意有限大小的参量a的幺正变换：

$$\hat{U} = \lim_{n\rightarrow\infty}\left(I + i\frac{a}{n}\hat{F}\right)^{n} = e^{ia\hat{F}}$$

幺正算符和厄密算符

算符出现在指数上也可以通过泰勒展开式来理解：

$$\hat{U} = e^{ia\hat{F}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (ia)^n \hat{F}^n$$

例：时间演化算符就是一个幺正算符

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} t\hat{H}}, \quad \hat{U}^{-1}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} t\hat{H}}$$

$$\psi(\vec{r},t) = \hat{U}(t)\psi(\vec{r},0)$$

$$\int \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)d\vec{r} = \int \left(e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(\vec{r},0)\right)^* e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(\vec{r},0)d\vec{r}$$

$$= \int \psi^*(\vec{r},0)\left(e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\right)^+ e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(\vec{r},0)d\vec{r} = \int \psi^*(\vec{r},0)\psi(\vec{r},0)d\vec{r} = 1$$

幺正算符和幺正变换

用幺正算符实现的波函数和算符的变换称为幺正变换：

$$\begin{cases} \psi \quad \rightarrow \quad \psi' = \hat{U}\psi \\ \hat{A} \quad \rightarrow \quad \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+} \end{cases}$$

与经典物理中的坐标变换相似，幺正变换不改变系统的物理规律（运动方程、对易关系、平均值及概率）：

$$\hat{A}\psi = \varphi \quad \rightarrow \quad \hat{A}'\psi' = \varphi'$$

证：
$$\begin{aligned} \hat{A}'\psi' &= \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{+}\hat{U}\psi \\ &= \hat{U}\hat{A}\psi \\ &= \hat{U}\varphi \\ &= \varphi' \end{aligned}$$

强调：这里的变换是波函数和算符同时变换，如果只变换其中一个，则量子系统的物理就完全有可能改变

幺正变换实例–傅里叶变换

傅里叶变换可以看作是一种幺正变换：

$$\hat{U}(p)\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\psi(x) = \varphi(p)$$

$$\hat{U}^{-1}(x)\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp e^{\frac{i}{\hbar}px}\varphi(p) = \psi(x)$$

$$\int \psi^*(x)\psi(x)dx = \int \varphi^*(p)\varphi(p)dp = 1$$ → U不改变归一

$$\hat{U}\hat{U}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp' e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$$

$$= \int dp' \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x}$$

$$= \int dp' \delta(p-p')$$

$$= 1_{(p'\to p)}$$ （$1_{(p'\to p)}$表示单位算符，但是要把自变量p’换为p）

幺正变换实例–傅里叶变换

傅里叶幺正变换对动量算符的变换：

$$\hat{U}\frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{U}^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{\hat{p}^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp' e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp' e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp'\frac{p'^2}{2m}e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$$

$$=\int dp'\frac{p'^2}{2m}\frac{1}{2\pi\hbar}\int dx e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}$$

$$=\int dp'\delta(p-p')\frac{p'^2}{2m}$$

$$=\frac{p^2}{2m}1_{(p'\to p)}$$

幺正变换实例–傅里叶变换

傅里叶幺正变换对坐标算符的变换：

$$\hat{U}\hat{x}\hat{U}^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}x\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp' e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}i\hbar\frac{d}{dp}\int dx e^{-\frac{i}{\hbar}px}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp' e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$$

$$=i\hbar\frac{d}{dp}\int dp'\delta(p-p')$$

$$=i\hbar\frac{d}{dp}1_{(p'\to p)}$$

推广：

$$\hat{U}\hat{x}^n\hat{U}^{-1}=\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)^n 1_{(p'\to p)}$$

幺正变换实例–傅里叶变换

傅里叶幺正变换对哈密顿算符的变换：

$$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}=\hat{U}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})\right]\hat{U}^{-1}$$

$$=\frac{p^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)$$

也就是说，在坐标表象中，哈密顿算符形式为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x) \qquad \begin{cases}\hat{p} \rightarrow -i\hbar\dfrac{d}{dx}\\ \hat{x} \rightarrow x\end{cases}$$

幺正变换到动量表象中后，其形式变为

$$\frac{p^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right) \qquad \begin{cases}\hat{p} \rightarrow p\\ \hat{x} \rightarrow i\hbar\dfrac{d}{dp}\end{cases}$$

单选题 1分

设置

在坐标表象中，我们推出了$[x,\hat{p}]=i\hbar$，那么在动量表象中，这个对易关系还成立吗?

A 成立。

B 不成立。

提交

态和力学量的表象：

在量子力学中，描写量子态和力学量算符的方式不是唯一的。一种具体的方式称为一种表象

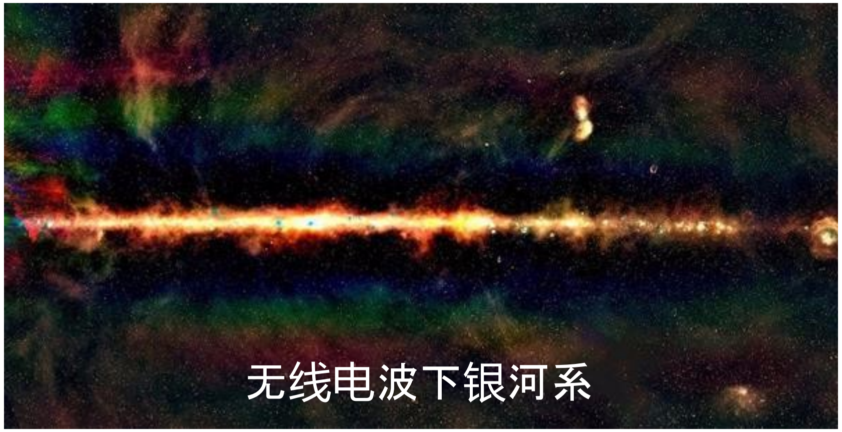
一维空间态的表象：

用$\psi(x,t)$来描写量子态是坐标表象。按动量本征函数展开：

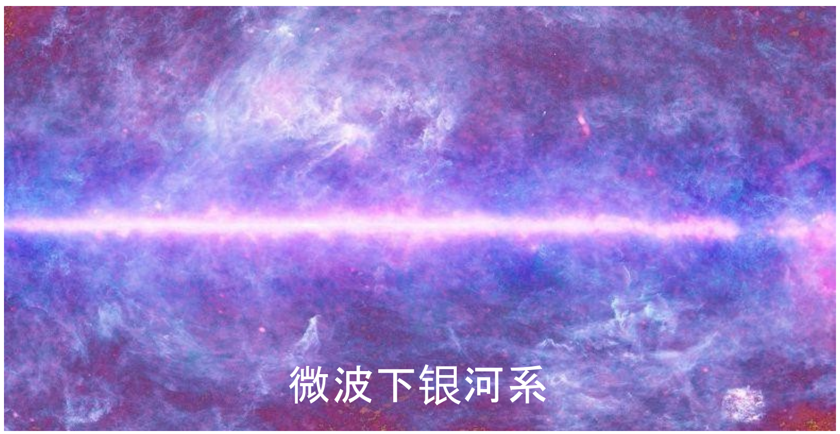
$$\psi(x,t)=\int c(p,t)\varphi_p(x)dp, \qquad \varphi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$$

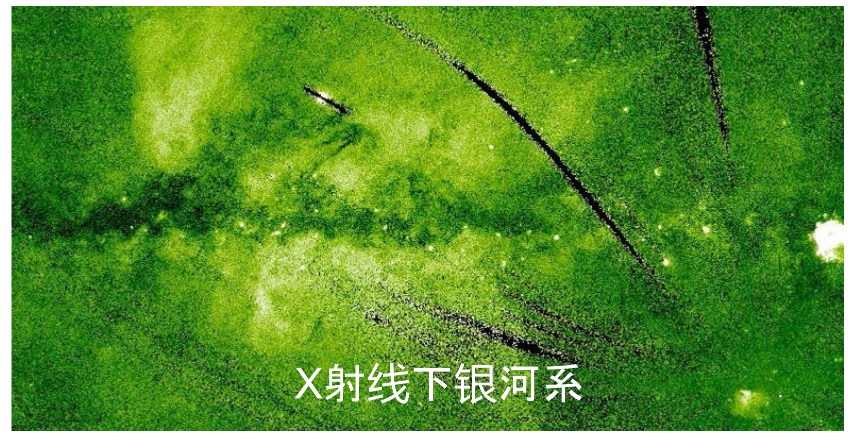
就变换到了动量表象，$c(p,t)$称为动量表象中的波函数

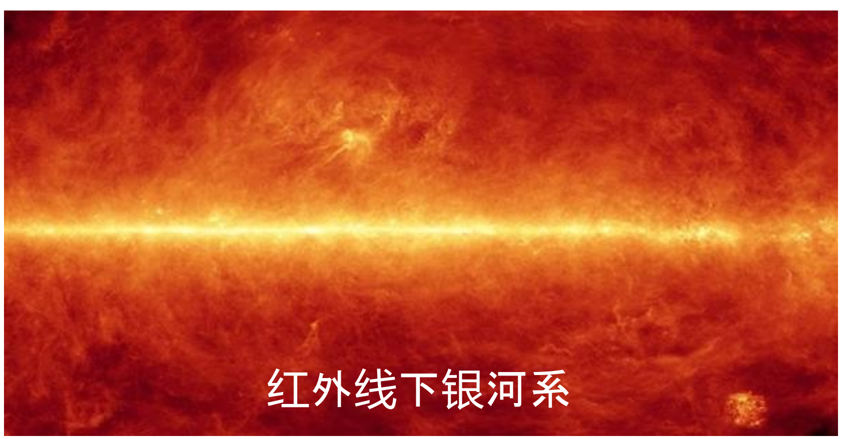
$$c(p,t)=\int \varphi_p^*(x)\psi(x,t)dx, \qquad \varphi_p^*(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)$$

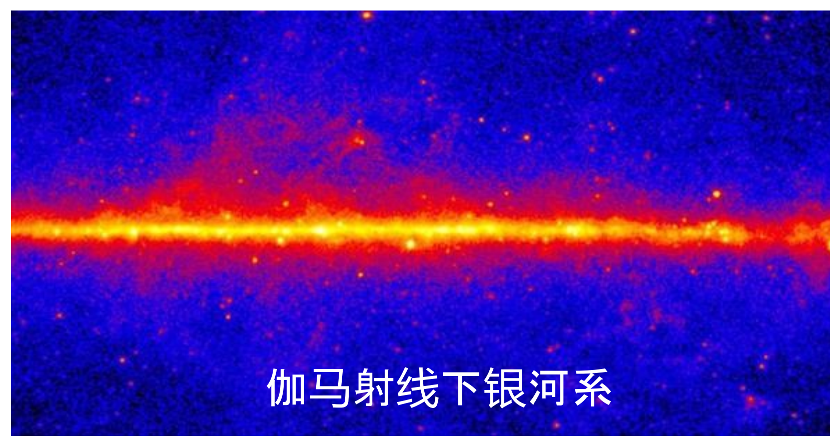

无线电波下银河系


可见光下银河系


微波下银河系


X射线下银河系


红外线下银河系


伽马射线下银河系

坐标表象的优点：
1）容易根据具体的物理问题的要求写出波函数满足的边界条件，分束缚态和散射态；根据粒子的入射方向写出入射波、透射波和反射波
2）一些常见的势在坐标表象下是定域的
3）容易讨论量子力学和经典力学的关系

有些问题，如谐振子问题，动量表象和坐标表象的薛定谔方程的形式相同，求解非常相似。
另一类问题，势只依赖于动量，不是坐标空间的定域势，则应在动量表象中求解。

坐标表象中的定态薛定谔方程：
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

动量表象中的定态薛定谔方程：
$$\left[\frac{p^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\varphi(p)=E\varphi(p)$$

表象之间的变换是一种幺正变换

简谐振子的傅里叶变换

一维简谐振子的哈密顿算符：

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

在坐标表象中，算符表达式为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

么正变换到动量表象中后，其形式为

$$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}-\frac{1}{2}m\hbar^2\omega^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}$$

问：如何求解一维谐振子在动量表象中的薛定鄂方程？

幺正变换与系统对称性

前面说道，对波函数和算符同时进行幺正变换，量子力学规律不变。但如果只变换波函数，则量子力学规律可能改变

追问：把假设条件加强，如果只对波函数或算符二者其一进行幺正变换，而量子力学规律不变，会有什么物理结果？

首先证明二者是等价的。薛定鄂方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{H}\psi$$

对 ψ 进行幺正变换：　　$\psi'=\hat{U}\psi$

设幺正变换之后的波函数仍满足相同的薛定鄂方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'=\hat{H}\psi'$$

幺正变换与系统对称性

即：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}\psi=\hat{H}\hat{U}\psi$$

用算符 $\hat{U}^{-1}$ 从左边作用于方程两边，因为我们一般考虑的幺正算符都是与时间无关的，所以 $\hat{U}^{-1}$ 可以穿过时间偏导算符作用于右方

$$\hat{U}^{-1}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^{-1}\hat{U}\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}\psi$$

与原薛定鄂方程作对比，同时注意到 Ψ 是任意的薛定鄂方程的解，所以有

$$\hat{H}=\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}=\hat{U}^{\dagger}\hat{H}\hat{U}=\hat{U}'\hat{H}\hat{U}'^{\dagger}\qquad(\hat{U}'=\hat{U}^{\dagger})$$

也就是说，只对波函数进行幺正变换而量子力学规律不变，可以等效为只对系统算符进行幺正变换而量子力学规律不变

幺正变换与系统对称性

哈密顿算符幺正变换不变的意义：

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

$$\hat{U}\hat{H} = \hat{H}\hat{U}$$

$$\left[\hat{U}, \hat{H}\right] = 0$$

$$\left[1 + i\varepsilon\hat{F}, \hat{H}\right] = 0$$

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

$$\frac{d}{dt}\overline{F} = \overline{\left[\hat{F}, \hat{H}\right]} = 0$$

也就是说，如果哈密顿算符幺正变换不变，那么此幺正变换对应的生成元是守恒量

Noether定理：**每当量子系统存在一种对称性（幺正不变性），就相应的存在一个守恒律和守恒量**

时间均匀性和能量守恒

设时间幺正算符把波函数时间参数向未来平移（主动）τ：

$$\hat{U}(\tau)\psi(t)=\psi(t-\tau)$$

对变化后的波函数做泰勒展开：

$$\psi(t-\tau)=\psi(t)+\frac{d}{dt}\psi(t)(-\tau)+\frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}\psi(t)(-\tau)^2+\cdots$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\tau)^n}{n!}\left(\frac{d}{dt}\right)^n\psi(t)$$

利用薛定鄂方程（$\hat{H}$不含时）：

$$\frac{d}{dt}\psi(t)=\frac{\hat{H}}{i\hbar}\psi(t)$$

$$\left(\frac{d}{dt}\right)^n\psi(t)=\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^n\psi(t)$$

时间均匀性和能量守恒

于是：

$$\psi(t-\tau)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i\tau}{\hbar}\hat{H}\right)^{n}\psi(t)$$

$$=e^{\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}}\psi(t)$$

时间平移算符： $\hat{U}(\tau)=e^{\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}}$

时间平移算符的生成元为 $\hat{H}$，它当然是与自身对易的，也就是说系统的能量是个守恒量

时间平移不变性 $\Longleftrightarrow$ 系统能量守恒