四、力学量随时间的演化与对称性

4.1 力学量随时间的演化

量子力学中，力学量的时间演化与经典力学差异显著：经典中每一时刻力学量有确定值，而量子中仅能通过**概率幅**描述状态，需研究**平均值**的时间演化。

4.1.1 守恒量

核心问题：哪些力学量的平均值不随时间变？

设力学量 A的平均值为$\langle A(t)\rangle = (\psi(t), A\psi(t))$ $\psi(t)$ 为体系状态）。对其求时间导数：

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t}, A\psi\right) + \left(\psi, A\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)$$

利用薛定谔方程 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$ (H 为哈密顿量），代入后化简：

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A\rangle &= \left(\frac{H\psi}{i\hbar}, A\psi\right) + \left(\psi, A\frac{H\psi}{i\hbar}\right)\\ &= \frac{1}{-i\hbar}(\psi, HA\psi) + \frac{1}{i\hbar}(\psi, AH\psi) + \left(\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi\right)\\ &= \frac{1}{i\hbar}(\psi, [A,H]\psi) + \left(\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi\right)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \end{aligned} \tag{2}$$

若 A 不显含时间($\frac{\partial A}{\partial t} = 0$)，则：

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle \tag{3}$$

当且仅当 $[A,H]=0$（A 与 H 对易）时，$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = 0$。此时称 A 为**守恒量**——其平均值和测量概率分布均不随时间改变。

> 守恒量是量子体系的“不变量”，本质是**对称性的数学表达**（诺特定理的量子版本）。例如：
> 自由粒子的动量 p守恒（因 $[p,H]=0$，$H=p^2/2m$）；
> 中心力场的角动量 l 守恒（因 $[l_i,H]=0$，$H=p^2/2m+V(r)$）。
> 但需注意：**守恒量 ≠ 定态**！定态是能量本征态（$H\psi=E\psi$），而守恒量是所有状态下平均值不变 的力学量（即使体系不在其本征态）。

4.1.2 能级简并与守恒量的关系

若体系有两个**彼此不对易**的守恒量 F, G （$[F,H]=0, [G,H]=0$ 但 $[F,G]\neq 0$），则能级一般是**简并**的。

推理过程：

1. 因 $[F,H]=0$，F 的本征态也是 H 的本征态，记为 ψ_E（对应能量 E）；
2. 因$[G,H]=0$， $G\psi_E$ 也是 H 的本征态（能量仍为E）；
3. 若 $[F,G]\neq 0$ ，则$G\psi_E$ 不是 F 的本征态（否则 $F(G\psi_E)=GF\psi_E=Gf\psi_E=fG\psi_E$ ，与 $[F,G]\neq 0$ 矛盾）。
   因此，同一能量 E 下存在多个线性无关的本征态（如$\psi_E, G\psi_E$），能级简并。

例：一维谐振子

势能$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ，空间反射$P: x\to -x$ 是守恒量（$[P,H]=0$）。
能量本征态$\psi_n(x)$ 满足$P\psi_n(x)=(-1)^n\psi_n(-x)$ ，即宇称为$(-1)^n$ 。
由于P是守恒量，不同宇称的状态无法相互跃迁，导致能级$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$ 无简并（每个n对应唯一宇称）。

> 能级简并源于**对称性的“破缺”或“兼容”**：
> 若两个守恒量对易（如氢原子中l^2与l_z ），能级简并可被完全标记；
> 若不对易（如中心力场中l_x, l_y, l_z 彼此不对易），简并能级需额外量子数区分。
> 简并本质是“对称操作下的不变性”——体系在对称变换下保持能量不变，从而产生多重解。

位力（virial）定理

当体系处于**定态**（ $\frac{d}{dt}\langle O\rangle=0$ 对任意力学量 O 成立），有一个重要关系：

设粒子在势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中，哈密顿量 $H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})$ 。考虑 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 的平均值时间导数：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\rangle=\langle[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},H]\rangle$$

展开对易式（利用 $[\boldsymbol{r}_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}$ ）：

$$[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},H]=\frac{1}{2m}[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}^2]+[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})]$$

计算得：

$$\frac{1}{2m}[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}^2]=i\hbar\frac{\boldsymbol{p}^2}{m},\quad [\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})]=-i\hbar\boldsymbol{r}\cdot\nabla V$$

因此：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\rangle=i\hbar\left(\frac{\langle\boldsymbol{p}^2\rangle}{m}-\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle\right)$$

对定态，左边为0，故：

$$\frac{\langle\boldsymbol{p}^2\rangle}{m}=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$$

记动能 $T=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ ，则：

$$2\langle T\rangle = \langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle \tag{11}$$

应用示例：幂次势场 $V(\boldsymbol{r}) = kr^n$

此时 $\nabla V = nkr^{n-2}\boldsymbol{r}$ ，故 $\boldsymbol{r}\cdot\nabla V = nkr^n = nkV$ 。
代入位力定理:

$$2\langle T\rangle = nk\langle V\rangle$$

- 若 $n=2$ （谐振子），则 $2\langle T\rangle = 2\langle V\rangle$，即$\langle T\rangle = \langle V\rangle$ （动能与势能平均值相等）；
- 若 n=-1 （库仑势），则 $2\langle T\rangle = -\langle V\rangle$ ，即 $\langle V\rangle = -2\langle T\rangle$ （束缚态下势能是动能的-2倍）。

> 位力定理是**量纲分析与对称性的结合**
> 揭示了动能与势能在定态下的定量关系。它无需具体求解波函数，仅通过势场形式即可推断能量分 配，是量子力学中高效的“宏观-微观”桥梁工具。

4.2 波包的运动，Ehrenfest定理

量子力学中，**波包**（wave packet）是描述粒子运动的非定态态函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ ，其空间概率密度 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 随时间演化，区别于定态（定态概率密度不随时间变）。本节探讨波包的运动规律，及其与经典粒子运动的联系。

1. 平均值的演化方程

设粒子质量为 ，在势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动，哈密顿量为:

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

根据4.1节式(3)（力学量平均值的时间导数公式），粒子坐标 $\boldsymbol{r}$ 和动量 $\boldsymbol{p}$ 的平均值随时间变化为:

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{r}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\boldsymbol{r},H]\rangle = \frac{\langle \boldsymbol{p}\rangle}{m} \tag{2}$$

- 推导

  首先计算对易式$[r,H]$
  已知$H=\frac{p^2}{2m}+V(r)$
  所以

  $$[r,H] = [r,\frac{p^2}{2m}] + [r,V(r)] = [r,\frac{p^2}{2m}]$$

  推广到矢量形式

  $$[r,p^2] = [x,p_x^2] + [y,p_y^2] + [z,p_z^2]$$

运用到对易子恒等式,由于$[x, p_x] = i\hbar$

$$[A, B^2] = B[A, B] + [A, B]B$$

所以:

$$[r, p^2] = p[x, p] + [x, p]p = p \cdot i\hbar + i\hbar \cdot p = 2i\hbar p$$

然后:

$$[r, H] = \frac{1}{2m}[r, p^2] = \frac{2i\hbar p}{2m} = \frac{i\hbar}{m}p$$

然后:

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{r} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\boldsymbol{r}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\frac{i\hbar}{m}\langle p \rangle = \frac{\langle \boldsymbol{p} \rangle}{m}$$

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{p} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\boldsymbol{p}, H] \rangle = -\langle \nabla V \rangle = \langle \boldsymbol{F} \rangle \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{F} = -\nabla V$ 为经典力。这两个方程与经典粒子的**正则方程**:

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}, \quad \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -\nabla V$$

形式一致，说明量子平均值的演化与经典运动有类比性。

2. Ehrenfest定理：量子-经典的桥梁

将式(2)代入式(3)，消去 $\langle \boldsymbol{p} \rangle$ ，得到:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle \boldsymbol{r} \rangle = \langle \boldsymbol{F} \rangle \tag{5}$$

这被称为**Ehrenfest定理**，其形式与牛顿第二定律 $m\ddot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{F}$ 相似。但需注意：只有当 $\langle \boldsymbol{F} \rangle \approx \boldsymbol{F}(\langle \boldsymbol{r} \rangle)$ 时，波包中心的运动才会严格遵循经典轨迹。

解释

力F通常是位置r的非线性函数，在数学中，一个函数的期望值通常不等于该函数在期望值点的取值，即

$$\langle f(x) \rangle \neq f(\langle x \rangle)$$

只有当f为线性函数，或者x的分布特别集中时候，此近似才成立
详细推导
先考虑一维情况下

1. 势能的泰勒展开
   将$V(x)$在$x_0 = \langle x \rangle$ 处展开

$$V(x)=V(\langle x\rangle)+(x-\langle x\rangle)V'(\langle x\rangle)+\frac{1}{2}(x-\langle x\rangle)^2V''(\langle x\rangle)+\frac{1}{6}(x-\langle x\rangle)^3V'''(\langle x\rangle)+\cdots$$

2. 将力展开，力是势能的负梯度$F=-\nabla V=-V'(x)$

$$F(x)=-V'(x)=-V'(\langle x\rangle)-(x-\langle x\rangle)V''(\langle x\rangle)-\frac{1}{2}(x-\langle x\rangle)^2V'''(\langle x\rangle)-\cdots$$

3. 计算力的期望$\langle F\rangle$
   由:

$$\langle F\rangle=\int\psi^*(x,t)F(x)\psi(x,t)dx$$

$$\langle F\rangle=\langle -V'(\langle x\rangle)\rangle-\langle (x-\langle x\rangle)V''(\langle x\rangle)\rangle-\langle\frac{1}{2}(x-\langle x\rangle)^2V'''(\langle x\rangle)\rangle-\cdots$$

- 第一项：经典力项
- 第二项：根据$\langle(x-\langle x\rangle)\rangle$=$\langle x\rangle-\langle x\rangle=0$，所以第二项为0
- 第三项：$\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle$是位置算符的方差，记作$(\Delta x)^2$,描述了波包在空间中的展宽程度
  所以这一项是$-\frac{1}{2}V'''(\langle x\rangle)(\Delta x)^2$，这是个量子修正项

> Ehrenfest定理是量子力学“对应原理”的具体体现——当量子效应可忽略时，量子平均行为趋近于经典运动。但它并非万能：若势场变化剧烈（如原子尺度），或波包过宽，$\langle\boldsymbol{F}\rangle$ 与 $\boldsymbol{F}(\langle\boldsymbol{r}\rangle)$ 的偏差会显著，此时经典近似失效。

3. 经典近似的条件

要使 $\langle\boldsymbol{F}\rangle\approx\boldsymbol{F}(\langle\boldsymbol{r}\rangle)$ ，需满足两个关键条件：

条件1：波包足够窄

波包的空间宽度 Δx 必须远小于势场变化的特征长度 L_V （即 $\Delta x\ll L_V$ ）。这样，波包内的势场 $V(\boldsymbol{r})$ 可近似为常数，平均值 $\langle V\rangle\approx V(\langle\boldsymbol{r}\rangle)$，从而$\langle\nabla V\rangle\approx\nabla V(\langle\boldsymbol{r}\rangle)$ 。

条件2：势场变化缓慢

势场 $V(\boldsymbol{r})$ 在波包范围内的变化必须很小。以一维为例，若在波包中心 $x=\bar{x}$ 附近作泰勒展开：

$$V(x)=V(\bar{x})+(x-\bar{x})V'(\bar{x})+\frac{1}{2}(x-\bar{x})^2V''(\bar{x})+\cdots$$

则平均值 $\langle V\rangle=V(\bar{x})+\frac{1}{2}\overline{(x-\bar{x})^2}V''(\bar{x})+\cdots$ 。只有当二阶项 $\frac{1}{2}\overline{(x-\bar{x})^2}|V''(\bar{x})|\ll|V'(\bar{x})|$ 时，才能忽略高阶项，保证 $\langle\nabla V\rangle\approx\nabla V(\bar{x})$ 。

> 这两个条件的物理意义是“局域化”——波包必须小到足以“感受”到一个均匀的势场，就像经典粒子是一个几何点。但对于微观粒子（如电子），其德布罗意波长 $\lambda=h/p$ 很短，波包难以做到足够窄，因此经典近似往往不成立。

4. 应用实例：α粒子 vs 电子的散射

α粒子散射（天然放射性元素）

- 原子半径 $a \sim 10^{-8}\mathrm{cm}$ ，α粒子能量 $E \sim 3-7\mathrm{MeV}$ ，动量 $p_\alpha \sim \sqrt{2mE} \sim 10^{-14}\mathrm{g{\cdot}cm/s}$ ；
- 散射过程中，波包扩散的距离 $\Delta x \sim \Delta v \cdot \Delta t$ ，其中 $\Delta v \sim \Delta p/m$ 。由于 $\Delta p/p_\alpha \ll 1$ （可通过不确定性关系验证），波包扩散可忽略，经典轨道近似有效。

电子散射（如100eV电子）

- 电子质量m_e远小于α粒子，相同能量下动量 $p_e \sim \sqrt{2mE} \sim 54 \times 10^{-19}\mathrm{g{\cdot}cm/s}$ ，德布罗意波长 $\lambda = h/p_e \sim 10^{-9}\mathrm{cm}$ ，与原子半径相当；
- 此时 $\Delta p/p_e \sim 1$ ，波包扩散严重，经典轨道概念不再适用，必须用量子力学处理。

> 这个例子生动展示了“尺度”的重要性——宏观世界（如α粒子）的经典近似成立，而微观世界（如电子）必须依赖量子理论。这也解释了为什么我们日常经验中看不到量子效应：我们的感官只能感知到“大”尺度的物体，其量子波动被平均掉了。

4.3 Schrödinger图像与Heisenberg图像

量子力学中，有两种描述体系演化的等效框架：**Schrödinger图像**（态随时间变，算符不变）和**Heisenberg图像**（态不变，算符随时间变）。前者更贴近“态的演化”直觉，后者更侧重“算符的动力学”，二者通过时间演化算符关联。

1. Schrödinger图像：态的演化

在Schrödinger图像中，**态矢量**$\psi(t)$随时间演化，满足**Schrödinger方程**：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H\psi(t) \tag{2}$$

其中 H 为哈密顿量（不显含时间时为守恒量）。

- **算符**：不随时间变（除非显含时间 t ），力学量A的平均值为：

$$\langle A(t)\rangle = (\psi(t), A\psi(t))$$

2. 时间演化算符：连接两种图像的桥梁

定义**时间演化算符**$U(t,0)$ ，将初始态$\psi(0)$映射到t时刻态$\psi(t)$ ：

$$\psi(t) = U(t,0)\psi(0) \tag{4}$$

- 初始条件： $U(0,0) = I$ （单位算符，幺正性）；
- 幺正性： $U^\dagger(t,0)U(t,0) = U(t,0)U^\dagger(t,0) = I$ （保证概率守恒）；
- 连续性： $U(t+\Delta t,0) = U(t,0)U(\Delta t,0)$ （时间平移不变性）。

将 $\psi(t) = U(t,0)\psi(0)$ 代入Schrödinger方程，可得 $U(t,0)$ 的演化方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,0) = HU(t,0)$$

若 H 不显含时间，解为：

$$U(t,0) = e^{-iHt/\hbar} \tag{7}$$

3. Heisenberg图像：算符的演化

在Heisenberg图像中，**态矢量固定为初始态** $\psi(0)$ ，而**算符** $A(t)$ 随时间演化，定义为：

$$A(t) = U^\dagger(t,0)AU(t,0) \tag{11}$$

- **Heisenberg方程**：算符的时间演化由对易关系决定。对 $A(t)$ 求时间导数：

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A,H] + \frac{\partial A}{\partial t} \tag{12}$$

  若 A 不显含时间（ $\partial A/\partial t = 0$ ），则简化为：

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A,H]$$

- **物理意义**：算符的时间演化类似经典力学中的“运动方程”（如 $dp/dt = -\partial H/\partial q$ ），体现了量子力学中“对易关系”替代“泊松括号”的核心思想。

> Heisenberg图像的优势在于“观测者视角”**——我们关注的是“物理量如何随时间变化”，而非“态如何变化”。例如，讨论守恒量时，若 $[A,H]=0$ ，则 $dA/dt = 0$ ，算符（即物理量）不随时间变，这与Schrödinger图像中“平均值不变”的结果一致，但Heisenberg图像更直接地反映了算符的动力学。

4. 典型例子：自由粒子与一维谐振子

例1：自由粒子（$H = p^2/2m$ ）

- 对易关系： $[r,p] = i\hbar I$ （位置与动量的基本对易式）；
- Heisenberg方程：

$$\frac{dr}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[r,H] = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p,H] = 0$$

- 积分得：

$$r(t) = r(0) + \frac{p}{m}t, \quad p(t) = p(0) \tag{13}$$

  结果显示：自由粒子的位置随时间线性增长，动量保持不变，与经典力学一致。

> 自由粒子的例子完美体现了Heisenberg图像的**简洁性**——只需解算符的对易关系，就能得到物理量的时间演化，无需求解波函数。这种“算符代数”方法在量子场论中至关重要，因

> 为它避免了复杂的波函数计算，专注于物理量的动力学。

例2：一维谐振子（$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$）

- Heisenberg方程：

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x$$

- 联立得：

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x \tag{15}$$

这是经典谐振子的Newton方程，解为：

$$x(t) = x_0 \cos\omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin\omega t, \quad p(t) = p_0 \cos\omega t - m\omega x_0 \sin\omega t \tag{18}$$

> 谐振子的例子展示了Heisenberg图像与经典力学的**深刻联系**——尽管量子谐振子的能级是离散的，但其算符的时间演化却与经典谐振子完全一致。这说明“经典极限”并非偶然：当量子效应可忽略时（如大质量、低频率），量子力学自然会退化为经典力学。

总结

- **Schrödinger图像**：态 $\psi(t)$ 演化，算符不变，适合讨论“态的演化”（如波包扩散）；
- **Heisenberg图像**：算符 $A(t)$ 演化，态不变，适合讨论“物理量的动力学”（如守恒量、对称性）。

4.4 守恒量与对称性的关系

量子力学中，**守恒量**与**对称性**的关系是诺特定理的量子版本：体系的对称性（不变性）必然对应一个守恒量。这一联系比经典力学更丰富，因为量子力学涉及更多对称性（如自旋、宇称等）。

1. 对称性变换的定义

设体系的状态用波函数 ψ 描述，其时间演化服从Schrödinger方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \tag{1}$$

考虑**线性变换** Q （逆变换为 Q^{-1} ，不依赖于时间），在此变换下波函数变为 $\psi' = Q\psi$ 。若体系对该变换具有**不变性**，则要求 ψ' 也服从相同形式的运动方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = H\psi' \tag{3}$$

将 $\psi' = Q\psi$ 代入上式，对比原Schrödinger方程，可得：

$$Q^{-1}HQ = H \quad \text{或} \quad [Q, H] = 0 \tag{4}$$

满足上述条件的变换 Q 称为**体系的对称性变换**，所有对称性变换构成的集合称为**对称群**（symmetry group）。

> 对称性变换的本质是“体系的不变性”——无论怎么变换，体系的物理性质（由哈密顿量 H 描述）都不变。这种“不变性”是守恒量的根源：如果体系对某变换不变，那么该变换对应的物理量就不会随时间变化。

2. 连续变换与无穷小生成元

对于**连续变换**（如平移、旋转），可将其分解为无穷小变换。设无穷小变换为：

$$Q = I + i\varepsilon F \tag{6}$$

其中 ε 是无穷小参数， F 是**无穷小生成元**（infinitesimal operator）。

由于 Q 是幺正变换（保证概率守恒），要求 $Q^\dagger Q = I$ 。代入 $Q = I + i\varepsilon F$ ，保留到 ε 的一阶项，可得：

$$F^\dagger = F \tag{7}$$

即 F 是**厄米算符**（可观测量）。

再由对称性条件 $[Q, H] = 0$ ，代入 $Q = I + i\varepsilon F$ ，忽略高阶小项，得：

$$[F, H] = 0 \tag{8}$$

这意味着：**无穷小生成元 F 是体系的守恒量。**

3. 典型例子：平移不变性与动量守恒

考虑体系沿x方向的无穷小平移δx，波函数变换为：

$$\psi \to \psi' = D(\delta x)\psi \tag{9}$$

若体系具有**平移不变性**（即势场 $V(x)$ 不随位置变化，如自由粒子），则 D(\delta x) 是对称性变换，满足 $[D, H] = 0$ 。

无穷小平移算符 $D(\delta x)$ 可表示为：

$$D(\delta x) = \exp\left[-i\delta x \hat{p}_x/\hbar\right] \tag{11}$$

其中 $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 是动量算符的 x 分量。

由对称性条件 $[D, H] = 0$ ，应用无穷小变换公式，得：

$$[\hat{p}_x, H] = 0 \tag{15}$$

因此，**动量算符 $\hat{p}_x$ 是守恒量**——若体系具有平移不变性，动量不会随时间变化。

> 平移不变性与动量守恒的联系是"直观的"：如果一个体系在空间中"到处都一样"（平移不变），那么它没有 preferred position，动量自然守恒。这在经典力学中同样成立（如自由粒子不受外力，动量守恒），但量子力学中通过算符对易关系严格证明了这一点，体现了量子理论的严谨性。

4. 典型例子：旋转不变性与角动量守恒

考虑体系绕 z 轴的无穷小旋转 $\delta\phi$ ，波函数变换为：

$$\psi \to \psi' = R(\delta\phi)\psi \tag{16}$$

若体系具有**旋转不变性**（如中心力场 $V(r)$ 仅与径向距离有关），则 $R(\delta\phi)$ 是对称性变换，满足 $[R, H] = 0$ 。

无穷小旋转算符 $R(\delta\phi)$ 可表示为：

$$R(\delta\phi) = \exp\left[-i\delta\phi\hat{l}_z/\hbar\right] \tag{17}$$

其中 $\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$ 是角动量算符的 z 分量。

由对称性条件 $[R, H] = 0$ ，应用无穷小变换公式，得：

$$[\hat{l}_z, H] = 0 \tag{24}$$

因此，**角动量算符 $\hat{l}_z$ 是守恒量**——若体系具有旋转不变性，角动量不会随时间变化。

> 旋转不变性与角动量守恒的联系是"深刻的"：旋转不变性意味着体系没有 preferred direction（方向上的不对称性），因此角动量（转动惯量与角速度的乘积）守恒。这在量子力学中表现为角动量算符与哈密顿量的对易，而在经典力学中则是角动量矢量的时间导数为零（ $d\mathbf{l}/dt = 0$ ）。这种一致性再次验证了量子理论与经典理论的内在统一。

总结

- **对称性**：体系对某变换的不变性（ $[Q, H] = 0$ ）；
- **守恒量**：与对称性变换对应的厄米算符（无穷小生成元 F ）；
- **核心结论**：体系的每一个对称性都对应一个守恒量，反之亦然（诺特定理的量子版本）。

4.5 全同粒子体系与波函数的交换对称性

全同粒子（identical particles）是指质量、电荷、自旋等内禀属性完全相同的粒子（如电子、质子、光子等）。在量子力学中，全同性导致波函数必须满足**交换对称性**（symmetric 或 antisymmetric），这是经典力学中没有的新现象。

4.5.1 全同粒子体系的交换对称性

1. 全同粒子的不可区分性

经典力学中，即使两个粒子完全相同，也可通过追踪其路径来区分它们。但在量子力学中，**全同粒子的状态无法区分**——因为它们的波函数重叠，无法确定哪个粒子在哪里。

例如，氦原子中的两个电子，内禀属性完全相同，交换它们的位置时，体系的Hamilton量 H 不变（$P_{12}HP_{12}^{-1}=H$，其中 P_{12} 是交换算符）。因此，交换对称性是全同粒子体系的基本性质。

2. 波函数的交换对称性要求

设体系由 N 个全同粒子组成，波函数为 $\psi(q_1,q_2,...,q_N)$，其中 q_i 表示第 i 个粒子的全部坐标（位置+自旋）。

交换算符 P_{ij} 定义为交换第 i 和 j 个粒子的坐标：

$$P_{ij}\psi(q_1,...,q_i,...,q_j,...,q_N)=\psi(q_1,...,q_j,...,q_i,...,q_N)$$

由于 $[P_{ij},H]=0$（交换粒子不改变Hamilton量），P_{ij} 是守恒量，其本征值为 \pm 1 。因此，全同粒子体系的波函数必须满足：

$$P_{ij}\psi=\pm\psi \tag{4a/b}$$

- **对称波函数**（symmetric）：$P_{ij}\psi=+\psi$，适用于Bose子（如光子、介子）；
- **反对称波函数**（antisymmetric）：$P_{ij}\psi=-\psi$，适用于Fermi子（如电子、质子）。

> *全同粒子的交换对称性是量子力学“不可区分性”的直接结果。经典中我们可以给粒子贴标签（如“粒子1”“粒子2”），但量子中标签毫无意义——因为波函数的重叠让标签失去了物理意义。这种对称性要求彻底改变了多体体系的描述方式，是理解 Bose-Einstein 凝聚、金属导电性等现象的关键。

4.5.2 两个全同粒子组成的体系

1. 体系 Hamilton 量

设两个全同粒子，Hamilton量为：

$$H=h(q_1)+h(q_2)$$

其中 $h(q_i)$ 是单个粒子的Hamilton量（形式相同，仅变量不同）。

2. 单粒子态与交换算符

设粒子1处于单粒子态 $\varphi_a(q)$，粒子2处于 $\varphi_b(q)$，则未归一化的波函数为：

$$\psi(q_1,q_2)=\varphi_a(q_1)\varphi_b(q_2)$$

交换算符 P_{12} 作用于波函数：

$$P_{12}\psi(q_1,q_2)=\varphi_a(q_2)\varphi_b(q_1)$$

3. Bose 子与 Fermi 子的波函数

- **Bose 子**（对称波函数）：

$$\psi_{\text{sym}}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(q_1)\varphi_b(q_2) + \varphi_a(q_2)\varphi_b(q_1)] \tag{8}$$

- **Fermi 子**（反对称波函数）：

$$\psi_{\text{anti}}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(q_1)\varphi_b(q_2) - \varphi_a(q_2)\varphi_b(q_1)] \tag{9}$$

> Bose子和Fermi子的波函数差异看似微小（仅符号之差），但蕴含着深刻的物理后果。Bose子的对称波函数允许两个粒子占据同一个单粒子态（如激光中的光子），而Fermi子的反对称波函数禁止这种情况（Pauli不相容原理）——这就是为什么电子会分层填充原子轨道，而光子可以“抱团”形成相干光。

4.5.3 Pauli 不相容原理

对于Fermi子，若两个粒子处于**同一个单粒子态**（ $\varphi_a = \varphi_b$ ），则反对称波函数为零：

$$\psi_{\text{anti}}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(q_1)\varphi_a(q_2) - \varphi_a(q_2)\varphi_a(q_1)] = 0$$

这意味着：**两个Fermi子不能占据同一个量子态**，这就是著名的**Pauli不相容原理**。它是原子结构、固体物理等领域的基础——例如，原子的电子壳层结构就是由Pauli原理决定的。

4.5.4 N个全同Fermi子组成的体系

对于 N 个全同Fermi子，反对称波函数需满足：**任意两个粒子交换都反对称**。其一般形式为Slater行列式：

$$\psi_{\text{anti}}(q_1, \ldots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(q_1) & \varphi_1(q_2) & \cdots & \varphi_1(q_N) \\ \varphi_2(q_1) & \varphi_2(q_2) & \cdots & \varphi_2(q_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(q_1) & \varphi_N(q_2) & \cdots & \varphi_N(q_N) \end{vmatrix} \tag{22}$$

其中 $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_N$ 是 N 个不同的单粒子态。Slater行列式的特点是：**若有任何两个单粒子态相同，行列式为零**（符合Pauli原理）；**交换任意两个粒子，行列式变号**（符合反对称性）。

> Slater行列式是描述Fermi子多体体系的最简洁方式。它将“反对称性”的要求转化为行列式的数学性质，既保证了波函数的正确对称性，又避免了繁琐的交换运算。这种“数学化”的处理方式，正是量子力学强大之处——用简洁的数学工具揭示深层的物理规律。

4.5.5 N个全同Bose子组成的体系

Bose子不受Pauli原理限制，可以有任意数量的粒子处于同一个单粒子态。其对称波函数的一般形式为：

$$\psi_{\text{sym}}(q_1, \ldots, q_N) = \sum_P P\left[\varphi_{k_1}(q_1)\varphi_{k_2}(q_2)\cdots\varphi_{k_N}(q_N)\right]$$

其中 P 表示对所有粒子的置换求和， $k_1, k_2, \ldots, k_N$ 是单粒子态的指标（可重复）。

> **总结**：全同粒子的交换对称性是量子力学的核心概念之一。它不仅决定了粒子的统计性质（Bose子 vs Fermi子），还导致了诸如Bose-Einstein凝聚、金属导电性、原子壳层结构等一系列重要现象。理解这一对称性，是掌握量子多体物理的关键一步。