§量子力学中的对称性

1、对称性与守恒和简并密切相关

· 经典力学中的对称性

拉氏量 $L(q_i, \dot{q}_i)$，如果 L 在变换 $q_i \to q_i + \delta q_i$ 下不变，也就是 $\frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$，那么根据 $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$，可知 $\frac{dP_i}{dt} = 0$，（$\because P_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$）这就是动量守恒

也可以从哈密顿力学导出同样的结论：$\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow \frac{dP_i}{dt} = 0$.

前提是系统平移不变 $V(q) =$ 常数.

· 量子力学中的对称性

我们知道平移或转动对应一个幺正算符，记为 $\mathcal{S}$. 习惯上把 $\mathcal{S}$ 称为对称操作，不论物理系统是否真的有 $\mathcal{S}$ 下的不变性.

对于无穷小变换：$\mathcal{S} = 1 - \frac{iG}{\hbar}\cdot\varepsilon$，$G^\dagger = G$ 是厄密的，生成元.

设系统在 $\mathcal{S}$ 下不变，意思是 $\langle\alpha|\mathcal{S}^\dagger H \mathcal{S}|\alpha\rangle = \langle\alpha|H|\alpha\rangle$

$|\alpha\rangle$ 任意，$\therefore$ 就是 $\mathcal{S}^\dagger H \mathcal{S} = H$. 当 $\mathcal{S} = 1 - \frac{iG\cdot\varepsilon}{\hbar}$，$\Rightarrow$

这意味着 $[H, G] = 0$. 根据 Heisenberg 方程 $\frac{dG}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[G, H] = 0$

所以 G 是守恒量，或称运动常数. 例 $\mathcal{S}$ 是平移，G 就是 P.

· 我们也可以从本征态方面看. 设 $t = 0$ 时系统处于 G 的本征态 $|g\rangle$：$G|g\rangle = g|g\rangle$. 那 $t > 0$ 时，$|t\rangle = U(t,0)|g\rangle$

其中 $U(t,0) = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}$，$\therefore [U, G] = 0 \Rightarrow G|t\rangle = UG|g\rangle = gU|g\rangle = g|t\rangle$

$\therefore$ 系统仍处于 G 的本征态 $|g\rangle$.

• 再来讨论简并性.

设 $[\mathscr{Y}, H]=0$. (记是 $\mathscr{Y}^{+}H\mathscr{Y}=H$)

考虑 H 的本征态 $|n\rangle$: $H|n\rangle=E_n|n\rangle$

由于 $H\mathscr{Y}|n\rangle=\mathscr{Y}H|n\rangle=E_n\mathscr{Y}|n\rangle$, 所以在 $\mathscr{Y}|n\rangle$ 与 $|n\rangle$

不相同时, ($\mathscr{Y}|n\rangle\neq e^{i\delta}|n\rangle$) 能级简并.

考虑 $\mathscr{Y}=\mathcal{D}(R)$. 假设一个系统是旋转不变的.

记是说 $\mathcal{D}^{+}(R)H\mathcal{D}(R)=H$, 或 $[\mathcal{D}(R), H]=0$. ($\langle H\rangle$ 转动不变)

这点可由 $[\vec{J}, H]=0$ 保证. 同时, $[J^2, H]=0$.

我们知道可以找到 J^2, J_z 与 H 的共同本征态 $|n, j, m\rangle$.

并且由上面讨论, $\mathcal{D}(R)|n, j, m\rangle$ 与 $|n, j, m\rangle$ 属同一能级.

$\because [\vec{J}\cdot\vec{n}, J^2]=0$

我们将 $\mathcal{D}(R)|njm\rangle$ 展开成 $|njm'\rangle$ 的叠加.

$$\mathcal{D}(R)|njm\rangle=\sum_{m'}|njm'\rangle\langle njm'|\mathcal{D}(R)|njm\rangle$$

• 这里利用了完备性关系. ← 由 $\mathcal{D}(R)|njm\rangle$ 不改变 j 保证.

上式可写成 $\mathcal{D}(R)|njm\rangle=\sum_{m'}D^{(j)}_{m'm}(R)\ |njm'\rangle$

对于任意的转动 R, $\mathcal{D}(R)|njm\rangle$ 都是同个能量. 这意味着

每一个 $|njm'\rangle$ 都是同一能量. 因此能级简并度为 $2j+1$.

比如: $\mathcal{D}(R')|njm\rangle=|nj0\rangle$

• 这个系统的一个实例就是碱金属原子.

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(r)+V_{LS}(r)\vec{L}\cdot\vec{S}.\quad \text{由于 } \vec{L}\cdot\vec{S}=J^2-L^2-S^2$$

$\Rightarrow [\vec{J}, H]=0$. $\Rightarrow [\mathcal{D}(R), H]=0$. 旋转不变!

能级必须 $2j+1$ 简并.

相反. 如果加上了方向 电场或磁场: $\vec{\mu}\cdot\vec{B}$, 旋转对称性破坏

能级不再 $2j+1$ 简并. 这就是 Zeeman 效应

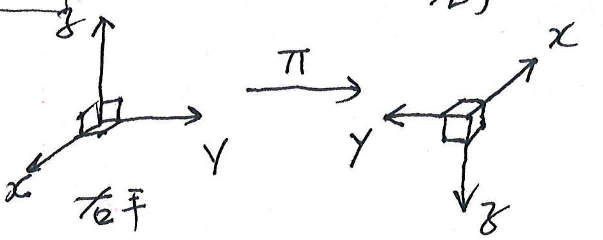
第21讲

§ 离散对称性. 宇称.

前面我们只讨论了连续对称算符(操作): 无穷小操作"生成".
本节讨论"离散"的对称操作: 宇称 (parity)

$\boxed{\text{宇称又称空间反射}: \ \vec{x} \longrightarrow -\vec{x}}$ 效果: 改变系统的"手性"

它把一个右手坐标系变成左手.



现在我们从量子力学角度看.

考虑一个给定的 $|\alpha\rangle$, 经过个空间反射操作, 得到一个
新的态 $\pi|\alpha\rangle$. 在 $\pi|\alpha\rangle$ 下 $\vec{x}$ 的期望值应该反向.

$$\boxed{\langle\alpha|\pi^{+}\cdot\vec{x}\cdot\pi|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\vec{x}|\alpha\rangle}$$

由于 $|\alpha\rangle$ 任意, 所以记要求 $\boxed{\pi^{+}\vec{x}\,\pi = -\vec{x}}$ 或 $\vec{x}\pi = -\pi\vec{x}$

(我们)利用了 $\pi^{+}\pi = \pi\pi^{+} = 1$, 即 π 是幺正的). (手征 chirality)

$\langle\alpha|\pi^{+}\pi|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle$

以上可认为是对 π 的定义.

由于 $\vec{x}\pi|\vec{x}'\rangle = -\pi\vec{x}|\vec{x}'\rangle = -\pi(\vec{x}')|\vec{x}'\rangle = (-\vec{x}')\pi|\vec{x}'\rangle$

$\therefore$ $\pi|\vec{x}'\rangle$ 是 $\vec{x}$ 的本征值为 $-\vec{x}'$ 的本征态.

因此 $\pi|\vec{x}'\rangle = e^{i\delta}|-\vec{x}'\rangle$, δ 是任意实数, 一般选 $\delta=0$

即 π 操作将 $|\vec{x}'\rangle$ 变成 $|-\vec{x}'\rangle$.

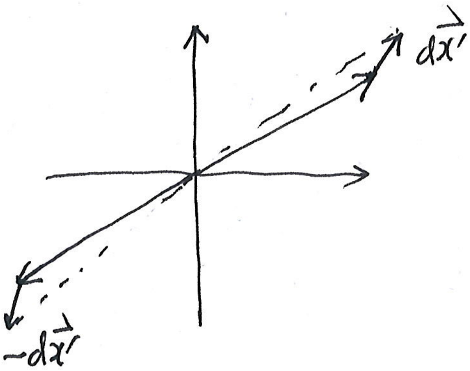
故意选择 $\longrightarrow$ 选 $\delta=0$, 可以保证: $\pi^{2}|\vec{x}'\rangle = \pi|-\vec{x}'\rangle = |\vec{x}'\rangle$

$\therefore$ $\boxed{\pi^{2}=1 \Rightarrow \pi^{+}=\pi=\pi^{-1}}$ π 是厄密的, $\longrightarrow$ 本身是力学量!

其本征值为 ± 1 $\longrightarrow$ 测量值.

• 那动量 $\vec{P}$ 在 $\pi|\alpha\rangle$ 态的期望值会怎样变换？

我们利用 $\vec{P}$ 是平移操作的生成元来分析：看 $\langle\alpha|\pi^{+}\vec{P}\pi|\alpha\rangle$ 与 $\langle\alpha|\vec{P}|\alpha\rangle$ 的关系。可以先看 $\pi\cdot\mathcal{T}(d\vec{x}')|\alpha\rangle$ 的效果。



假设 $|\alpha\rangle=|\vec{x}\rangle$，$\mathcal{T}(d\vec{x}')|\vec{x}\rangle=|\vec{x}+d\vec{x}'\rangle$

$$\pi\mathcal{T}(d\vec{x}')|\vec{x}\rangle=|-(\vec{x}+d\vec{x}')\rangle$$

$$=|-\vec{x}-d\vec{x}'\rangle=\mathcal{T}(-d\vec{x}')|-\vec{x}\rangle$$

$$=\mathcal{T}(-d\vec{x}')\pi|\vec{x}\rangle$$

$$\therefore\ \pi\mathcal{T}(d\vec{x}')=\mathcal{T}(-d\vec{x}')\pi,\Rightarrow\pi\mathcal{T}(d\vec{x}')\pi^{+}=\mathcal{T}(-d\vec{x}')$$

也就是：$\pi\left(1-\frac{i\vec{P}\cdot d\vec{x}'}{\hbar}\right)\pi^{+}=1+i\frac{\vec{P}\cdot d\vec{x}'}{\hbar}$

$$\Rightarrow\quad\pi^{+}\vec{P}\pi=-\vec{P}\qquad\text{或}\quad\{\pi,\vec{P}\}=0.$$

• 角动量的变换行为呢？

对轨道角动量 $\vec{L}=\vec{x}\times\vec{P}$，可知 $\pi^{+}\vec{L}\pi=\vec{L}$.

因为每个分量都与 π 对易. $\pi^{+}\vec{x}\times\vec{P}\pi=\pi^{+}\vec{x}\pi\times\pi^{+}\vec{P}\pi=\vec{x}\times\vec{P}$

对自旋角动量怎么办？

考虑3维空间的转动与反射操作.（对 $\vec{V}=(V_1,V_2,V_3)^{T}$）

我们可以写出 π 的矩阵 $R^{(P)}=\begin{pmatrix}-1&&0\\&-1&\\0&&-1\end{pmatrix}$，

说明 ~~再利用~~ $R^{(P)}R^{(r)}=R^{(r)}R^{(P)}$，再利用"对应式"

$$\pi\mathcal{D}(R^{(r)})=\mathcal{D}(R^{(r)})\pi,\quad\text{和}\quad\mathcal{D}(R)=1-i\frac{\vec{J}\cdot\vec{n}}{\hbar}\varepsilon$$

$$\Rightarrow\quad\pi^{+}\vec{J}\pi=\vec{J}\quad\text{或}\quad[\pi,\vec{J}]=0.$$

$\langle \vec{X} \rangle_{D(R)} = R\langle \vec{x} \rangle$, $\langle \vec{J} \rangle_{D(R)} = R\langle \vec{J} \rangle$

在转动情况，$\vec{J}$ 与 $\vec{x}$ 的变换方式一样，所以可称为矢量.

但是 $\vec{x}$ 与 $\vec{p}$ 在 π 变换下是奇的，~~被~~而 $\vec{J}$ 是偶的，所以性质不同. $\vec{x}$ 与 $\vec{p}$ 称为 polar 矢量，$\vec{J}$ 称 轴 axial 矢量，或 pseudo vectors.

再考虑一个物理量 $\vec{S}\cdot\vec{x} = S_1x_1 + S_2x_2 + S_3x_3$. (自旋轨道耦合)

利用对易关系容易证明 $[D(R), \vec{S}\cdot\vec{x}] = 0$，类似于 $\vec{S}\cdot\vec{L}$ 与 $\vec{x}\cdot\vec{P}$

即 $\langle \vec{S}\cdot\vec{X} \rangle_R = \langle \vec{S}\cdot\vec{X} \rangle$. 利用 $[L_\alpha, x_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma$

然而 $\pi^+ \vec{S}\cdot\vec{x}\,\pi = -\vec{S}\cdot\vec{x}$，$\pi^+ \vec{S}\cdot\vec{L}\,\pi = \vec{S}\cdot\vec{L}$

真 scalar

因此 $\vec{S}\cdot\vec{x}$ 称为 pseudo scalar.

- 宇称变换下的波函数.

我们知道 $\psi(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | \alpha \rangle$. 那么 $\langle \vec{x}' | \pi | \alpha \rangle = \langle -\vec{x}' | \alpha \rangle = \psi(-\vec{x}')$

对于 π 的本征态 $|\alpha\rangle$: $\boxed{\pi|\alpha\rangle = \pm|\alpha\rangle}$,

$\Rightarrow \langle \vec{x}' | \pi | \alpha \rangle = \pm\langle \vec{x}' | \alpha \rangle \boxed{= \psi(-\vec{x}')} \Rightarrow \psi(\vec{x}') = \pm\psi(\vec{x}')$

即其波函数是偶或奇的.

不是所有的我们~~感~~去趣的波函数都有确定的宇称.

比如 $\psi_p(x) = e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ 它没有宇称性. 这是由于 $[P, \pi] \neq 0$.

而角动量的本征态有确定宇称. $\boxed{Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta',\varphi') \quad 其中. \ \theta' = \pi - \theta,\ \varphi' = \pi + \varphi.}$

$(\because [\pi, \vec{J}] = 0) \rightarrow$ 有共同本征态

- 定理：设 $[\pi, H] = 0$. $|n\rangle$ 是 H 的属于 E_n 的本征态. 且 $|n\rangle$ 不简并，则 $|n\rangle$ 有确定宇称.

证明：定义 $\frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle$，证明其是 π 的本征态，本征值 $\pm$ 也是 H 的本征态，本征值为 E_n. 由于不简并 $\Rightarrow |n\rangle \propto \frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$