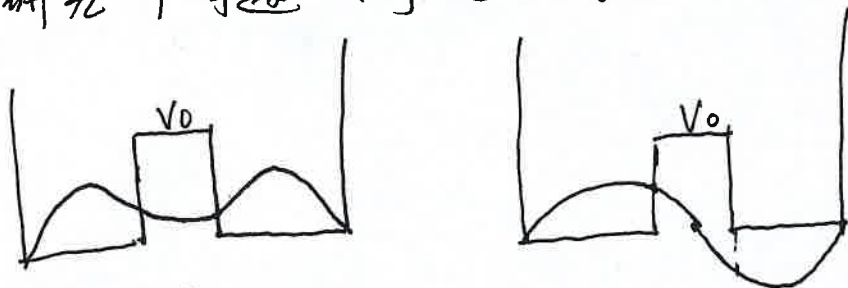


我们来研究一个有趣的问题：对称双势阱



对称 $|S\rangle$ 反对称 $|A\rangle$

由于 $[H, \pi] = 0$, $\checkmark$ 且不简并. 所以能级有宇称. 最低的能级是 $|S\rangle$, 偶宇称, 第一激发态 $|A\rangle$, 奇宇称. 这是由于 $|A\rangle$ 的波函数 ψ 更大, 动能大. $\Rightarrow E_A > E_S$.

我们可以构造一个 $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle - |A\rangle)$ 和一个 $|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle + |A\rangle)$. 处于 $|R\rangle$ 态时粒子大概率出现在右边, 反之处于 $|L\rangle$ 态时, 出现在左边. 它们不是 π 的本征态, 也不是能量本征态. 假设 $t=0$ 时, 粒子处于 $|R\rangle$ 态, 那么 $t>0$ 时.

$$|t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iHt/\hbar} |R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-iE_S t/\hbar} |S\rangle - e^{-iE_A t/\hbar} |A\rangle)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_S t/\hbar} (|S\rangle - e^{-i\frac{E_A - E_S}{\hbar} t} |A\rangle)$$

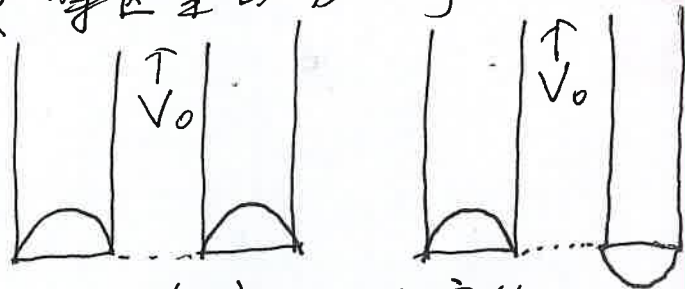
当 $t = \frac{T}{2} = \frac{2\pi\hbar}{2(E_A - E_S)}$ 时, $|t\rangle \sim |L\rangle$ $\omega = \frac{E_A - E_S}{\hbar}$

$t=T$ 时, $|t\rangle$ 回到 $|R\rangle$.

这是一个粒子从一侧穿越经典禁区回到另一侧的过程.

现在令中间的势垒 $V_0 \rightarrow \infty$

$|S\rangle$ 与 $|A\rangle$ 趋于简并. 于是

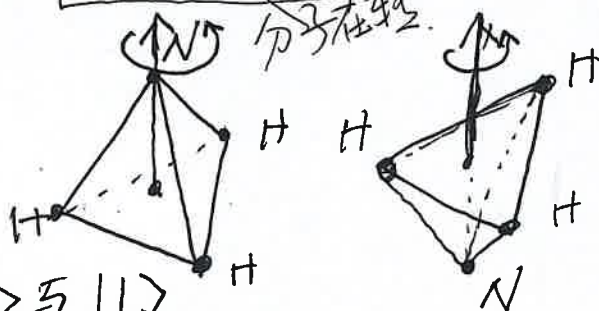


$|R\rangle$ 与 $|L\rangle$ 也成为能量本征态, 尽管它们不是宇称的本征态. 一旦粒子处于 $|R\rangle$, 它将永远处于 $|R\rangle$. 简并使得

1. $\frac{T}{2} \rightarrow \infty$ 2. $|R\rangle$ 与 $|L\rangle$ 本征

基态不遵守 H 的对称性。
自然界中很多：相变！
一个实际的例子是 NH_3 分子。

这是对称性^能破缺的例子。



N 原子可以处于 3 个 H 原子组成的

平面的上方或下方，类似于 $|R\rangle$ 与 $|L\rangle$ 。

而 $[H, \pi] = 0$ ，其^{能量}本征态也同时是 π 的本征态。因此是

$|R\rangle$ 与 $|L\rangle$ 的叠加。偶宇称与宇奇宇称态的能量差对

应 $24000 \text{ MHz} = \frac{E_A - E_S}{\hbar} \sim \frac{1}{T}$ ， $T \sim 0.5 \times 10^{10} \text{ s}$ 。

自然界中存在一些有机分子，如糖与氨基酸，只有 R 型或 L 型，称为有确定手性 (handedness)。其振荡 (隧穿) 时间在 $10^4 - 10^6$ 年量级。因此实际上不会变成另一手性。

如果在实验室合成糖，会有一半 R，一半 L。自然界为什么选择 R (或 L)？可能与宇宙大爆炸的随机结果？

• 宇称选择定则。

设 $\pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle$ ， $\pi|\beta\rangle = \varepsilon_\beta|\beta\rangle$ ， $\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\beta = \pm 1$

则 ~~$\langle\beta|\vec{x}|\alpha\rangle = 0$~~ $\langle\beta|\vec{x}|\alpha\rangle = 0$ 。除非 $\varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta$

证： $\langle\beta|\vec{x}|\alpha\rangle = \langle\beta|\pi^\dagger \pi \vec{x} \pi^\dagger \pi|\alpha\rangle = -\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \langle\beta|\vec{x}|\alpha\rangle$

其实就是说：如果 ψ_α, ψ_β 宇称相同， $\int \psi_\beta^* \vec{x} \psi_\alpha d\vec{x} = 0$ 。

跃迁的选择定则。 due to Wigner.

对于非简并能级, $[H, \pi] = 0$ 的系统, 有 $\langle n | \vec{x} | n \rangle = 0$.

即电偶矩为零.

对于简并能级, 没有这个结论.

推论: 宇称性为奇的算符, 如 $\vec{p}$, $\vec{S} \cdot \vec{x}$ 只有不同宇称性的态之间有非零矩阵元.

• 宇称不守恒.

(1) 守恒: 若 $[H, \pi] = 0$, 那么 $\pi |t\rangle = \pi U(t) |\alpha(0)\rangle$
 $= U(t) \pi |\alpha(0)\rangle$

在初态有宇称的条件下: $\pi |\alpha(0)\rangle = \epsilon |\alpha(0)\rangle$.

$\pi |t\rangle = U(t) \epsilon |\alpha(0)\rangle = \epsilon |t\rangle$.

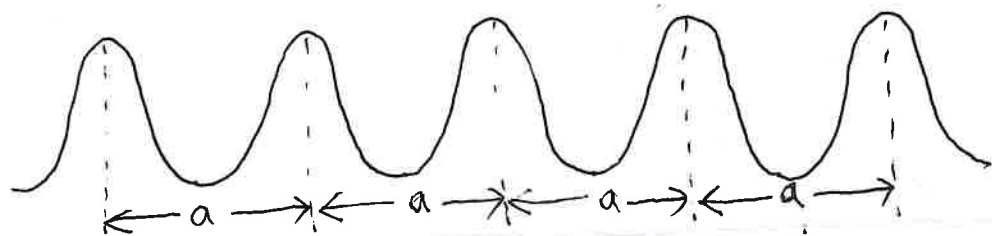
$\therefore$ 宇称守恒.

(2) 描述基本粒子间弱相互作用. H 不是空间反射不变的. 因此即使初态有宇称, 其衰变末态仍可以是不同宇称态的叠加. 衰变产物的角分布依赖于 $\langle \vec{S} \rangle \cdot \vec{p}$, $\leftarrow$ pseudoscalar. 关联

此物理量可以“感觉”到 $|\alpha\rangle$ 宇称性的变化!

§ 离散对称性：晶格平移。

考虑一维晶格 $V(x \pm a) = V(x)$ 。电子在正离子形成
的链上运动。



$$T^\dagger(l) x T(l) = x + l \quad (\because \langle x' | T^\dagger(l) x T(l) | x \rangle = \langle x' + l | x | x' + l \rangle = \langle x' | x + l | x \rangle)$$

不保证 H 不变： $[H, T(l)] = [V(x), T(l)] \neq 0$ ($T(l) = e^{-i \frac{p}{\hbar} l}$)

但是 $T^\dagger(a) V(x) T(a) = V(x+a) = V(x)$

$\therefore [H, T(a)] = 0$ 或 $T^\dagger(a) H T(a) = H$

H 与 $T(a)$ 有共同本征函数。但 $T(a) \neq T^\dagger(a) \Rightarrow$ 本征值是复数。
但有“尾巴”扩展到 $n \pm 1$ 点

构造 ~~系列~~ $|n\rangle$, $\langle x | n \rangle$ 集中在第 n 个离子附近, $T(a) |n\rangle = |n+1\rangle$

设 $\langle n | H | n \rangle = E_0$ 与 n 无关, 因为平移不变。

由于离子间 $\sim$ 势垒很高,

$$\begin{aligned} \langle n' | H | n \rangle &= \int dx \langle n' | x \rangle \langle x | H | n \rangle \\ &= \int dx \psi_{n'}^*(x) \left[\frac{-\hbar^2 d^2}{2m dx^2} + V(x) \right] \psi_n(x) \end{aligned}$$

$\langle n' | H | n \rangle \neq 0$, 只当 $n' = n$, 或 $n' = n \pm 1$

这称为紧束缚近似 (tight-binding appr.)

令 $\langle n \pm 1 | H | n \rangle = -\Delta$ 也与 n 无关。

利用 $\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$, 我们有

$$H |n\rangle = E_0 |n\rangle - \Delta |n+1\rangle - \Delta |n-1\rangle$$

构造 $|k\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ina \cdot k} |n\rangle$, k 是波矢, $-\pi \leq ka < \pi$
($\because ka = \pi + \theta$ 与 $ka = -\pi + \theta$ 等价)

易证: $T(a) |k\rangle = e^{-ika} |k\rangle$ 是 $T(a)$ 的本征态. ($T(a) |n\rangle = |n+1\rangle$)

计算:

$$\begin{aligned} H |k\rangle &= E_0 \sum_n e^{inka} |n\rangle - \Delta \sum_n e^{ikna} |n+1\rangle - \Delta \sum_n e^{ikna} |n-1\rangle \\ &= E_0 \sum_n e^{ikna} |n\rangle - \Delta \sum_n (e^{ikna - ika} + e^{ikna + ika}) |n\rangle \\ &= [E_0 - 2\Delta \cos(ka)] |k\rangle \end{aligned}$$

$\therefore |k\rangle$ 是 H 的本征态. 本征值随 k 变化, 从 $E_0 - 2\Delta$ 到 $E_0 + 2\Delta$

由于 $\langle x' | T(a) |k\rangle = \langle x' - a | k \rangle \leftarrow \begin{aligned} T(a) |x'\rangle &= |x' + a\rangle \\ T^\dagger(a) |x'\rangle &= |x' - a\rangle \end{aligned}$

$$\text{又: } \langle x' | e^{-ika} |k\rangle = e^{-ika} \langle x' | k \rangle$$

$$\therefore \langle x' - a | k \rangle = \langle x' | k \rangle e^{-ika} \quad (\text{即 } \psi_k(x' - a) = \psi_k(x') e^{-ika})$$

$$\text{解为 } \langle x' | k \rangle = e^{ikx'} u_k(x'), \text{ 其中 } u_k(x') = u_k(x' - a)$$

这就是 Bloch 定理的结果!

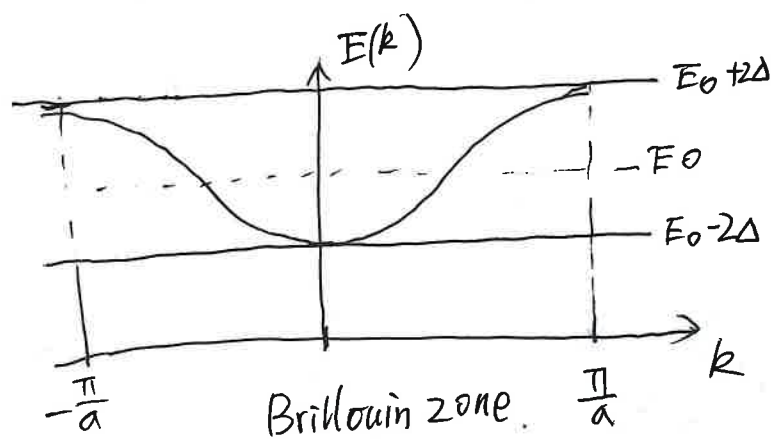
$\langle x' | k \rangle$ 是平面波 (波矢为 k) 乘以周期为 a 的函数 $u_k(x')$

$$u_k(x') = \sum_n e^{inak} \langle x' | n \rangle e^{-ikx'} \quad \text{易证其周期性.}$$

我们看到：如果 $\langle n \pm 1 | H | n \rangle = -\Delta = 0$ ，即 $|n\rangle$ 是 H 的本征态。

所有 $|k\rangle$ ， $-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}$ ，都是属于 E_0 能级的本征态。同时具有 $T(a)$ 的不变性。→ 无穷简并。 ($H|n\rangle = E_0|n\rangle$ ，不满足平移对称性的本征态)

由于 $\Delta \neq 0$ ，简并解除 (lifted)，类似 $|A\rangle$ 与 $|S\rangle$ 不简并。



如果考虑周期边界条件： $[T(a)]^L = \mathbb{1}$

$$\Rightarrow e^{ik a L} = 1 \Rightarrow k a = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = -\frac{L}{2}, \dots, \frac{L}{2}, \text{ 共 } L \text{ 个.}$$