§ 3.2 量子泊松括号

大家知道：在定态里，力学量的平均值不随时间改变。

现在问：在任意状态，力学量的平均值如何随时间改变呢？

力学量 **F** 在状态 ψ （任意状态）的平均值为

$$\boxed{\overline{F} = \int \psi^{*} \hat{F} \psi d\tau} \qquad \textbf{(1)}$$

导致力学量的平均值随时间变化的原因有两个：

一是波函数是时间的函数；

二是力学量 $\hat{F}$ 可能显含时间 **t**。

于是：

$$\frac{d\overline{F}}{dt} = \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi d\tau$$

$$+ \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi d\tau + \int \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} d\tau \quad \textbf{(2)}$$

若将薛定谔方程

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

及其复共轭形式

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

代入(2)式，则可得

$$\frac{d\overline{F}}{dt}=\int\psi^{*}\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}\psi d\tau+\frac{1}{i\hbar}\int\frac{\partial\psi^{*}}{\partial t}\hat{F}\hat{H}\psi d\tau-\frac{1}{i\hbar}\int(\hat{H}\psi)^{*}\hat{F}\psi d\tau \quad (3)$$

利用 $\hat{H}$ 的厄米条件：

$$\int(\hat{H}\psi)^{*}\hat{F}\psi d\tau=\int\psi^{*}\hat{H}\hat{F}\psi d\tau$$

于是(3)式可变为

$$\boxed{\frac{d\overline{F}}{dt}=\int\psi^{*}\{\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{F}]\}\psi d\tau} \quad (4)$$

其中 $[\hat{H},\hat{F}]=\hat{H}\hat{F}-\hat{F}\hat{H}$ 是算符 $\hat{H}$ 和 $\hat{F}$ 的对易关系。

(4)式决定了在任意状态ψ中力学量**F**的平均值如何随时间变化。

由(4)式可见：力学量 **F** 在任意状态中的平均值的时间导数，等于$\dfrac{\partial \hat{F}}{\partial t}+\dfrac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{F}]$算符在这一状态中的平均值。

我们用下式定义力学量对时间导数的算符：$\dfrac{d\hat{F}}{dt}$

$$\boxed{\frac{d\overline{F}}{dt}=\frac{d\overline{\hat{F}}}{dt}=\overline{\frac{d\hat{F}}{dt}}=\int\psi^{*}\frac{d\hat{F}}{dt}\psi d\tau} \qquad (5)$$

即：如果一个算符(即：$\frac{d\hat{F}}{dt}$)在任意状态中的平均值等于力学量 **F** 在这一状态中的平均值时间导数（即：$\frac{d\overline{F}}{dt}$），则称这一算符为 **F** 对时间导数的算符。

比较(4)式和(5)式可得

$$\boxed{\frac{d\hat{F}}{dt}=\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{F}]} \qquad \textbf{(6)}$$

注意区分：

① 力学量对时间导数的算符 $\frac{d\hat{F}}{dt}$ 和力学量算符对时间的导数 $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t}$。

例如：坐标算符 $\vec{r}$ 不含时间，则 $\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = 0$，然而，坐标对时间的导数，即速度的算符是：

$$\hat{\upsilon} = \frac{d\hat{\vec{r}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \vec{r}] \qquad (7)$$

② 在经典力学中，力学量对时间的导数可写成

$$\frac{df}{dt}=\frac{\partial f}{\partial t}+[\hat{H},f]_{PB} \qquad (8)$$

其中$[\hat{H},f]_{PB}$是（经典）泊松括号。

而在量子力学中，力学量对时间的导数由(6)式表示，

所以，(6)式中$\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{F}]$的称为量子泊松括号。

利用(6)式，并注意到坐标和动量算符都不明显依赖时间，可得

$$\boxed{\frac{d\hat{\vec{r}}}{dt}=\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\vec{r}]},\quad \boxed{\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{\vec{p}}]} \qquad (9)$$

例题：粒子在势能场$U(\vec{r})$中运动，求坐标和动量对时间导数的算符。

解：　粒子的哈密顿算符是$\hat{H}=\dfrac{\hat{\vec{p}}^{2}}{2m}+U(\vec{r})$，

代入(9)得：

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt}=\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{x}_i]=\frac{i}{2m\hbar}\sum_i[\hat{p}_j{}^2,x_i]$$

$$=\frac{i}{2m\hbar}\sum_i(\hat{p}_j[\hat{p}_j,x_i]+[\hat{p}_j,x_i]\hat{p}_j)$$

$$= \frac{i}{2m\hbar}\sum_i \hat{p}_j{}^2(-i\hbar\delta_{ji})$$

$$= \frac{\hat{p}_i}{m} \quad \textbf{(10)}$$

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}_i] = \frac{i}{\hbar}[U(\vec{r}),(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i})]$$

$$= [U(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x_i}] \quad \textbf{(11)}$$

将**(11)**式右边的对易关系作用在任意状态$\psi(\vec{r})$上，可以得

$$[U(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x_i}] = -\frac{\partial U}{\partial x_i} \quad \textbf{(12)}$$

于是

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x_i} \tag{13}$$

将(10)式和(13)式写成矢量形式就可得

$$\frac{d\hat{\vec{r}}}{dt} = \frac{\hat{\vec{p}}}{m}, \quad \frac{d\hat{\vec{p}}}{dt} = -\nabla U \tag{14}$$

这表明，经典力学的运动方程在量子力学中以算符的形式成立。

§ 3.3 对称性与守恒律

一、守恒量

在定态中，力学量的平均值不随时间变化。

在非定态中，则力学量的平均值一般要随时间变化。

但是，有些力学量，在任意状态中的平均值都不随时间变化，即

$$\boxed{\frac{d\overline{F}}{dt}=0} \quad （对任意状态） \qquad \mathbf{(1)}$$

这种力学量称为守恒量。

如果 **F** 是守恒量，则

$$\overline{\frac{d\hat{F}}{dt}} = \frac{d\overline{F}}{dt} = 0 \qquad (2)$$

对任意状态都成立，因而必有 $\frac{d\hat{F}}{dt} = 0$，即

$$\boxed{\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}] = 0} \qquad (3)$$

这是力学量 **F** 守恒的条件。

进一步考虑到：力学量的算符一般都不明显地与时间有关：$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t}=0$，在此情况下，守恒量的条件(3)式变为：

$$\boxed{-i\hbar\frac{d\hat{F}}{dt}=[\hat{H},\hat{F}]=0} \qquad (4)$$

(4)式表明：若 $\hat{F}$ 与 $\hat{H}$ 对易，则 **F** 是守恒量。

守恒量有两个特点：(a). 在体系的任何态下，平均值不随时间变；(b). 在体系的任何态下，几率分别不随时间变。

注意：$\mathbf{F}$ 是守恒量，并不意味着它在任意状态ψ 中都取一个特定的不变的数值。这是因为：一个任意的状态ψ 一般不是$\hat{F}$ 的本征态，在状态ψ 中，$\mathbf{F}$ 没有确定值。$\mathbf{F}$ 守恒，只是它在ψ 中的平均值（期望值），以及它在中取值的几率分布不随时间变化。

[定理 1]：如果F 守恒，则它在任意状态ψ 中取值的几率分布不随时间变化。

证明：由(4)式可知，如果 **F** 是守恒量，则 $\hat{F}$ 与 $\hat{H}$ 对易，

因而有共同本征函数系 $\varphi_n(n=1,2,3\ldots)$，令

$$\psi=\sum_n C_n\varphi_n\,,\quad C_n=\int\varphi^*\psi d\tau \qquad \textbf{(1)}$$

则 **F** 在 ψ 中取值的几率分布是 $|C_n|^2$。于是我们要证明

$$\boxed{\frac{d|C_n|^2}{dt}=0}$$。

而

$$\frac{d|C_n|^2}{dt}=\frac{dC_n{}^*}{dt}C_n+C_n{}^*\frac{dC_n}{dt}$$

$$=(\int\varphi_n\frac{\partial\psi^*}{\partial t}d\tau)C_n+C_n{}^*\int\varphi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}d\tau$$

(2)

利用薛定谔方程及其复共轭形式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \quad 和 \quad -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=(\hat{H}\psi)^*$$

(2)式变为

$$\frac{d|C_n|^2}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\int \varphi_n(-\hat{H}\psi)^* d\tau \cdot C_n$$

$$+ C_n^* \int \varphi_n^* \hat{H}\psi d\tau]$$

（利用 $\hat{H}$ 的厄米性）

$$= -\frac{i}{\hbar}[C_n \int \varphi_n(-\hat{H}\psi)^* d\tau - C_n^* \int \psi(\hat{H}\varphi_n)^* d\tau]$$

（利用 $\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$，$(\hat{H}\varphi_n)^* = E_n\varphi_n^*$）

$$= -\frac{i}{\hbar}[C_n E_n \int \psi^* \varphi_n d\tau - C_n^* E_n \int \psi \varphi_n^* d\tau]$$

（利用(1)式）

$$= \frac{i}{\hbar}[E_n C_n C_n^* - E_n C_n^* C_n]$$

$$= 0$$

$$\therefore \frac{d|C_n|^2}{dt} = 0$$

[定理 2]：设体系有两个守恒量$\hat{F}$、$\hat{G}$，但$[\hat{F},\hat{G}]\neq 0$，则一般说来，体系的能级是简并的。

证明：由于 F 是守恒量，则$\hat{F}$与$\hat{H}$对易，它们有共同的本征函数系，设

$$\hat{H}\psi = E\psi \,, \qquad \text{(a)}$$

$$\hat{F}\psi = f\psi \qquad \text{(b)}$$

由于$\hat{G}$是守恒量，即$[\hat{H},\hat{G}]=0$，我们考虑

$$\hat{H}(\hat{G}\psi)=\hat{G}\hat{H}\psi = E(\hat{G}\psi) \qquad \text{(c)}$$

（a）式和（c）式表明，ψ 和$\hat{G}\psi$ 都是能量本征值为E的本征函数。

又由于$[\hat{F},\hat{G}]\neq 0$，故

$$\hat{F}(\hat{G}\psi)\neq \hat{G}\hat{F}\psi = f(\hat{G}\psi) \qquad \text{（d）}$$

比较（**b**）与（**d**），有

$$\hat{G}\psi \neq c\psi$$

即$\hat{G}\psi$和ψ是不同的态。所以：$\hat{H}$的属于本征值E的本征态至少有两个，即至少是二重简并的。

例题 1：设体系 $\hat{H}$ 不显含 **t**，证明 $\hat{H}$ 是守恒量，即能量守恒。

证明： $\because \hat{H}$ 不显含 **t**

$$\therefore \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

$$又 \because [\hat{H}, \hat{H}] = 0$$

$$\therefore \frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{H}]$$

$$= 0$$

即 $\hat{H}$ 守恒（能量守恒）。

例题 2：对于自由粒子，$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$，证明动量 $\vec{p}$ 是守恒量。

证明：由于 $\hat{\vec{p}}$ 不显含 **t**

所以 $\frac{\partial\hat{\vec{p}}}{\partial t}=0$

又 $$[\hat{H},\hat{\vec{p}}]=[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m},\hat{\vec{p}}]=\frac{1}{2m}[\hat{\vec{p}}^2,\hat{\vec{p}}]$$

$$=\frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}}[\hat{\vec{p}},\hat{\vec{p}}]+[\hat{\vec{p}},\hat{\vec{p}}]\hat{\vec{p}})$$

$$=0$$

$$\therefore \quad \frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=\frac{\partial\hat{\vec{p}}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{\vec{p}}]=0$$

故 $\vec{p}$ 是守恒量。

例题 3：中心力场中运动的粒子： $\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+U(\vec{r})$

证明角动量守恒。

证明： $$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+U(\vec{r})=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}+U(\vec{r})$$

而角动量 $\hat{L}^2$，$\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ 算符只与变量 θ，φ 有关，

而与 r 无关，很容易证明

$$\boxed{[\hat{H},\hat{L}^2]=[\hat{H},\hat{L}_x]=[\hat{H},\hat{L}_y]=[\hat{H},\hat{L}_z]=0}$$

另外，$\hat{L}^2$，$\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ 的表达式中不显含 **t**。

于是： $$\frac{\partial\hat{L}^2}{\partial t}=\frac{\partial\hat{L}_x}{\partial t}=\frac{\partial\hat{L}_y}{\partial t}=\frac{\partial\hat{L}_z}{\partial t}=0$$

所以：$$\frac{d\hat{L}^2}{dt} = \frac{d\hat{L}_x}{dt} = \frac{d\hat{L}_y}{dt} = \frac{d\hat{L}_z}{dt} = 0$$

即：$\hat{L}^2$，$\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ 角动量是守恒量。

二、对称变换

大家已经知道，在经典力学中，产生能量守恒和动量守恒有着深刻的物理原因：产生能量守恒和动量守恒的根源在于时间和空间的均匀性。

时间的均匀性 ⟶ 能量守恒

空间的均匀性 ⟶ 动量守恒

空间的各向同性 ⟶ 角动量守恒

那么在量子力学中，情况又是怎么样的呢？

在量子力学中，我们将看到：能量、动量、角动量的守恒与时空对称性有密切关系。

力学系统的时空对称性就是它的运动规律的不变性。

在量子力学中，运动规律是薛定谔方程，它决定于系统的哈密顿算符 $\hat{H}$，因此，量子力学系统的对称性表现为哈密顿算符 $\hat{H}$ 的不变性。

用S表示某一时空变换，在这一变换下，任意波函数ψ

变为$\psi^{(S)}$：

$$\boxed{\psi^{(S)}=\hat{S}\psi} \tag{1}$$

设$\hat{O}$为作用在ψ上的一个任意算符：

$$\hat{O}\psi=\varphi \tag{2}$$

(2)式经过S变换后，应有以下形式：

$$\hat{O}^{(S)}\psi^{(S)}=\varphi^{(S)} \tag{3}$$

那么，$\hat{O}^{(S)}$的具体形式是怎么样的呢？

将 $\hat{S}$ 作用在(2)式两边，得

$$\hat{S}\hat{O}\psi = \hat{S}\varphi = \varphi^{(S)} \tag{4}$$

我们定义 $\hat{S}$ 变换的逆变换为 $\hat{S}^{-1}$，于是有

$$\hat{S}\hat{S}^{-1} = \hat{S}^{-1}\hat{S} = 1 \tag{5}$$

其中 1 表示恒等变换。上式的含义是：变换 $\hat{S}$ 和逆变换 $\hat{S}^{-1}$ 相继作用的结果，相互抵消，等于没有变换。

另一方面，空间变换算符 $\hat{S}$ 有一个非常重要的性质：幺正性。它来源于一个基本的要求：空间变换应保持概率的守恒。根据这一要求，如果波函数在变换前是归一化的，则在变换后也应是归一化的：

$$\int \psi^{(s)*}\psi^{(s)}d\tau=\int \psi^{*}\psi d\tau=1 \qquad (6)$$

将（1）式代入上式有

$$\int (S\psi)^{*}(S\psi)d\tau=\int \psi^{*}\hat{S}^{+}\hat{S}\psi d\tau=\int \psi^{*}\psi d\tau$$

由于ψ是任意波函数，上式表明$\hat{S}$应满足

$$\boxed{\hat{S}^{+}\hat{S}=1,\ \ \hat{S}^{+}=\hat{S}^{-1}} \qquad (7)$$

这正是幺正性的条件。

于是由(4)式可得

$$\varphi^{(S)} = \hat{S}\hat{O}\cdot 1\cdot\psi$$

$$= \hat{S}\hat{O}\hat{S}^{-1}\hat{S}\psi$$

$$= \hat{S}\hat{O}\hat{S}^{-1}\psi^{(S)} \quad \text{（利用(1)式）} \tag{8}$$

将(3)式与(8)式比较后，不难看出：

$$\boxed{\hat{O}^{(S)} = \hat{S}\hat{O}\hat{S}^{-1}} \tag{9}$$

公式(1)和公式(9)分别是在时空变换 S 之下，波函数 ψ 和算符 $\hat{O}$ 的变换规律。以上讨论适用于任意时空变换。

现在假定：S 是系统的一个对称变换，即系统的哈密顿算符在这一变换下不变：

$$\boxed{\hat{H}^{(S)}=\hat{H}} \tag{10}$$

由(9)式和(10)式有

$$\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}=\hat{H}^{(S)}=\hat{H} \tag{11}$$

(11)式两边右乘 $\hat{S}$，并利用 $\hat{S}^{-1}\hat{S}=\hat{S}\hat{S}^{-1}=1$：

$$\hat{S}\hat{H} = \hat{H}\hat{S} \tag{12}$$

或：

$$\boxed{[\hat{H},\hat{S}] = 0} \tag{13}$$

公式（**13**）就是时空变换 S 的不变性条件。同时，根据守量的条件，（**13**）式还表明：和变换 S 相联系，必有一个守恒量。

注意：$\hat{S}$ 一般不是厄米算符，所以它本身不是守恒量算符，但它可以决定一个守恒量算符。

下面举几个例子：

例1. 空间平移不变性与动量守恒

考虑沿 x 方向的无穷小平移 δx，则波函数的变化为

$$\psi(x) \to \psi(x-\delta x) = \psi(x) - \delta x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \ldots$$

$$= \exp\{-\delta x \frac{\partial}{\partial x}\}\psi(x) \qquad \textbf{(14)}$$

于是平移变换算符为

$$\boxed{\hat{S}_{\delta x} = \exp\{-\delta x \frac{\partial}{\partial x}\} = e^{-i\delta x \hat{p}_x/\hbar}} \qquad \textbf{(15)}$$

其中：

$$\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}} \tag{16}$$

为相应的无穷小算符，它就是大家熟知的动量算符的 x 分量。

对于三维空间的无穷小平移 $\delta\vec{r}$，则有

$$\hat{S}_{\delta\vec{r}} = e^{-i\delta\vec{r}\cdot\hat{\vec{p}}/\hbar} \tag{17}$$

其中：

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} \tag{18}$$

即动量算符。

如果体系对于平移具有不变性，即$[\hat{H}, \hat{S}_{\delta\vec{r}}] = 0$；利用$\left[A, e^{\lambda B}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}[A, B^n] = [A, B] \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} B^{n-1}$（证明见《量子力学习题精选与剖析》钱伯初、曾谨言编著），则有

$$[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = 0 \tag{19}$$

根据力学量守恒条件可知：动量算符守恒。

例2. 空间旋转不变性与角动量守恒。

先考虑一个简单情况：即体系绕 z 轴旋转无穷小角度 $\delta\varphi$，则波函数的变化为

$$\psi(\varphi) \to \psi(\varphi - \delta\varphi) = \psi(\varphi) - \delta\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \dots$$

$$= \exp\{-\delta\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\}\psi(\varphi) \qquad \textbf{(20)}$$

于是绕 z 轴旋转的变换算符为

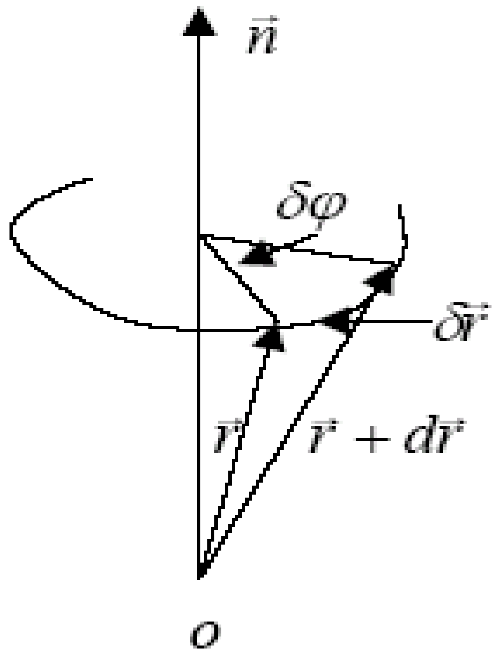
$$\boxed{\hat{S}_{\delta\varphi} = \exp\{-\delta\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\} = e^{-i\delta\varphi\hat{L}_z/\hbar}} \qquad \textbf{(21)}$$

其中：

$$\boxed{\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}} \tag{22}$$

是大家熟知的角动量的 z 分量算符。

现在来考虑三维空间中的绕某方向 $\vec{n}$（单位矢）的无穷小旋转（如图），



其中

$$\delta\vec{r} = \delta\vec{\varphi} \times \vec{r}$$
$$= \delta\varphi\vec{n} \times \vec{r} \tag{23}$$

则波函数的变化为

$$\psi(\vec{r}) \to \psi(\vec{r} - \delta\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \delta\varphi\vec{n} \times \vec{r})$$
$$= \psi(\vec{r}) - \delta\varphi(\vec{n} \times \vec{r}) \cdot \nabla\psi(\vec{r}) + \cdots\cdots$$
$$= e^{-\delta\varphi(\vec{n}\times\vec{r})\cdot\nabla}\psi(\vec{r}) \tag{24}$$

于是绕 $\vec{n}$ 轴旋转的变换算符为

$$\hat{S}_{\delta\vec{\varphi}} = e^{-\delta\varphi(\vec{n}\times\vec{r})\cdot\nabla} = e^{-i\delta\varphi(\vec{n}\times\vec{r})\cdot\vec{p}/\hbar}$$
$$= e^{-i\delta\varphi\vec{n}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})/\hbar}$$
$$= e^{-i\delta\varphi\vec{n}\cdot\hat{\vec{L}}/\hbar} \tag{25}$$

其中：

$$\boxed{\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}} \tag{26}$$

是大家熟知的角动量算符。

如果体系具有空间旋转不变性，即$[\hat{H}, \hat{S}_{\delta\vec{\varphi}}] = 0$，则有

$$\boxed{[\hat{H}, \hat{\vec{L}}] = 0} \tag{27}$$

由力学量守恒条件可知：角动量守恒。

三、宇称和宇称守恒

在量子力学中，除了有和经典力学对应的物理量外，还有一些物理量没有经典物理量和它们对应。

这类物理量的算符不可能通过将经典表示式中的坐标和动量算符的方式得到，只能借助于对称性的分析来确定。

宇称就是没有经典对应的物理量。它是系统具有空间反演对称时的守恒量。

空间反演变换是指粒子的位置矢径由 $\vec{r}$ 到 $-\vec{r}$ 的突变，这是一种不连续的空间变换，因而是经典力学中不会有的物理量。

如果用算符$\hat{I}$表示作用在波函数上的空间反演算符，其定义是：

$$\boxed{\hat{I}\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})} \qquad \textbf{(1)}$$

即，算符$\hat{I}$的作用是将波函数的变量$\vec{r}$变换为$-\vec{r}$。

若将算符$\hat{I}$再次作用到**(1)**式两边，可得到：

$$\hat{I}^2\psi(\vec{r})=\hat{I}\psi(-\vec{r})=\psi(\vec{r}) \qquad \textbf{(2)}$$

于是：

$$\hat{I}^2=1 \qquad \textbf{(3)}$$

表示恒等变换，即连续两次$\hat{I}$的作用结果，相互抵消。方程（3）式表明$\boxed{\hat{I}=\hat{I}^{-1}}$。作为空间变换算符，$\hat{I}$应满足幺正算符的一般条件（见上一节），$\hat{I}^{+}=\hat{I}^{-1}$。另外，还可

以证明：空间反演算符 $\hat{I}$ 是厄米算符（证明见教材）。

所以，$\hat{I}$ 既是幺正算符，又是厄米算符。

如果系统具有空间反演对称性，那就意味着

$$\boxed{[\hat{H},\hat{I}]=0}$$

由于 $\hat{I}$ 是厄米算符，所以它本身就是一种守恒量的算符。

这种由系统空间反演对称性决定的守恒量称为宇称。

$\hat{I}$ 称为宇称算符，它没有明显的表示式，它的作用是体现在它的定义式 $\hat{I}\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})$ 中的。

现在来求$\hat{I}$的本征值。其本征值方程为

$$\boxed{\hat{I}\psi(\vec{r}) = I\psi(\vec{r})} \tag{4}$$

其中I为本征值。用$\hat{I}$作用(4)式两边，得

$$\hat{I}^2\psi(\vec{r}) = I^2\psi(\vec{r}) \tag{5}$$

利用(3)式可得

$$I^2\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \tag{6}$$

于是：$I^2 = 1$，故$\hat{I}$的本征值为

$$\boxed{I = \pm 1} \tag{7}$$

相应地有两个本征态ψ_s和ψ_a分别满足方程

$$\hat{I}\psi_s(\vec{r}) = \psi_s(\vec{r}),\ \hat{I}\psi_a(\vec{r}) = -\psi_a(\vec{r}) \tag{8}$$

由(1)式可看出：

$$\psi_s(-\vec{r}) = \psi_s(\vec{r}),\ \psi_a(-\vec{r}) = -\psi_a(\vec{r}) \qquad (9)$$

这表明：字称算符 $\hat{I}$ 的两个本征态 $\psi_s(\vec{r})$ 和 $\psi_a(\vec{r})$ 分别是偶函数和奇函数，它们分别对应的本征值是 $+1$ 和 -1。

字称的具体意义：是表明波函数的奇偶性。

如果一个系统具有空间反演对称性，即 $\hat{I}\hat{H} = \hat{H}\hat{I}$（或 $[\hat{H},\hat{I}] = 0$），则 $\hat{H}$ 的本征函数也是 $\hat{I}$ 的本征函数系。

这种系统的定态波函数按宇称的本征值分为两大类：一类是奇宇称的态，一类是偶宇称的态。表现在函数形式：一类是奇函数，一类是偶函数。

如果一个系统具有空间反演对称性，并且在初始时刻（$t=0$）处于一定宇称态下，则以后任何时刻t仍然具有同样的宇称。这就是所谓的宇称守恒。

宇称守恒要求：状态波函数的奇偶性不随时间变化。

1956 年以前，人们一直认为自然界的各种基本相互作用过程都遵从宇称守恒，但是，后来杨振宁、李政道和吴健雄证实了在弱相互作用过程中宇称不守恒，从而使人类对自然界的对称性有了新的认识。

例题：证明角动量和宇称有共同的本征函数系。

证明：对于动量 $\hat{\vec{p}}$ 和坐标（即空间矢量 $\vec{r}$），可以证明

$$\hat{I}\vec{r}\hat{I}^{-1} = -\vec{r} \qquad (1)$$

$$\hat{I}\hat{\vec{p}}\hat{I}^{-1} = -\hat{\vec{p}} \qquad (2)$$

（证明（1）式：$\because \hat{I}\vec{r}\hat{I}\psi(r) = \hat{I}\vec{r}\,\psi(-\vec{r}) = -\vec{r}\,\psi(\vec{r})$，

$\therefore \hat{I}\vec{r}\hat{I} = -\vec{r}$，又 $\hat{I} = \hat{I}^{-1}$，$\hat{I}\vec{r}\hat{I}^{-1} = -\vec{r}$。

（2）式的证明完全类似。）

这表明，动量$\hat{\vec{p}}$和坐标（即空间矢量$\vec{r}$）一样，在空间反演下“改变符号”，这样的矢量称为真矢量或极矢量。即：坐标和动量在空间反演算符作用下，其符号改变了。

注意：系统的坐标系的基矢并没有发生改变，即仍然是右手坐标系，而这里的“改变符号”是由于空间反演算符的作用所导致的。

对于角动量$\hat{\vec{L}}$：

$$\hat{I}\hat{\vec{L}}\hat{I}^{-1}=\hat{I}(\vec{r}\times\hat{\vec{p}})\hat{I}^{-1}\quad（在叉乘中插入1=\hat{I}^{-1}\hat{I}）$$

$$=(\hat{I}\vec{r}\hat{I}^{-1})\times(\hat{I}\hat{\vec{p}}\hat{I}^{-1})\quad（利用叉乘和\hat{I}可对易）$$

$$=(-\vec{r})\times(-\hat{\vec{p}})\quad（利用前面(1)、(2)式）$$

$$=\vec{r}\times\hat{\vec{p}}=\hat{\vec{L}}\tag{3}$$

这表明：角动量在空间反演下“不改变符号”，这种矢量称为赝矢量或轴矢量。即：角动量 $\hat{\bar{L}}$ 在空间反演作用下，其符号却没有改变。

注意：角动量 $\hat{\bar{L}}$ 在空间反演作用下，没有改变符号的原因在于：空间反演前，角动量 $= \bar{r} \times \hat{\bar{p}}$ 遵循右手螺（即右手坐标系），符号为正（假设 $\hat{\bar{L}}$ 的方向朝上）；而空间反演后，角动量 $= \bar{r} \times \hat{\bar{p}}$ 遵循左手螺（即左手坐标系），符号仍然为正（此时的 $\hat{\bar{L}}$ 方向就朝下了）。因此，这中在空间反演时改变了方向的矢量 $\hat{\bar{L}}$ 就是赝矢量。

因此，以上关于动量 $\hat{\bar{p}}$ 和坐标（即空间矢量 $\bar{r}$ ）是真矢量；角动量是赝矢量的说法，与分析力学中所学的有关概念并不矛盾。

由(3)式可得：

$$\hat{I}\hat{\bar{L}} = \hat{\bar{L}}\hat{I}$$

或： $$[\hat{I}, \hat{\bar{L}}] = 0$$

即和对易，所以角动量与宇称有共同的本征函数系。

§ 3.4 全同粒子系与波函数的交换对称性

一. 全同粒子系的交换对称性

1. 全同粒子

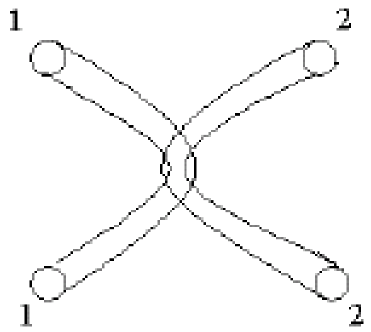
到目前为止，我们只讨论了单粒子的问题，现在开始讨论有关多粒子体系的问题。

在自然界中，经常碰到的多粒子系是由同类粒子组成的。所谓同类粒子是指粒子具有完全相同的内禀的客观属性，如静质量、电荷、自旋、磁矩、寿命等。

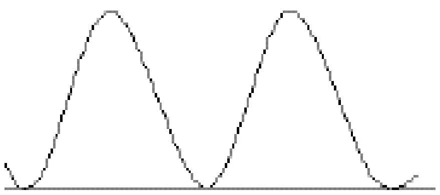
我们称具有完全相同的内禀的微观粒子为全同粒子。

2. 全同性原理

在经典力学中，尽管两个粒子的固有性质完全相同，但我们仍然可以区分这两个粒子。因为它们在运动过程中，都有自己确定的轨道，在任一时刻，都有确定的位置和速度，于是，我们就可以判断哪个是第一个粒子，哪个是第二个粒子，如图(a)所示：



a



b

c

在量子力学中，情况完全不是这样的。设初始时刻，两全同粒子的位置可以用两个波函数来表示（如图(b)）。在运动过程中，两个波函数会在空间发生重叠（如图(c)），由于两个粒子固有性质完全相同，它们的位置和速度又不能象经典粒子那样同时有确定值，因此，在两个波函数重叠的区域内，我们无法区分哪个是第一个粒子，哪个是第二个粒子。

由此可见：全同微观粒子只有当它们的波函数完全不重叠时，才是可以区分的。当波函数发生重叠后，它们就不可区分了。

全同粒子的这种不可区分性是微观粒子所具有的特性。由于这一特性，使得全同粒子所组成的体系中，两全同粒子相互变换后，不引起物理状态的改变。这个结论被称为全同性原理。它是量子力学中的基本原理，是量子力学的基本假设之五。

这一全同性原理对由相同的微观粒子组成的多粒子体系的波函数加了很强的限制。

3. 全同粒子系的交换对称性

现在，我们来看看全同性原理对多粒子体系的性质会引起什么结论。

考虑 **N** 个全同粒子组成的多粒子体系，体系的波函数为

$$\psi \equiv \psi(q_1,\ldots\ldots q_i,\ldots\ldots\ldots q_j,\ldots\ldots q_N,t) \qquad \textbf{(1)}$$

其中 q_i 表示第 i 个粒子的全部坐标（例如包括空间坐标和自旋坐标等）。

用符号 P_{ij} 表示第 i 个粒子与第 j 个粒子的全部坐标的交换，即 P_{ij} 表示交换算符：

$$P_{ij}\psi \equiv P_{ij}\psi(q_1,\ldots\ldots q_i,\ldots\ldots\ldots q_j,\ldots\ldots q_N,t)$$

$$\equiv \psi(q_1,\ldots\ldots q_j,\ldots\ldots\ldots q_i,\ldots\ldots q_N,t) \qquad \textbf{(2)}$$

根据全同性原理，由于我们无法区分哪个是第 i 个粒子，哪个是第 j 个粒子，因此，只能认为(1)和(2)式描述的是同一状态。

在量子力学中，描述同一状态的波函数之间最多可以相差一个常数因子，即：

$$\boxed{P_{ij}\psi = C\psi} \qquad \textbf{(3)}$$

用交换算符 P_{ij} 再运算一次，(3)式变为

$$P_{ij}{}^2\psi = CP_{ij}\psi = C^2\psi \qquad \textbf{(4)}$$

显然：$P_{ij}^{2}=1 \longrightarrow C^{2}=1$，因而

$$\boxed{C=\pm 1} \tag{5}$$

将(5)式代入(3)式，可看出，算符 P_{ij} 有（且只有）两个本征值，即 $C=\pm 1$。即全同粒子的波函数必须满足下列关系之一：

$$\boxed{P_{ij}\psi=+\psi} \tag{6}$$

$$\boxed{P_{ij}\psi=-\psi} \tag{7}$$

凡满足(6)式的，称为对称波函数，凡满足(7)式的，称为反对称波函数。所以：全同粒子系的交换对称性给了波函数一个很强的限制，即要求它们对于任意两个粒子交换，或者对称，或者反对称。

可以证明：全同粒子体系波函数的对称性不随时间改变（见周世勋书P_{219}），即：描写全同粒子体系状态的波函数只能是对称的或只能是反对称的，它们的对称性不随时间的变化而改变。如果体系在某一时刻处于对称的态，则它将永远处于对称的态上。

如果某种粒子所组成的体系的波函数，对于粒子的交换是对称的，就称这种粒子为玻色子。在统计物理中，它们服从玻色——爱因斯坦分布。

如果某种粒子所组成的体系的波函数，对于粒子的交换是反对称的，就称这种粒子为费米子。在统计物理中，它们服从费米——狄拉克分布。

实验表明：自旋为整数或零的粒子，如光子、π介子等，都是玻色子。

自旋为半整数的粒子，如电子、质子、中子等，都是费米子。

二. 波函数的对称化和反对称化

从上面的讨论，我们知道：根据全同性原理的要求：

对于玻色子系统，任意交换两个粒子后，体系的总的波函数必须是对称的，即：$\boxed{P_{ij}\psi = \psi}$。

对于费米子系统，任意交换两个粒子后，体系的总的波函数必须是反对称的，即$\boxed{P_{ij}\psi = -\psi}$。

下面将讨论，在忽略粒子间相互作用情况下，如何给出全同粒子体系的波函数。为了简单，主要讨论两个粒子组成的体系。

设有两个全同粒子（忽略它们的相互作用），则体系的哈密顿算符为

$$\hat{H}=\hat{h}(q_1)+\hat{h}(q_2) \qquad \textbf{(1)}$$

其中$\hat{h}(q)$表示单粒子的哈密顿算符。由于是全同粒子，所以$\hat{h}(q_1)$和$\hat{h}(q_2)$在形式上是完全相同的。它们的本征方程为

$$\hat{h}(q_1)\varphi_i(q_1)=\varepsilon_i\varphi_i(q_1) \qquad \textbf{(2)}$$

$$\hat{h}(q_2)\varphi_j(q_2)=\varepsilon_j\varphi_j(q_2) \qquad \textbf{(3)}$$

其中i,j表示两个量子态。

设体系的本征方程为

$$\boxed{\hat{H}\psi(q_1,q_2)=E\psi(q_1,q_2)} \tag{4}$$

将(1)代入(4)式，并利用(2)，(3)式，不难得到：

$$\boxed{E=\varepsilon_i+\varepsilon_j} \tag{5}$$

$$\psi(q_1,q_2)=\varphi_i(q_1)\varphi_j(q_2) \tag{6}$$

一般地，体系的总函数(6)式，当任意交换两个粒子时，不具有一定的对称性，即不满足全同性原理的要求。

于是，人们为了得到满足全同性原理要求的波函数，需要将(6)式对称化（对于玻色子），或反对称化（对于费米子）。

下面分别讨论。

1. 对于 Bose 子，要求波函数具有对称性

(a). 当 $i \neq j$ 时，对称波函数可如下构成

$$\boxed{\psi(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_i(q_1)\varphi_j(q_2) + \varphi_i(q_2)\varphi_j(q_1)]} \quad (7)$$

其中 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ 是归一化因子。

此时，波函数(7)式既满足(4)、(5)式，又具有交换对称性：

$$P_{ij}\psi = \psi$$

(b). 当 $i = j = k$ 时，归一化的对称波函数为

$$\boxed{\psi(q_1, q_2) = \varphi_k(q_1)\varphi_k(q_2)} \quad (8)$$

Satyendra Nath Bose was an Indian physicist, specializing in mathematical physics.
He is best known for his work on quantum mechanics in the early 1920s, providing the foundation for Bose-Einstein statistics and the theory of the Bose-Einstein condensate.
He is honored as the namesake of the boson.

Satyendra Nath Bose, 1894-1974, India

2. 对于 Fermi 子，要求波函数具有反对称性

反对称波函数可如下构成：

$$\psi(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_i(q_1)\varphi_j(q_2)-\varphi_i(q_2)\varphi_j(q_1)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\varphi_i(q_1) & \varphi_i(q_2)\\ \varphi_j(q_1) & \varphi_j(q_2)\end{vmatrix} \qquad (9)$$

此时，波函数(9)式既满足(4)、(5)式，又具有交换反对称性：

$$P_{ij}\psi=-\psi\ 。$$

由(9)式还可以发现：若$i=j$，即两个费米子同时处于同一个量子态，则有$\psi(q_1,q_2)\equiv 0$，即这样的状态是不存在的。这就是著名的 **Pauli** 不相容原理：不可能有两个全同的 **Fermi** 子处于同一个量子态。

因此，**Pauli** 不相容原理是全同性原理的一个推论。

对于 **Fermi** 子，我们可以将(9)式推广到 **N** 个 **Fermi** 子组成的系统，系统的反对称波函数可以写成 **N** 阶行列式：

$$\psi(q_1,q_2,\ldots\ldots q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\varphi_i(q_1) & \varphi_i(q_2) & \cdots & \varphi_i(q_N)\\ \varphi_j(q_1) & \varphi_j(q_2) & \cdots & \varphi_j(q_N)\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \varphi_k(q_1) & \varphi_k(q_2) & \cdots & \varphi_k(q_N)\end{vmatrix} \quad \textbf{(10)}$$

The Nobel Prize in Physics 1938

"for his demonstrations of the existence of new radioactive elements produced by neutron irradiation, and for his related discovery of nuclear reactions brought about by slow neutrons"

Enrico Fermi, 1901-1954, Italy