关于高量空间对称性和守恒定律

§19-2 空间对称变换

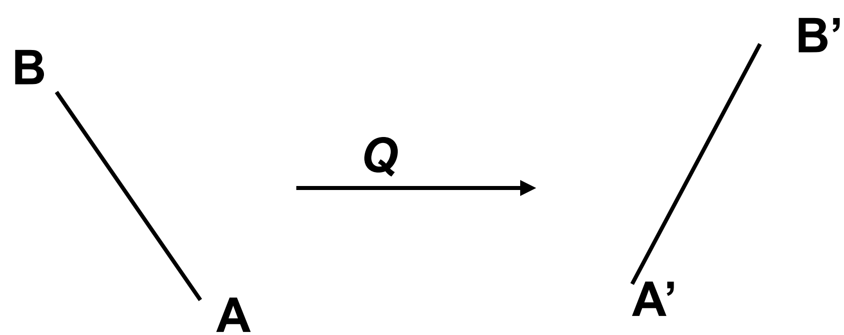
一、位置变换

设变换 Q是三维位形空间的算符，它将点 $\mathbf{r}$ 变为另一点 $\mathbf{r}'$

$$\mathbf{r}' = Q\mathbf{r} \qquad (19.1)$$

对每一个$\mathbf{r}, \mathbf{r}'$都有确定值。

变换 Q 是不改变任何两点距离的那些变换：



对称变换群：对某些物理系统，若位置变换的一个集合 $\{Q_i\}(i=1,2,3,\cdots)$是此系统的对称变换，即保持这个系统不变的变换，则这个集合必构成一个群，称为这个系统的对称变换群。

满足群的四个条件：

1．单位元存在： $1\cdot\vec{r}=\vec{r}$ $\qquad Q=1$

2．结合律成立： $Q_1(Q_2Q_3)=(Q_1Q_2)Q_3$

3．封闭性： $Q=Q_1Q_2$

4．逆元存在： $\vec{r}'=Q\vec{r}\Rightarrow\vec{r}=Q'\vec{r}',\ Q'=Q^{-1}$

二、态函数的变换

态函数 $\psi(\mathbf{r})=\langle\mathbf{r}|\psi\rangle$ 用算符 Q 作一个整体的变换。

整体变换：新函数在新点处的值等于老函数在老点上的值，即

$$\psi'(r')=\psi(r) \qquad \psi'(Q\mathbf{r})=\psi(\mathbf{r}) \qquad \psi'(\mathbf{r})=\psi(Q^{-1}\mathbf{r}) \tag{19.3}$$

新老函数的关系用一个函数空间的变换算符 $\hat{D}(Q)$ 表示：

$$\psi'(\mathbf{r})=\hat{D}(Q)\psi(\mathbf{r})=\psi(Q^{-1}\mathbf{r}) \tag{19.4}$$

变换不影响其归一化，$\hat{D}(Q)$是幺正算符：

$$\hat{D}^{+}(Q)\hat{D}(Q)=\hat{D}(Q)\hat{D}^{+}(Q)=1$$

考虑连续两次变换：（Q 只对 **r**作用）

$$\hat{D}(Q_1)\hat{D}(Q_2)\psi(\mathbf{r}) = \hat{D}(Q_1)\psi(Q_2^{-1}\mathbf{r}) = \psi[Q_2^{-1}(Q_1^{-1}\mathbf{r})]$$

$$= \psi[(Q_2^{-1}Q_1^{-1})\mathbf{r}] = \psi[(Q_1Q_2)^{-1}\mathbf{r}] = \hat{D}(Q_1Q_2)\psi(\mathbf{r})$$

得 $$\hat{D}(Q_1)\hat{D}Q_2) = \hat{D}(Q_1Q_2) \qquad \textbf{(19.5)}$$

$\{\hat{D}(Q)\}$构成一个群。

▲群 $\{\hat{D}(Q)\}$与群 $\{Q\}$是什么关系呢？

由于 $$\hat{D}(Q)\hat{D}(Q^{-1}) = \hat{D}(QQ^{-1}) = \hat{D}(1) = 1$$

所以 $$\hat{D}^{-1}(Q) = \hat{D}(Q^{-1}) \qquad \textbf{(19.6)}$$

同态，即 $Q \to \hat{D}(Q)$

三、态矢量的变换

在Hilbert空间中，状态 $|\psi\rangle$ 经过变换 Q 之后成为新态，则可定出一个幺正变换算符 ：$D(Q)$

$$\left|\psi'\right\rangle = D(Q)\left|\psi\right\rangle \qquad (19.7)$$

由于 $\psi(\mathbf{r}) = \left\langle \mathbf{r} \middle| \psi \right\rangle$ $\quad \psi'(\mathbf{r}) = \left\langle \mathbf{r} \middle| \psi' \right\rangle$ $\quad \psi'(\mathbf{r}) = \hat{D}(Q)\psi(\mathbf{r}) = \psi(Q^{-1}\mathbf{r})$

可得

$$\psi'(\mathbf{r}) = \left\langle \mathbf{r} \middle| \psi' \right\rangle = \hat{D}(Q)\left\langle \mathbf{r} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle Q^{-1}\mathbf{r} \middle| \psi \right\rangle$$

即

$$\left\langle \mathbf{r} \middle| D(Q) \middle| \psi \right\rangle = \hat{D}(Q)\left\langle \mathbf{r} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle Q^{-1}\mathbf{r} \middle| \psi \right\rangle$$

所以

$$\left\langle \mathbf{r} \right| D(Q) = \left\langle Q^{-1}\mathbf{r} \right| \qquad (19.8)$$

$$\left\langle \mathbf{r} \right| D(Q) = \hat{D}(Q)\left\langle \mathbf{r} \right| \qquad (19.9)$$

(19.8)：Hilbert空间中*D*(*Q*)的定义式。

(19.9)： $D(Q)$**与** $\hat{D}(Q)$ **的形式关系。**

右矢形式： $D^{+}(Q)\left|\mathbf{r}\right\rangle = D^{-1}(Q)\left|\mathbf{r}\right\rangle = \left|Q^{-1}\mathbf{r}\right\rangle$

两边乘 $D(Q)$ ，有 $\left|\mathbf{r}\right\rangle = D(Q)\left|Q^{-1}\mathbf{r}\right\rangle$

令 $\mathbf{r} \to Q\mathbf{r}$ ，得 $\left|Q\mathbf{r}\right\rangle = D(Q)\left|\mathbf{r}\right\rangle$

即 $$D(Q)\left|\mathbf{r}\right\rangle = \left|Q\mathbf{r}\right\rangle$$

四、算符的变换

设对称变换前， $|\varphi\rangle = A|\psi\rangle$

现在分别对 $|\varphi\rangle$，$|\psi\rangle$ 作对称变换 $\boldsymbol{Q}$，即

$$|\varphi'\rangle = D(Q)|\varphi\rangle, \qquad |\psi'\rangle = D(Q)|\psi\rangle$$

$$|\varphi'\rangle = A'|\psi'\rangle$$

则 $$A' = D(Q)AD^{-1}(Q)$$

对位置算符**R**，其本征值方程为 $\mathbf{R}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$

用$D(Q)$作用，得 $D(Q)\mathbf{R}D^{-1}(Q)D(Q)|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}D(Q)|\mathbf{r}\rangle$

所以 $\mathbf{R}'|Q\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|Q\mathbf{r}\rangle$ （19.13）

用Q^{-1}作用在等式 $\mathbf{R}|Q\mathbf{r}\rangle = Q\mathbf{r}|Q\mathbf{r}\rangle$

（本征值为Q**r**的**R**的本征方程）

有 $Q^{-1}\mathbf{R}|Q\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|Q\mathbf{r}\rangle$ （19.14）

因为$|Q\mathbf{r}\rangle$为任意矢量，所以比较（19.13）和（19.14），

得 $\mathbf{R}' = Q^{-1}\mathbf{R} = D(Q)\mathbf{R}D^{-1}(Q)$

$$\mathbf{R}' = Q^{-1}\mathbf{R} = D(Q)\mathbf{R}D^{-1}(Q)$$

R 的双重身份： $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} R_i \mathbf{e}_i$

- **Hilbert空间中的算符，** $D(Q)$只对 R_i作用
- **位形空间中的矢量，** Q^{-1}只对 $\mathbf{e_i}$作用。

§ 19-3 空间反演

一、空间反演算符

空间反演变换 P 的定义是： $P\mathbf{r}=-\mathbf{r}$

空间反演算符 P 是： $D(P)|\mathbf{r}\rangle=|-\mathbf{r}\rangle$

通常： $D(P)\to P$ ， $P|\mathbf{r}\rangle=|-\mathbf{r}\rangle$

空间反演群 $\{1,P\}$： $PP=1,\ \ P^{-1}=P$， $1P=P1=P$

函数空间的空间反演算符 $\hat{P}$：

根据19.4式： $\hat{D}(Q)\psi(\mathbf{r})=\psi(Q^{-1}\mathbf{r})$ 和 $P^{-1}=P$

$$\hat{P}\psi(r)=\psi(-r),\quad \hat{P}^2=1$$

因为 $\hat{P}^2=1$，所以 $\hat{P}$ 的本征值为 ± 1：

$$\hat{P}\psi(r)=\psi(-r)=\begin{cases}\psi(r) & \text{偶宇称}\\ -\psi(r) & \text{奇宇称}\\ \text{其他情况} & \text{无确切宇称}\end{cases}$$

空间反演算符既是幺正算符 $P^{+}=P^{-1}$

又是厄米算符 $P^{+}=P$

$$P^{+}=P^{-1}=P$$

与 $P|\mathbf{r}\rangle=|-\mathbf{r}\rangle$ 相应的左矢形式为：

$$\langle r|P^{+}=\langle r|P=\langle -r|=\hat{P}\langle r|$$

二、算符在空间反演下的变换

1．位置算符R

在Hilbert空间中：

$$P\mathbf{R}P|\mathbf{r}\rangle = P\mathbf{R}|-\mathbf{r}\rangle = P(-\mathbf{r})|-\mathbf{r}\rangle = (-\mathbf{r})P|-\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{R}|\mathbf{r}\rangle$$

所以 $$P\mathbf{R}P = -\mathbf{R} \qquad （19.23）$$

在函数空间中：

$$\hat{P}\hat{\mathbf{R}}\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \hat{P}\hat{\mathbf{R}}\psi(-\mathbf{r}) = \hat{P}[\mathbf{r}\psi(-\mathbf{r})] = (-\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = -\hat{R}\psi(\mathbf{r})$$

所以 $$\hat{P}\hat{\mathbf{R}}\hat{P} = -\hat{\mathbf{R}} \qquad （19.24）$$

2．动量算符P

由于 $$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}} = \langle -\mathbf{r} | -\mathbf{p} \rangle$$

则 $$P|\mathbf{p}\rangle = P\sum |\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \sum |-\mathbf{r}\rangle\langle -\mathbf{r}|-\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$$

（19.25）

所以

$$P\mathbf{P}P|\mathbf{p}\rangle = P\mathbf{P}|-\mathbf{p}\rangle = P(-\mathbf{p})|-\mathbf{p}\rangle = -\mathbf{p}P|-\mathbf{p}\rangle = -\mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle = -\mathbf{P}|\mathbf{p}\rangle$$

$$P\mathbf{P}P = -\mathbf{P}$$ （19.26）

3．轨道角动量算符L

$$\mathcal{P}\mathbf{L}\mathcal{P} = (\mathcal{P}\mathbf{R}\mathcal{P}) \times (\mathcal{P}\mathbf{P}\mathcal{P}) = (-\mathbf{R}) \times (-\mathbf{P}) = \mathbf{L}$$

$$\mathcal{P}\mathbf{L}\mathcal{P} = \mathbf{L}$$

所以： $\mathcal{P}\mathbf{L}\mathcal{P}\mathcal{P} = \mathcal{P}\mathbf{L} = \mathbf{L}\mathcal{P}$ （19.27）

即$\mathcal{P}$与L对易

共同的本征函数是球谐函数

矢量算符：在空间反演下改变符号，如R,P

轴矢量（赝矢量）算符：

在空间反演下不变，如角动量算符L

并规定自旋算符是轴矢量算符。

真标量：在空间反演下不改变符号

赝标量：在空间反演下改变符号