Day 4. Symmetry in Quantum Mechanics

→ 对称性、守恒律与简并

先回顾经典物理中的对称。若 $q_i \to q_i + \delta q_i$ 下系统的拉氏量保持不变，那么我们称系统对于 q_i 有对称性。从而~~根据~~E-L方程，$\frac{dp_i}{dt}=0$

对于哈密顿力学也一样，若 $q_i \to q_i+\delta q_i$，H 不变，则 $\frac{dp_i}{dt}=0$

下面看QM中对称性，我们之前考虑的各种对称变换都可以写成这个形式：$S = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}G$。$G$ 是厄米的。我们称 H 在 S 下保持不变，可以看作（Sch 表象下），对态矢变换后，期望不变

$\Rightarrow \langle\alpha|S^\dagger H S|\alpha\rangle = \langle\alpha|H|\alpha\rangle \Rightarrow S^\dagger H S = H$。这意味着 $[G,H]=0 \Rightarrow \frac{dG}{dt}=0$。从而QM和CM中一样。$\begin{cases} CM: [G,H]=0 \Rightarrow H \text{在} G \text{诱导的正则变换下不变，则} \frac{dG}{dt}=0 \\ QM: H \text{在} G \text{诱导的变换} S \text{下保持不变} \Rightarrow \frac{dG}{dt}=0 \end{cases}$

或者从另一个视角看。设 t_0 时刻系统位于 G 的某个本征态上，$G|g'(t_0;t)\rangle = G\,U(t,t_0)|g'\rangle = g'\left(U(t,t_0)|g'\rangle\right)$

下面讨论简并。设对于某个对称算符有 $[H,S]=0$。$|n\rangle$ 为对应 E_n 的 H 本征态，则 $S|n\rangle$ 自然也为 H 本征态。那么 $S|n\rangle$ 与 $|n\rangle$ 为具有 E_n 的两个不同的态，我们称它们是简并的

S 一般是一系列被入参数化的算符，因此 $S(\lambda)|n\rangle$ 这些态全简并。特别地考虑 H 对转动不变的情形，$[D(R),H]=0 \Rightarrow [J_i,H]=0$，$[J^2,H]=0$。

由于 $D(R)$，H 对易，从而所有 $D(R)|n,j,m\rangle$ 都简并。前面我们知道，$D(R)|n,j,m\rangle = \sum_{m'}|n,j,m'\rangle D^{(j)}_{m'm}(R)$。所以，所有不同 m 对应的 $|n,j,m\rangle$ 必然有相同的能量。

从而 $|n,j,m\rangle$ 这样的简并度为 $(2j+1)$。若在系统中有外场作用，则这种对称性不存在，各个 m 对应的能量将不一样，从而"精细能级"得出来。

一个典型的展示QM中对称性的问题是库伦势中的 H 原子。在经典力学中，除去守恒（系统参数不会变）、L 守恒（系统有SO(3)对称性）外，还有一个指向椭圆半长轴方向的守恒矢量，

所谓 L-R-L Vector，$\vec{M} = \frac{\vec{p}\times\vec{L}}{m} - \frac{Ze^2}{r}\vec{r}$。这种对称性称为SO(4)对称性，下面找QM对应，对LRL正则量子化。由于我们有 $(\hat{A}\times\hat{B})^\dagger = -(\hat{B}\times\hat{A})$，

所以我们对LRL做如下正则化：$M_i = \frac{1}{2m}(\hat{p}\times\hat{L} - \hat{L}\times\hat{p}) - \frac{Ze^2}{r}\hat{r}$。算符可以：$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$ 有 $[M,H]=0$。一个证明是借助Heisenberg Eq.

$\underline{M = M_1 + M_2}$ $\quad \frac{dM_1}{dt} = \frac{1}{2m}\left[\frac{dp}{dt}\times L - L\times\frac{dp}{dt}\right]$。继续利用Heisenberg方程，$\frac{dp_i}{dt} = \frac{i}{\hbar}[p_i,H] = \frac{i}{\hbar}[p_i,V] = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = -\frac{Ze^2}{r^2}\hat{n}_i$

$\Rightarrow \frac{dM_1}{dt} = -\frac{Ze^2}{2mr^2}\left[\hat{n}\times\hat{L} - \hat{L}\times\hat{n}\right]$ 　另一边：$\frac{d}{dt}\left(\frac{\hat{r}}{r}\right) = \frac{1}{r}\frac{d\hat{r}}{dt} - \frac{\hat{r}}{r^2}\cdot\frac{dr}{dt}$

$$\begin{cases} \frac{d\hat{r}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m} \\ \frac{dr}{dt} = \sum_i \frac{dr}{dr_i}\frac{dr_i}{dt} = \frac{1}{r}\hat{r}\cdot\frac{d\hat{r}}{dt} = \frac{1}{r}\hat{r}\cdot\frac{\hat{p}}{m} \end{cases} \Rightarrow \frac{dM_2}{dt} = -\frac{Ze^2}{m}\left(\frac{\hat{p}}{r} - \frac{\hat{r}}{r^3}(\hat{r}\cdot\hat{p})\right)$$

使用矢量三重积，$\vec{r}\times\vec{L} = \vec{r}\times(\vec{r}\times\vec{p}) = (\vec{r}\cdot\vec{p})\vec{r} - r^2\vec{p}$，代入后得到有 $\frac{d(M_1+M_2)}{dt} = 0$，

还可以模仿经典情况中，证明以下关系：$\vec{L}\cdot\vec{M} = \vec{M}\cdot\vec{L} = 0$ $\quad M^2 = \frac{2}{m}H\left(L^2+\hbar^2\right) + Z^2e^4$.

可以计算其他的对易子：$[M_i, L_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}M_k$ $\quad [M_i, M_j] = -i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\frac{2}{m}H L_k$。再结合 $[L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk}L_k$，可以看到，这三个对易子并不对 L_i，M_i 封闭。

然而，我们可以将 H 的本征态上考虑问题，此时有 $N = \left(-\frac{m}{2E}\right)^{1/2}M$，$E<0$ $\quad [L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk}L_k$。$\quad [N_i, L_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}N_k$。$\quad [N_i, N_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}L_k$

H 一定在 $\vec{N}$、$\vec{L}$ 生成的某个对称变换下保持不变，则这个变换是什么。实际上是4D空间中的旋转。首先，我们有6个生成元，而对于旋转来说，描述是"选定两轴构成一平面，绕此平面旋转"，

或者可以说"旋转"是可以用 n 维反对称矩阵（2-形式）表示，所以它有 $\frac{1}{2}n(n-1)$ 个自由度。

所以如何构造"守恒的生成元"？ 注：我们有在(1,2)平面内旋转 $L_3 := \overline{L_{12}} = x_1p_2 - x_2p_1$. $L_1 = \overline{L_{23}}$. $L_2 = \overline{L_{31}}$

$$\begin{cases} \overline{L_{14}} = x_1p_4 - x_4p_1 = N_1 \\ \overline{L_{24}} = x_2p_4 - x_4p_2 = N_2 \\ \overline{L_{34}} = x_3p_4 - x_4p_3 = N_3 \end{cases}$$

容易证明，上面新定义的 N_1, N_2, N_3 符合 $\{\vec{L}, \vec{A}\}$ 的代数. 从而我们说它带来了额外的对称性.

从 L、N 中，我们可以另外构造两组角动量：$\vec{I} = (\vec{L}+\vec{N})/2$. $\vec{K} = (\vec{L}-\vec{N})/2$. 它们各自满足角动量对易关系. $[I_i, I_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}I_k$. $[K_i, K_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}K_k$.

并且 $[I_i, K_j] = 0$. 显然 $\vec{I}$、$\vec{K}$ 均守恒. 由于 $I^2 - K^2 = L\cdot N = 0$. 以 $i(i+1)\hbar$，$k(k+1)\hbar$ 代表 I^2、K^2 的本征值. 则 $(I^2-K^2)|i,k\rangle = 0 \Rightarrow i = k$.

利用 $I^2+K^2 = \frac{1}{2}(L^2+N^2) = \frac{1}{2}(L^2 - \frac{m}{2E}M^2) = \frac{1}{2}(-\hbar^2 - \frac{m}{2E}Z^2e^4)$. 左右分别作用在 $|i,k\rangle$ 态上，有：$2k(k+1)\hbar^2 = \frac{1}{2}(-\hbar^2 - \frac{m}{2E}Z^2e^4)$. 从中可解E. 这是一个给出H原子能级的方式.

主量子数 $n \to (2k+1)$. 从而，在H原子中，简并度为 $(2l+1)\cdot(2k+1) = (2k+1)^2 = n^2$. 这和我们之前的推导如出一辙. 注：我们由截断假设得到主量子数 $n := (N+l+1)$.

$|n,l,m\rangle$ 的简并仅与n有关. 从而 Degeneracy $= \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$.

附注. n维中旋转算符的一般形式为：$R = \exp(i\sum_{q=1}^{n(n-1)/2}\phi^q T^q)$. 其中 ϕ^q 为转角，T^q 为生成元. 生成元之间对易关系：$[T^p, T^q] = i\sum_r f_r^{pq}T^r$. f_r^{pq} 称为结构常数. 三维中 $f_r^{pq} = \varepsilon_{pqr}$.

→ 离散对称性、宇称 parity

在上面，我们考虑了用一个参数描写的连续对称变换. 现在考虑一些离散的操作. 第一个操作为空间反演/宇称. 它将右手系换到左手系. (实际上把x、y、z的方向全部反转，或3互换).

"宇称不守恒"是很重要的发现. 我们还可以用它研究系统. 定义一个算符 π. 以 $\pi|\alpha\rangle$ 表示宇称变换后的态. 由于该"宇称"是把所有坐标反向. 所以"宇称算符"应有效果：$\langle\alpha|\pi^\dagger x\pi|\alpha\rangle = -x$.

$\Rightarrow \pi^\dagger x\pi = -x$. $(x\pi = -\pi x)$ 在宇称算符下，x算符变号. 坐标本征态：$\pi|x'\rangle = \exp(i\delta)|-x'\rangle$. $\Rightarrow \langle x'|\pi^\dagger = \exp(-i\delta)\langle -x'|$. 从而 $\exp(i\delta)\exp(-i\delta)\langle -x'|x|-x'\rangle = -\langle x'|x|x'\rangle$

若 $|\alpha\rangle$ 为多个 $|x'\rangle$ 的组合，而无需验证，方便起见，由 δ 任意性，令 $\pi|x'\rangle = |-x'\rangle$ 最简单. $\Rightarrow \pi^2|x'\rangle = |x'\rangle$ 从而 π 既厄米，又幺正.

平移 dx 相当于宇称后平移 $-dx$. 从而 $\pi(T(dx')|x'\rangle) = \pi|x'+dx'\rangle = |-x'-dx'\rangle = T(-dx')|-x'\rangle = T(-dx')\pi|x'\rangle \Rightarrow \pi T(dx) = T(-dx')\pi$.

从而可得到 π 对动量算符的作用. $\pi(1 - \frac{ip\cdot dx}{\hbar})\pi^\dagger = 1 + \frac{ip\cdot dx}{\hbar} \Rightarrow \pi^\dagger p\pi = -p$. 对于x、p这种在宇称变换下变号的量，我们称其为有"奇宇称".

对于轨道角动量. $L_i = \varepsilon_{ijk}x_jp_k$. $\pi^\dagger\varepsilon_{ijk}x_jp_k\pi = -\pi^\dagger\varepsilon_{ijk}x_j\pi p_k = -\varepsilon_{ijk}\pi^\dagger x_j\pi p_k = \varepsilon_{ijk}x_jp_k \Rightarrow \pi^\dagger L\pi = L$. 从而称L这样的有"偶宇称".

对于角动量(转动生成元). 显然，把一个矢量先转再反向与先反向再转角度相同. 从而 $\pi D(R) = D(R)\pi$. $\Rightarrow [\pi, J] = 0$，$\pi^\dagger J\pi = J$. 从而所有角动量都有偶宇称.

我们称在宇称变换下变向的矢量为极矢量，反之则为轴矢量（赝矢量）. 对于 $S\cdot x$ 这样在宇称变换下变号的标量，称之为赝标量.

下面研究波函数在宇称下的行为. 对于宇称算符，$\langle x'|\pi|\alpha\rangle = \langle -x'|\alpha\rangle = \psi(-x')$. 若 $|\alpha\rangle$ 为 π 的本征态，则有 $\pi|\alpha\rangle = \pm|\alpha\rangle \Rightarrow \langle -x'|\alpha\rangle = \pm\langle x'|\alpha\rangle$.

从而一个宇称本征态的奇/偶宇称，与 $\psi(x')$ 的奇偶性有关. ⚠ 一个算符的奇/偶宇称不代表对 π 的本征态. 例如 $\{p, \pi\} = 0$. 从而p本征态不是 π 本征态. 所以说本征态 $|p\rangle$ 无宇称.

e.g. $[L, \pi] = 0$. 从而L的本征态是 π 的本征态. 考虑 $\langle x'|\alpha, lm\rangle = R_\alpha(r)Y_l^m(\theta,\phi)$. 反演在球坐标中带来的效果是：$r \to r$，$\theta \to \pi-\theta$，$\phi \to \phi+\pi$. 利用球谐函数的表达式，可知 $Y_l^m \to (-1)^l Y_l^m$.

从而 l 为奇的态有奇宇称，否则反之. 下面考虑 E 本征态的宇称.

设 $[H, \pi] = 0$，或H在宇称下不变. 且 $|n\rangle$ 为对应于 E_n 的非简并本征态. 则 $|n\rangle$ 为宇称本征态.

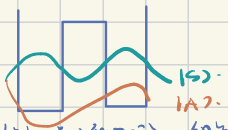
Pf. 注意到. $\pi\cdot\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle = \frac{1}{2}(\pi\pm1)|n\rangle$ 从而 $\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$ 为 π 本征矢 且 $\frac{1}{2}H(1+\pi)|n\rangle = \frac{1}{2}(1+\pi)H|n\rangle = \frac{1}{2}(1+\pi)E_n|n\rangle$.

从而 $|n\rangle$ 与 $\frac{1}{2}(1\pm\pi)|n\rangle$ 必表示同一态. 故定其宇称.

e.g. 谐振子. 基态波函数为高斯波包 有偶宇称. $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$ 必有奇宇称. 因为 $a^\dagger$ 为 x, p 线性组合. $|2\rangle$ 有偶宇称…

非退化这一条件也是重要的. 反例可考虑 H 原子或动量本征态.

e.g. 双势阱. 设粒子总有 $[H,\pi]=0$ 有两种态: $|S\rangle$ 与 $|A\rangle$ (都是能量本征矢, $E_A>E_S$). $|S\rangle$ 与 $|A\rangle$ 均为 π 本征态, 可构造 $\begin{cases}|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle+|A\rangle) \\ |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle-|A\rangle)\end{cases}$



称它们为 $|R\rangle$ 与 $|L\rangle$ 是因为 $|R\rangle$ 态波函数"集中"在右侧. 否则反之. 显然 $|R\rangle$ $|L\rangle$ 均并非 π 本征矢.

设系统初态为 $|R\rangle$. 则 $|R; t_0=0, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\exp(-iE_St/\hbar)\left(|S\rangle + \exp(-i\frac{E_A-E_S}{\hbar}t)|A\rangle\right)$. 从而系统在 $|R\rangle$, $|L\rangle$ 间以 ω, $\omega = \frac{E_A-E_S}{\hbar}$ 振荡.

这即是所谓"隧穿效应". 若两个 well 之间 barrier 非常高. 此时可认为 $E_S \sim E_A$. 从而 $|S\rangle$, $|A\rangle$ 简并了. $|R\rangle$, $|L\rangle$ 是 H 本征态而非 π 本征态.

这使得能量守恒对称, 但能量本征态可以不对称. 这称为"对称性破缺"— 系统可以停留在 $|A\rangle$ 态不变.

这在后面所谓"宇称选择规则". 设 $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ 为宇称本征矢. $\pi|\alpha\rangle=\varepsilon_\alpha|\alpha\rangle$, $\pi|\beta\rangle=\varepsilon_\beta|\beta\rangle$. 一个有奇宇称的算符 x. 除非 $\varepsilon_\beta=-\varepsilon_\alpha$, 否则有 $\langle\beta|x|\alpha\rangle=0$.

Pf: $\langle\beta|x|\alpha\rangle = \langle\beta|\pi^{-1}\cdot\pi\cdot x\cdot\pi^{-1}\cdot\pi|\alpha\rangle = \langle\beta|\pi^\dagger\pi x\pi^\dagger\pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta(-\langle\beta|x|\alpha\rangle)$. 也可以在其中插入完备性关系:

$\int\langle\beta|x'\rangle\langle x'|x|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle dx'dx'' = \int\psi_\beta^*(x')\,x'\,\psi_\alpha(x')dx' = 0$. 除非 $\beta\neq\alpha$. 对于所有偶/奇宇称算符都可推广.

科普: 在弱相互作用中可能有 $[H,\pi]\neq0$. 这使得某些衰变过程中宇称不守恒.

→ 晶格平移 / Lattice Translation.

在固体物理中. 常有周期性势能 $V(x+a)=V(x)$. 此时 H 不与任意 $T(l)$ 对易, 只与 $T(a)$ 对易. 考虑一般情况之前, 可以看 well 有无限深的情形. 显然 这里的基态应为粒子完全处于某一阱中.

我们将粒子位于第 n 个阱中的态记为 $|n\rangle$ 则 $H|n\rangle=E_0|n\rangle$. $T(a)|n\rangle=|n+1\rangle$. 若我们将前面谈中的 π 推广为这一相似的算符. 这里的结果不符合. $|n\rangle$ 并非 $T(a)$ 本征态. 因为简并.

考虑粒子处于所有阱中的态: $|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\exp(in\theta)|n\rangle$ 它是 H 本征矢. $T(a)|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\exp(in\theta)|n+1\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\exp(i(n-1)\theta)|n\rangle = \exp(-i\theta)|\theta\rangle$.

考虑阱并非无穷深. 之前有 $\langle n'|H|n\rangle=0$. 而现在采用"紧束缚"假设: $\langle n\pm1|H|n\rangle=-\Delta$ (从而此时 $|n\rangle$ 已并非 H 本征态). 此时 $H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle$

同样能通过线性组合得到"θ态". $|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\exp(in\theta)|n\rangle$

$$H\sum\exp(in\theta)|n\rangle = E_0\sum\exp(in\theta)|n\rangle - \Delta\sum\exp(in\theta)|n+1\rangle - \Delta\sum\exp(in\theta)|n-1\rangle$$

$$= E_0\sum\exp(in\theta)|n\rangle - \Delta\sum[\exp(in\theta-i\theta)+\exp(in\theta+i\theta)]|n\rangle = (E_0-2\Delta\cos\theta)\sum\exp(in\theta)|n\rangle$$ 从而该态能级与 θ 有关系. 随 θ↑. 能级分开

为了得知 θ 的意义. 计算一下波函数 $\langle x'|\theta\rangle$. $\langle x'|T(a)|\theta\rangle = \langle x'-a|\theta\rangle = \exp(-i\theta)\langle x'|\theta\rangle$. 猜此方程的解为: $\langle x'|\theta\rangle = \exp(ikx')\,u_k(x')$, $\theta=ka$ ⇒ θ 为波矢.

从而 $\exp(ik(x'-a))\,u_k(x'-a) = \exp(ikx')\,u_k(x')\exp(-ika)$ 从而 $u_k(x')$ 必为周期函数. 我们将系统能量允许区域 $(E_0-2\Delta, E_0+2\Delta)$ 称为"布里渊区".

→ 时间反演对称性.

先看 CM 和 EM. 在 CM 中, 单粒子运动方程为 $m\ddot{x} = -V(x)$. 若 $x(t)$ 为其解, 则 $x(-t)$ 也是.

在 EM 中, 考虑带电粒子在磁场中的运动, 设磁场由稳恒电荷, 稳恒电流产生. 时间反演后, 稳恒电流反向所以磁场反演. $E \to E$. $B \to -B$. $v \to -v$. 从而 $F \to F$.

$x(t)$ 与 $x(-t)$ 都为 $m\frac{d^2x}{dt^2} = F_e$ 之解, 所以粒子可走相反的运动.

对于单粒子 Schr 方程: $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi$. 若 $\psi(x,t)$ 为解, 则 $\psi(x,-t)$ 并非解. 对方程两边取复共轭后 $\psi^*(x,-t)$ 为解.

在讨论时间反演之前, 我们回顾下关于对称性的一些事情. 考虑对两态做某种对称变换, $|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle$, $|\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle$. 则 $\langle\beta|\alpha\rangle \to \langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle \to \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$.

我们刚发现时间反演与复共轭有关, 所以在下面讨论中我们放松要求, 允许 $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$ 的出现. 若 $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$, $\Theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\Theta|\alpha\rangle + c_2^*\Theta|\beta\rangle$, 我们称之为反幺正.

任一反幺正算符可做分解: $\Theta = UK$, 其中 U 幺正, 而 K 称为复共轭算符. K 的定义为 $K\left(\sum_i c_i|e_i\rangle\right) = \sum_i c_i^*|e_i\rangle$. 易验证 Θ 的反线性性及保持内积.

验证内积性质: $|\alpha\rangle \xrightarrow{\Theta} |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* UK|a'\rangle = \sum_{a'} \langle\alpha|a'\rangle U|a'\rangle$ $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a''}\sum_{a'} \langle a''|\beta\rangle\langle a''|U^\dagger U|a'\rangle\langle\alpha|a'\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$.

$|\tilde{\beta}\rangle = \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle^* U|a'\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle\tilde{\beta}| = \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle\langle a'|U^\dagger$.

设定义时间反演算符 Θ. $|\alpha\rangle \to \Theta|\alpha\rangle$, 时间反演态. 或者说 Θ 应起到"运动反转"的效果, 如 $\Theta|p'\rangle \to |-p'\rangle$. 考虑系统初态位于 $|\alpha\rangle$, 从 δt 后位于 $|\alpha, \delta t\rangle = \left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right)|\alpha\rangle$.

$\left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right)\Theta|\alpha\rangle = \Theta\left(\left(1 + \frac{iH}{\hbar}\delta t\right)\right)|\alpha\rangle$ 或 $-iH\Theta|\ \rangle = \Theta iH|\ \rangle$. 设假设 Θ 可以为幺正的, 那则有 $-H\Theta = \Theta H$. 从而对应 E_n 的 $|n\rangle$ 反转后的 $\Theta|n\rangle$ 对应 $-E_n$!

从而必有 $-iH\Theta|\ \rangle = \Theta iH|\ \rangle = -i\Theta H|\ \rangle \Rightarrow \Theta H = H\Theta$.

⚠ 反幺正算符作用在 ket 上, 或者说我们不打算定义 $\langle\beta|\Theta$. (Dirac 符号本用于线性算符, 而不是反线性算符). 下讨论 Θ 性质.

记 $|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle$, $|\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\beta\rangle$ 设存在对于线性算符 Ω, 都有 $\langle\beta|\Omega|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta\Omega^\dagger\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$ 令 $|\gamma\rangle = \Omega^\dagger|\beta\rangle$. $\langle\beta|\Omega|\alpha\rangle = \langle\gamma|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\gamma}\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta\Omega^\dagger|\beta\rangle$

$= \langle\tilde{\alpha}|\Theta\Omega^\dagger\Theta^{-1}\Theta|\beta\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta\Omega^\dagger\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$ 一般来说, 对于可观测量 A, 作用时反算符后, 只有两种结果. $\Theta A\Theta^{-1} = \pm A$.

e.g. 若时间反演有期望, 应反向. $\langle\alpha|p|\alpha\rangle = -\langle\tilde{\alpha}|p|\tilde{\alpha}\rangle$. 从而称 $\hat{p}$ 对时间反演奇的, $\Theta p\Theta^{-1} = -p$. 从而 $p\Theta|p'\rangle = -\Theta p\Theta^{-1}\Theta|p'\rangle = -p'(\Theta|p'\rangle) \Rightarrow \Theta|p'\rangle = |-p'\rangle$.

对于 x, 可同样得: $\Theta x\Theta^{-1} = x$. $\Theta|x'\rangle = |x'\rangle$ 对于: $[x_i, p_j]|\ \rangle = i\hbar\delta_{ij}|\ \rangle$. 两边作用反演算符. $\Theta[x_i, p_j]\Theta^{-1}\Theta|\ \rangle = \Theta i\hbar\delta_{ij}|\ \rangle$

$[\Theta x_i\Theta^{-1}, \Theta p_j\Theta^{-1}] = \Theta[x_i, (-p_j)]\Theta^{-1}$. $\Rightarrow [x_i, (-p_j)]\Theta|\ \rangle = -i\hbar\delta_{ij}\Theta|\ \rangle$ 从而基本对易关系被保持. 这为我们利用 $\Theta p\Theta^{-1} = -p$. $\Theta x\Theta^{-1} = x$ 提供了理由

同样, 为保证 $[J_i, J_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}J_k$. 角动量在时间反演: $\Theta J\Theta^{-1} = -J$.

*所以 这里 $\underline{\text{关键的事实是}}$ 保持对易关系. $[x_i, p_j]\Theta|\ \rangle = i\hbar\delta_{ij}\Theta|\ \rangle$ 不能推出不一样的结果.
$\langle\ \Theta[x_i, p_j]|\ \rangle = \Theta i\hbar\delta_{ij}|\ \rangle$

考虑波函数. $\langle\tilde{\alpha}|\tilde{x}\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta|x\rangle = \langle\tilde{\alpha}|x\rangle = \langle x|\alpha\rangle^*$ 且 $\langle\tilde{\alpha}|\tilde{x}\rangle = \langle x|\alpha\rangle$. 从而 $\langle x|\tilde{\alpha}\rangle$, $\langle x|\alpha\rangle$ 互为复共轭.

对于角向波函数. $\Theta|l, m\rangle = (-1)^m|l, -m\rangle$.

Thm. 若H在时间反演下不变，且$|n\rangle$非简并，则能量本征波函数是实的

H在反演下不变意味着 $\Theta^{-1}H\Theta = H \Rightarrow H\Theta|n\rangle = \Theta H|n\rangle = E_n\Theta|n\rangle$ 由于$|n\rangle$与$\Theta|n\rangle$对应相同E_n，从而$|n\rangle$，$\Theta|n\rangle$必为一个态。$\Rightarrow \langle x|n\rangle$

在坐标表象引入下，Θ的矩阵表示就是对矩阵取K操作，换个表象就不一样，例如 $\langle p'|\Theta|\alpha\rangle = \langle -p'|\alpha\rangle^*$.

下面对有自旋的系统使用时反。$\vec S\cdot\hat n$ 的本征矢（也就是"指向"$\hat n$的态）为：$|\hat n;+\rangle = \exp(-\frac{iS_z\alpha}{\hbar})\cdot\exp(-\frac{iS_y\beta}{\hbar})|+\rangle$.

由于Θ与角动量反对易所以 $\Theta|\hat n;+\rangle = \exp(-\frac{iS_z}{\hbar}\alpha)\cdot\exp(-\frac{iS_y}{\hbar}\beta)\cdot\Theta|+\rangle = \exp(\cdot)\exp(\cdot)|-\rangle = \eta|\hat n;-\rangle$. $|\hat n;+\rangle$是指向$\hat n$方向的态，而$|\hat n;-\rangle$则是将$|-\rangle$做了同样角度的旋转，

它们两个"指向"相反。从而易知 $|\hat n;-\rangle = \exp(-i\frac{S_z}{\hbar}\alpha)\exp(-i\frac{S_y}{\hbar}(\pi+\beta))|+\rangle$. 从而有$\Theta$的作用其实就是"反向"了一下。

对比一下，由于Θ是反幺正的，而K作用在$|+\rangle$上还是$|+\rangle$，所以对比以上两式有 $\Theta = \eta\exp(-i\pi\frac{S_y}{\hbar})K = -i\eta(\frac{2S_y}{\hbar})K$.

利用旋转矩阵的具体形式，可知 $\exp(-i\pi\frac{S_y}{\hbar})|-\rangle = +|+\rangle$，$\exp(-i\pi\frac{S_y}{\hbar})|+\rangle = -|-\rangle$（就像我们之前讨论$S_z$一样，要转两圈才能转回去）。

下面研究Θ作用在一般态上的效果。$\Theta(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) = +\eta c_+^*|-\rangle - \eta c_-^*|+\rangle$ $\Theta^2(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) = -(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle)$. $\Rightarrow \Theta^2 = -1$. 而对于无自旋系统，$\Theta^2 = 1$（反演两次=没反演）。

※这里看上去非常奇怪，但这由于这样的自旋体系里面时反算符的定义 $\Theta = -i\eta(\frac{2S_y}{\hbar})K$ 导致的，这样的定义下有 $\Theta^{-1}\vec S\Theta = -\vec S$.

上面这样时反算符的定义可以推广至所有与自旋有相同对称性的体系，e.g. 角动量。$\Theta = \eta\exp(-i\pi\frac{J_y}{\hbar})K$. 将两个$\Theta$作用在$|\alpha\rangle$上，有，

$\Theta[\Theta\sum|j,m\rangle\langle j,m|\alpha\rangle] = \Theta[\eta\exp(-i\pi\frac{J_y}{\hbar})K\sum\langle j,m|\alpha\rangle|j,m\rangle] = \Theta[\eta\exp(-i\pi\frac{J_y}{\hbar})\sum\langle j,m|\alpha\rangle^*|j,m\rangle] = \|\eta\|^2\exp(-\frac{i2\pi J_y}{\hbar})\sum|j,m\rangle\langle j,m|\alpha\rangle$.

利用旋转的矩阵表示，可知 $\exp(-2i\pi J_y/\hbar)|j,m\rangle = (-1)^{2j}|j,m\rangle \Rightarrow \Theta(\Theta|\alpha\rangle) = \|\eta\|^2\sum(-1)^{2j}|j,m\rangle\langle j,m|\alpha\rangle$

之前我们做过对于轨道角动量有 $\Theta|l,m\rangle = (-1)^m|l,-m\rangle$ 也就意味着对于任意l，都有 $\Theta^2|l,m\rangle = |l,m\rangle$. 和自旋不一样。⚠ 轨角源于粒子在空间中的运动，故l只能取整数值！

下面看一个在电磁场中运动的粒子。最简单情形：有静电场，H中有$V(x)$。$\Rightarrow [\Theta,H]=0$. 由于我们没有 $\Theta U(t,t_0) = U(t,t_0)\Theta$，所以没有像宇称一样守恒的"时反量子数"。

而且这样的系统必有简并，若假设对应相同能量的$H\Theta|n\rangle$与$\Theta H|n\rangle$对应同一态，则我们有 $\Theta^2|n\rangle = |n\rangle$. 这对于1/2 spin来说不可能，从而每个能级简并度至少为2.

对于有 $\vec S\cdot\vec B$ 或 $\vec p\cdot\vec A + \vec A\cdot\vec p$ 这样交叉项的系统有 $\Theta H \neq H\Theta$. ⚠ 此时用时反算符并没有将B变号，因为我们只针对这个系统，而非全世界进行时反！

→ 量子力学基础 · 完 ←