

要保证 $[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$ 不变, 须 $\boxed{\Theta J \Theta^{-1} = -J}$

证明: $\Theta [J_i, J_j] \Theta^{-1} \Theta |\alpha\rangle = -i\hbar \epsilon_{ijk} \Theta J_k \Theta^{-1} \Theta |\alpha\rangle$

$$[J_i, J_j] \Theta |\alpha\rangle = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k \Theta |\alpha\rangle$$

对轨道角动量, 容易理解. $\vec{J} = \vec{r} \times \vec{p}$

• 波函数

设 $t=0$ 时, 一个无自旋粒子处于 $|\alpha\rangle$

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \quad \leftarrow \text{利用 } \Theta|x'\rangle = |x'\rangle$$

反转变 $\Theta|\alpha\rangle = \int d^3x' \langle x'|\alpha\rangle^* \Theta|x'\rangle = \int d^3x' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle^*$

$$\frac{1}{\hbar} \psi(x') \xrightarrow{\text{反变}} \psi^*(x')$$

$$(-1)^m \sqrt{\frac{(2+l)!}{4\pi}} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}$$

考虑电力问题中波函数角动量部分. $Y_{lm}(\theta, \varphi) = P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \xrightarrow{\text{反变}} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{l,-m}(\theta, \varphi) \leftarrow \text{利用 } P_l^m(x)$$

即 $\Theta |lm\rangle = (-1)^m |l, -m\rangle$

$$P_l^m(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x)$$

物理: $R Y_{lm} \rightarrow$ 几率流 与 $R Y_{l,-m}$ 几率流 反向 $\because j_\varphi \sim m$
对自旋粒子

• 定理: 设 H 是时间反演不变的, 且 $|n\rangle$ 是 H 的非简并本征态
则 $\psi_n(x)$ 是实的. $\downarrow$ 偶, 对易. $\Theta H = H \Theta$

证明: $H \Theta |n\rangle = \Theta H \Theta^{-1} \Theta |n\rangle = \Theta H |n\rangle = E_n \Theta |n\rangle$

$\therefore \Theta |n\rangle$ 与 $|n\rangle$ 是同一个态. 波函数为 $\langle x' | \Theta |n\rangle$ 与 $\langle x' | n\rangle$
 $= \langle x' | n\rangle^*$

$\therefore$ 可以定 $\langle x' | n\rangle^* = \langle x' | n\rangle$

以上在一维束缚态问题已经遇到. 不适用于 3D H 原子.
(电子在束缚中运动呢?) (基态除外).

前面看到当 $|\alpha\rangle$ 展开成 $|x\rangle$, 坐标表象 $\oplus$ 等效 K $\because \oplus|x\rangle = |x\rangle$

但是 坐标表象下 $\oplus|\alpha\rangle = \int d^3p' |p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle^* = \int d^3p' |p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle^*$
 $(\because UK|p\rangle \langle p|\alpha\rangle = UK\langle p|\alpha\rangle \cdot |p\rangle = \langle\alpha|p\rangle UK|p\rangle = \langle\alpha|p\rangle |p\rangle)$
 所以 $|\alpha\rangle = \int d^3p' |p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle$

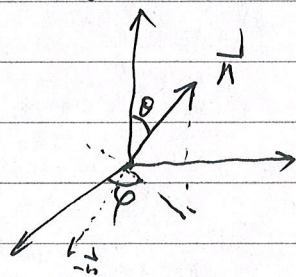
$$\phi(\vec{p}) \xrightarrow{\text{反粒}} \phi^*(-\vec{p})$$

自洽: $\langle\alpha|\alpha\rangle = \int d^3p e^{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} \phi(\vec{p}) = \psi(x)$
 $\langle x|\tilde{\alpha}\rangle = \int d^3p e^{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} \phi^*(-\vec{p}) = \int d^3p e^{-\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} \phi^*(\vec{p}) = \psi^*(x)$
 $(\int_{-\infty}^{\infty} d^3p = \int_{-\infty}^{\infty} d^3(-p) = -\int_{\infty}^{-\infty} d^3p' = \int_{-\infty}^{\infty} d^3p')$

• 自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的时间反演

$\vec{S} \cdot \vec{n}$ 的本征矢 $|\vec{n}, +\rangle$ 可由 $|z, +\rangle$ 旋转得到。

$$|\vec{n}, +\rangle = e^{-\frac{iS_z\theta}{\hbar}} e^{-\frac{iS_y\phi}{\hbar}} |z, +\rangle$$



研究反粒态 考虑 $\oplus \vec{J} \oplus^{-1} = -\vec{J}$

$$\oplus |\vec{n}, +\rangle = \oplus e^{-\frac{iS_z\theta}{\hbar}} \oplus^{-1} \oplus e^{-\frac{iS_y\phi}{\hbar}} \oplus^{-1} \oplus |z, +\rangle$$

利用 $e^{-\frac{i\vec{S} \cdot \vec{n}\phi}{\hbar}} = \cos\frac{\phi}{2} - i\vec{S} \cdot \vec{n} \sin\frac{\phi}{2}$ (注意 $\oplus(i) = -i\oplus$)

$$= e^{-\frac{iS_z\theta}{\hbar}} e^{-\frac{iS_y\phi}{\hbar}} \oplus |z, +\rangle \stackrel{\text{应该}}{=} \eta |\vec{n}, -\rangle$$

(或者: $(\vec{S} \cdot \vec{n}) \oplus |\vec{n}, +\rangle = \oplus \vec{S} \cdot \vec{n} \oplus^{-1} \oplus |\vec{n}, +\rangle = -\frac{\hbar}{2} \oplus |\vec{n}, +\rangle$
 $\therefore \oplus |\vec{n}, +\rangle = \eta |\vec{n}, -\rangle$)

另一方面: $|\vec{n}, -\rangle = e^{-\frac{iS_z\theta}{\hbar}} e^{-\frac{i(\pi+\theta)S_y}{\hbar}} |z, +\rangle$

$$= e^{-\frac{iS_z\theta}{\hbar}} e^{-\frac{iS_y\theta}{\hbar}} (-i\sigma_y) |z, +\rangle$$

由于 $\oplus = UK$ $K|z, +\rangle = |z, +\rangle$, $Ki|z, +\rangle = -i|z, +\rangle$

$\therefore \oplus = \boxed{\eta e^{-\frac{i\pi S_y}{\hbar}}} K = -i\left(\frac{S_y}{\hbar}\right) \eta K$, $\eta = e^{i\delta}$ 相位
 $\downarrow$ 么子 $\Rightarrow$ 必须有 K

另一个角动量: $\chi(\vec{n}, t)$ 是 $|n, t\rangle$ 对应旋量波函数 $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$, $|n, t\rangle = c_1 |t\rangle + c_2 |-t\rangle$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \chi(\vec{n}, t) = \chi(\vec{n}, t)$$

解. $\chi(\vec{n}, t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \cdot e^{i\tau}$

$$-i\sigma_y \chi^*(\vec{n}, t) = -i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix}$$

是 $|n, -t\rangle$ 的旋量波函数.

• 注意到. $e^{-\frac{i\pi S_y}{\hbar}} |t\rangle = |-t\rangle$, $e^{-\frac{i\pi S_y}{\hbar}} |-t\rangle = -|t\rangle$
(设 $-i\sigma_y |t\rangle = c_1 |t\rangle + c_2 |-t\rangle \Rightarrow c_1 = 0, c_2 = 1$)
(利用 $e^{-i\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{n}}{2} \phi} = \cos \frac{\phi}{2} - i\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{n}}{2} \sin \frac{\phi}{2} \rightarrow -i\sigma_y$)

对于一般 $s = \frac{1}{2}$ 自旋态:

$$\textcircled{H} (c_1 |t\rangle + c_2 |-t\rangle) = -i\gamma \sigma_y (c_1^* |t\rangle + c_2^* |-t\rangle) = \gamma c_1^* |-t\rangle - \gamma c_2^* |t\rangle$$

再来一遍. $\textcircled{H}^2 (c_1 |t\rangle + c_2 |-t\rangle) = -|\gamma|^2 c_1 |t\rangle - |\gamma|^2 c_2 |-t\rangle$
 $= -(c_1 |t\rangle + c_2 |-t\rangle)$

$$\therefore \boxed{\textcircled{H}^2 = -\mathbb{I}} \quad \text{与 } \gamma \text{ 的选取无关!}$$

相反, 对于无自旋态 $\textcircled{H}^2 = \mathbb{I}$, 例 $\textcircled{H} |l, m\rangle = (-1)^m |l, -m\rangle$
($\because (Y_{lm})^* = (-1)^m Y_{l, -m}$)

• 更一般: $\textcircled{H}^2 |j = \text{半整数}\rangle = -|j\rangle$
 $\textcircled{H}^2 |j = \text{整数}\rangle = |j\rangle \leftarrow$

★ 即: $\textcircled{H}^2$ 的本征值 $= (-1)^{2j}$

证: $S_y \rightarrow J_y$: $\boxed{\textcircled{H} = \gamma e^{-\frac{i\pi J_y}{\hbar}} K}$

$$\textcircled{H} (\textcircled{H} \sum |j, m\rangle \langle j, m| \alpha) = \textcircled{H} (\gamma \sum e^{-\frac{i\pi J_y}{\hbar}} |j, m\rangle \langle j, m| \alpha^*)$$

$$= |\gamma|^2 e^{-2\frac{i\pi J_y}{\hbar}} \sum |j, m\rangle \langle j, m| \alpha, \left\{ \right.$$

由 $e^{-2\frac{i\pi J_y}{\hbar}} |j, m\rangle = (-1)^{2j} |j, m\rangle \left\{ \leftarrow |j, m\rangle = \sum_{m_y} |j, m_y\rangle \chi_{j, m_y} |j, m\rangle \right.$

• 与电磁场相互作用.

①. 静电场中带电粒子: 是时间反演不变的

$$V(\vec{x}) = e\phi(\vec{x})$$

由于 $\phi(\vec{x})$ 是 $\vec{x}$ 的实函数. $\begin{cases} \oplus \vec{x} \oplus^\dagger = \vec{x} \\ \oplus p^2 \oplus^\dagger = p^2 \end{cases} \left. \vphantom{\begin{matrix} \oplus \vec{x} \oplus^\dagger = \vec{x} \\ \oplus p^2 \oplus^\dagger = p^2 \end{matrix}} \right\} \text{偶}$

$\therefore [\oplus, H] = 0$. 但是并不导致守恒律

$\therefore \oplus U(t, t_0) \neq U(t, t_0) \oplus$, 没有“时间反演量子数”

$$\left(\begin{array}{l} U = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}, \text{ 若 } [G, H] = 0. \\ GU|g\rangle = UG|g\rangle = g'U|g\rangle \\ \text{但 } \oplus \text{ 是 } U \text{ 的逆, 使得 } [\oplus, U] \neq 0. \end{array} \right)$$

• 前面 $\psi(x) \rightarrow \psi^*(x) \Rightarrow$ 非简并能级轨道是实的

• Kramers 简并 $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$H\oplus|n\rangle = \oplus H|n\rangle = E_n\oplus|n\rangle$$

问 $|n\rangle$ 与 $\oplus|n\rangle$ 是否同一个态?

$$\text{若是, 则 } \oplus|n\rangle = e^{i\delta}|n\rangle$$

$$\oplus^2|n\rangle = \oplus e^{i\delta}|n\rangle = e^{-i\delta}\oplus|n\rangle = |n\rangle$$

然而对半整数 J , $\oplus^2 = -1$, 矛盾.

$\therefore$ 半整数 J 系统 $\oplus|n\rangle$ 与 $|n\rangle$ 简并.

$\Rightarrow$ 一个系统有奇数个电子, 在外电场下, 每个能级至少两重简并. 不论 $\phi(\vec{x})$ 多复杂.

时间反演对称性 导致简并!

②. 外磁场.

H 中会有 $\vec{S} \cdot \vec{B}$, 或者 $\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} \leftarrow (\vec{p} + i\hbar \vec{A})^2$

由于 $\vec{p}$ 与 $\vec{S}$ 都是 odd, $\vec{B}, \vec{A}$ 外 P , 反演不变

* $[H, \Theta] \neq 0$

例: 在外磁场中, $|+\rangle$ 与 $\Theta|+\rangle = |-\rangle$ 能量不同.

Kramers 简并在外磁场中解除 (be lifted)

如果对整个体系反演, 那么 $[H, \Theta] = 0$.