目录

第六章 *量子力学中的对称性

陈童

本章我们首先利用维格纳的定理定义了量子变换的概念，它可以看成是经典力学中正则变换的量子力学对应物。然后我们研究了时间平移变换、空间平移变换、以及空间旋转变换，并以此一般性地定义了任何量子系统的总动量算符和总角动量算符。进而一般性地推导了这些算符之间的代数关系，特别是一般性地得到了角动量算符的代数关系。

本章的核心之一是介绍连续对称性与守恒定律之间的深刻联系。也就是量子力学版本的诺特定理。根据这个定理，能量守恒定律源自于时间平移对称性，动量守恒定律源自于空间平移对称性，而角动量守恒定律源自于空间旋转对称性。另外，电荷守恒定律和电荷量子化则源自于一个抽象的$U(1)$相位对称性。当然，除此之外，我们也深入讨论了伽利略协变性。

我们也讨论了对称性与能级简并之间的深刻联系。

最后，本章还讨论了空间反演对称性以及相应的宇称守恒。特别的，我们介绍了李政道和杨振宁发现的弱相互作用下宇称不守恒。当然，我们也讨论了时间反演对称性，证明了Kramer定理。

描述对称性的基本数学语言是群论。本章我们也简要性地介绍了群论和群表示论的基本思想。其中群表示是本章的一个核心数学概念。

6.1 量子变换

一个量子系统所有可能量子态的集合构成希尔伯特空间$\mathcal{H}$。在物理上，我们常常默认量子态已经归一化了，但即使对于已经归一化的量子态$|\psi\rangle$，它其实也并不唯一确定，因为根据态叠加原理，$e^{i\theta}|\psi\rangle$和$|\psi\rangle$描述的是同一个量子态！所以，严格来说，一个量子态其实是希尔伯特空间归一化矢量的一个等价类，满足$e^{i\theta}|\psi\rangle \sim |\psi\rangle$，$\sim$表示等价关系。

根据量子力学的玻恩规则，对于处在$|\psi\rangle$态上的系统，我们在$|\phi\rangle$态上测到它的概率为$|\langle\phi|\psi\rangle|^2$，其中两个量子态的内积$\langle\phi|\psi\rangle$也称之为概率幅，因为它的模方给出了概率。在量子力学中，概率(而不是量子态)才是我们在物理上真正测量的东西。

量子变换

一个重要的问题是，在什么变换下，作为物理可观测量的概率将保持不变呢? 对这个问题的回答就引出了我们所谓量子变换的概念[1]。所谓的量子变换我们指的是希尔伯特空间$\mathcal{H}$到其自身的一个映射，假设在这个映射的作用下，$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle$，$|\phi\rangle \to |\phi'\rangle$，那么我们要求映射前后的玻恩概率保持不变，即

$$|\langle\phi'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\phi|\psi\rangle|^2. \tag{6.1}$$

维格纳(Wigner)有一个著名的定理[2]说，量子变换要么是希尔伯特空间的幺正变换，要么就是反线性反幺正变换，此外没有其它的可能性。幺正变换我们在第二章中就已经很熟悉了，最重要的例子比如有时间演化算符$U(t_2,t_1)$。那么什么是反线性反幺正变换呢? 首先，作用在希尔伯特空间的算符Θ, 如果满足下面的关系，它就是一个**反线性算符**，

$$\Theta(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) = \alpha^*\Theta|\psi\rangle + \beta^*\Theta|\phi\rangle, \tag{6.2}$$

式中α,β为两个复叠加系数。任何反线性反幺正变换Θ首先是一个反线性算符，其次，它还满足

$$\langle\Theta\phi|\Theta\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*. \tag{6.3}$$

[1]值得提醒读者的是，量子变换这个名称还不是通用的，更多的书称之为对称变换。我们这里称之为量子变换是想稍微拓展一下这个概念的应用范围。

[2]关于维格纳(Wigner)这个定理的严格证明，我们推荐读者参考：Steven Weinberg,《The Quantum Theory of Fields》，Volume I，第二章的Appendix A。

注意，对于反线性算符，我们不能将之理解为一个矩阵(因为矩阵一定是线性的)！因此反线性算符只能向右边的量子态作用，诸如$\langle\phi|\Theta$这样的表达式是没有意义的，因为它不能理解为行矢量乘上矩阵。这就是式(6.3)中我们要把第一个表达式写成$\langle\Theta\phi|\Theta\psi\rangle$的原因，它表示$\Theta|\psi\rangle$与$\Theta|\phi\rangle$的内积。由于反线性算符不能理解为矩阵，所以它的厄密共轭的定义也与线性算符不同，而且反线性算符的厄密共轭也不能理解为复共轭加转置，因为它根本不能理解为矩阵，所以当然谈不上转置。反线性算符Θ的厄密共轭算符$\Theta^\dagger$定义为(形式上和线性算符的厄密共轭定义相差一个整体的复数共轭，因为它的反线性本身包含了一个复数共轭)

$$\langle\phi|\Theta\psi\rangle = \langle\Theta^\dagger\phi|\psi\rangle^*. \tag{6.4}$$

根据这个定义$\langle\Theta\phi|\Theta\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^* \Leftrightarrow \langle\phi|\Theta^\dagger\Theta\psi\rangle^* = \langle\phi|\psi\rangle^*$，即$\Theta^\dagger\Theta = 1$，所以所谓的反幺正算符其实就是满足和幺正算符类似的$\Theta^\dagger = \Theta^{-1}$的反线性算符。

很显然，幺正变换乘以幺正变换，结果必定还是幺正变换，而反幺正变换乘以反幺正变换结果也是幺正变换，只有幺正变换乘以反幺正变换结果才可能是反幺正变换。关于这几点的证明我们留给读者。正因为如此，任何反幺正变换总是能写成某个幺正变换和另一个反幺正变换的乘积。

操作诱导的量子变换

量子变换常常由对系统的操作诱导产生。比方说，我们将系统作一个旋转R, 这就会诱导一个幺正的量子变换$U(R)$，它描述系统旋转之后的量子态与旋转之前的量子态之间的联系。对于考察量子系统的对称性而言，我们所要考察的对系统的操作都是可逆的，而且满足一种乘法合成规则。也即是说，如果先对系统进行操作T_1，接着再对它进行操作T_2，最终的效果就等价于直接进行某个操作T_3，我们将T_3写成$T_3 = T_2T_1$。因此，两个先后进行的操作的合成就定义了一种操作间的乘法，其中先进行的操作写在乘号右边，后进行的操作写在左边。通常来说，这种乘法并不满足交换律(类似于矩阵乘法)，比方说，先将系统绕x轴旋转90度(记作$R_x(90)$)，接着再将系统绕y轴旋转90度(记作$R_y(90)$)，其结果$R_y(90)R_x(90)$显然与相反操作顺序的结果$R_x(90)R_y(90)$不同。我们可以将一个操作T的逆操作记作T^{-1}，按照操作乘法，它显然满足$TT^{-1} = T^{-1}T = 1$。这里1就表示恒等操作，也就是不进行任何操作(很显然，恒等操作所诱导的量子变换一定是

恒等变换，也就是恒等算符)。这样的定义了乘法运算的可逆操作的集合就构成了数学上所谓的群。

抽象一点来说，一个群是一个集合，它的每一个元素就称为一个群元。群的要义有三点：其一，群元之间定义了某种乘法; 其二，每一个群元都有一个逆元；其三，群本身在乘法运算下是封闭的，即任何两个群元相乘结果必定依然是一个群元。根据这个定义，我们将限于考察那些能构成一个群的对量子系统的操作，以后我们都会默认这一点。

对于我们考察的这类操作而言，每一个对系统的操作都会诱导一个幺正或者反幺正的量子变换。假设记T_1操作的量子变换为$U(T_1)$，T_2操作的量子变换为$U(T_2)$，T_1和T_2的合成操作T_2T_1诱导的量子变换为$U(T_2T_1)$。那么根据定义，在T_1操作之下，原来的量子态$|\psi\rangle$将变换为$|\psi\rangle \to U(T_1)|\psi\rangle$, 紧接着再进行操作$T_2$，这个量子态就会接着变换为$U(T_1)|\psi\rangle \to U(T_2)U(T_1)|\psi\rangle$, 所以先后进行$T_1$、$T_2$操作总的效果是将$|\psi\rangle$变换为$|\psi\rangle \to U(T_2)U(T_1)|\psi\rangle$。另一方面，根据定义，合成操作$T_2T_1$将会把$|\psi\rangle$变换为$|\psi\rangle \to U(T_2T_1)|\psi\rangle$。根据操作合成的定义，这两个结果应该是一样的，也即是说，我们应该有$U(T_2T_1)|\psi\rangle = U(T_2)U(T_1)|\psi\rangle$。但是，这里有一个微妙的细节，由于量子态对应的希尔伯特空间矢量不唯一确定，而是可以相差一个相位，所以严格来说，我们不能说$U(T_2T_1)|\psi\rangle$必须和$U(T_2)U(T_1)|\psi\rangle$相等，而只能说，这两者最多相差一个相位，即$U(T_2T_1)|\psi\rangle = e^{i\omega(T_2,T_1)}U(T_2)U(T_1)|\psi\rangle$, 由于$|\psi\rangle$是一个任意的态，因此我们就有

$$U(T_2T_1) = e^{i\omega(T_2,T_1)}U(T_2)U(T_1). \tag{6.5}$$

方程(6.5)最关键的地方就在于，它告诉我们，操作诱导的量子变换将保持操作的乘法结构！数学上人们称这种保持一个群的乘法结构的诱导关系为群的表示，因此操作所诱导的量子变换构成了操作群在希尔伯特空间的表示。同样，微妙点在于，这种对乘法结构的保持可以相差一个相位，所以人们通常称方程(6.5)这样的群表示关系为投影表示。读者无需追究投影这一名称的来源，只需记住投影表示满足(6.5)这样的方程就可以了。不过，很多情况下，投影表示的相因子$\omega(T_2,T_1)$其实都可以取为零，我们将在本章的正文部分默认这一点，不过，在本章中间的补充内容中，我们考察了一个$\omega(T_2,T_1)$不能取为零的例子[3]。

[3]关于$\omega(T_2,T_1)$何时可以取为零的讨论，读者可以参考Steven Weinberg,《The Quantum Theory of Fields》，Volume I，第二章的2.7节。

假设我们的操作$T(\theta)$依赖于某个连续参数θ, $\theta=0$表示恒等操作。比方说，θ可以是绕某个固定轴的旋转角度。如此一来我们就可以把这些操作所诱导的量子变换记作$U(T(\theta))$, 又时候也简记为$U(\theta)$。由于$U(0)=1$是一个幺正变换，而随着参数的连续调节，$U(\theta)$可以连续地变化为$U(0)=1$，所以，$U(\theta)$也必定为一个幺正变换(反幺正变换涉及复共轭，而幺正变换不涉及，因此反幺正变换不可能连续地变化为幺正变换)。因此，依赖于连续参数并且包含恒等变换的量子变换必定为幺正变换，我们常常称这样的幺正变换为连续的幺正变换。而任何依赖于连续参数的反幺正变换往往总能写成一个连续的幺正变换乘以一个分立的反幺正变换。因此，在物理上真正独立存在的反幺正变换其实都是分立的，或者说离散的，在量子力学中，它其实就是所谓的时间反演变换，在量子场论中更著名的就是所谓的CPT变换。当然，反幺正变换是特殊的，因为它们并不是我们真正可以对量子系统实施的操作，我们定义它们完全是因为我们可以从中引出时间反演对称性或者CPT对称性的概念。

现在，假设连续参数θ为一个无穷小量，$\theta=\epsilon$。因此幺正变换$U(\epsilon)$就可以泰勒展开为

$$U(\epsilon)=1+i\epsilon G+... \tag{6.6}$$

其中算符G就称作连续幺正变换$U(\theta)$的生成元。很显然，$U(\epsilon)$也可以近似写成$U(\epsilon)=\exp(i\epsilon G)$。利用幺正性$U^\dagger(\epsilon)U(\epsilon)=1$，我们容易有$(1-i\epsilon G^\dagger+...)(1+i\epsilon G+...)=1$, 比较等式左右两边的$\epsilon$一次项，就有

$$G^\dagger=G. \tag{6.7}$$

也即是说，连续幺正变换的生成元必定为厄米算符，因此也就是一个物理量。

量子变换在算符上的作用

前面我们定义量子变换的时候，是将它作用在系统的量子态上。但其实，我们也可以等价地认为量子变换对系统量子态没有作用，而是对物理量的算符有作用。具体来说，考察一个量子变换U，再考察一个任意的算符A。在物理上，我们关心的其实总是算符的矩阵元，为此我们考察算符A在系统量子态$|\psi\rangle$和$|\phi\rangle$之间的矩阵元$\langle\phi|A|\psi\rangle$。由于在量子变换之后$|\psi\rangle\to U|\psi\rangle$, $|\phi\rangle\to U|\phi\rangle$，所以在量子变换的作用下矩阵元$\langle\phi|A|\psi\rangle$将变

换为

$$\langle\phi|A|\psi\rangle \to \langle\phi|U^{-1}AU|\psi\rangle. \tag{6.8}$$

很显然，为了满足这个物理矩阵元的变换关系，我们完全可以等价地认为量子变换对系统量子态没有作用，而是会将算符A变换为

$$A \to U^{-1}AU. \tag{6.9}$$

当然，严格来说，上面处理的只是幺正量子变换，对于反幺正量子变换Θ, $|\psi\rangle \to \Theta|\psi\rangle$, $|\phi\rangle \to \Theta|\phi\rangle$, 情况略微有些不同。这时候，在变换之下$\langle\phi|A|\psi\rangle \to \langle\Theta\phi|A|\Theta\psi\rangle$。由于$A$是一个普通的算符，所以我们有$\langle\Theta\phi|A|\Theta\psi\rangle = \langle\Theta\psi|A^\dagger|\Theta\phi\rangle^*$。而根据(6.4)式，我们又有$\langle\Theta\psi|A^\dagger|\Theta\phi\rangle = \langle\psi|(\Theta^\dagger A^\dagger\Theta)|\phi\rangle^*$。所以最终我们得到，在反幺正变换$\Theta$之下，

$$\langle\phi|A|\psi\rangle \to \langle\psi|(\Theta^\dagger A^\dagger\Theta)|\phi\rangle. \tag{6.10}$$

我们发现，反幺正变换把左矢$\langle\ |$变成了右矢$|\ \rangle$，把右矢变成了左矢，同时它在算符上的等价作用为

$$A \to \Theta^{-1}A^\dagger\Theta, \tag{6.11}$$

式中我们利用了$\Theta^\dagger = \Theta^{-1}$。很显然，如果$A$是厄密算符，那(6.11)式在形式上和幺正变换的(6.9)式就是一样的。

根据量子变换作用在系统量子态但是不作用在物理量算符上的观点，我们实际上是认为，我们的操作是“转动”了系统，但是没有“转动”实验室里测量系统的仪器，从而物理量算符不变。而根据量子变换作用在物理量算符而不作用在系统量子态上的观点，我们是等价地认为，我们的操作是将实验室里的仪器作了一个反方向的“旋转”，同时保持待测系统原地不动，从而算符按照(6.9)式变换，而系统的量子态不变[4]。

根据算符A的本征方程$A|a\rangle = a|a\rangle$，结合(6.9)式容易看出来，在量子变换的作用下，算符A的本征值a不会变，但是本征态$|a\rangle$将变为$U^{-1}|a\rangle$(物理上这是因为仪器反方向“旋转”了)。如果对于一个原来处于$|\psi\rangle$态的系

[4]其实还有一种与这两种观点并不等价但同样成立的观点，也是人们常常采用的，即认为我们同时将系统和仪器作了一个同方向的同步“转动”。当然很多书在采用这种观点的时候忽略了对它背后的这一物理本质的强调。读者可以自行写出在这种观点下，系统量子态和算符该如何变换的相应公式。

统，我们计算测到A的值为a的概率$p_a = |\langle a|\psi\rangle|^2$，那么在量子变换之下对于这个概率将如何变化我们有两种等价的观点：其一，是认为算符A不变(从而它的本征态$|a\rangle$也不变)，但是系统的量子态$|\psi\rangle$变换为$|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$，根据这一观点$p_a$将变换为$|\langle a|\psi\rangle|^2 \to |\langle a|U|\psi\rangle|^2$。其二，我们也可以认为系统的量子态$|\psi\rangle$没变，但是作为物理量的算符$A$按照(6.9)式变换了，从而本征态$|a\rangle$将变为$U^{-1}|a\rangle$，即$\langle a|$将变为$\langle a|U$，根据这一观点，$p_a$依然将变换为$|\langle a|\psi\rangle|^2 \to |\langle a|U|\psi\rangle|^2$。很显然，两种不同观点完全等价。

方程(6.9)可以让我们看到，量子变换其实是经典力学中的正则变换在量子力学中的对应物。为了看清楚这一点，我们假设U是一个连续的幺正变换$U(\theta)$，我们来考察无穷小变换$U(\epsilon) = \exp(i\epsilon G/\hbar)$。记某物理量$A$在这一无穷小量子变换的作用下变换为$A \to A' = U^{-1}(\epsilon)AU(\epsilon)$, 记变换前后物理量$A$的无穷小改变为$\delta A = A' - A$。则根据(6.9)式，我们将有$\delta A = (1 - i\epsilon G/\hbar + ...)A(1 + i\epsilon G^{\dagger}/\hbar + ...) - A = \epsilon[G, A]/(i\hbar)$, 即

$$\delta A = \epsilon[G, A]/(i\hbar). \tag{6.12}$$

熟悉分析力学的读者很快就能明白，只要我们将算符对易子$[G, A]/(i\hbar)$对应于分析力学中的泊松括号$[G, A]_{PB}$, 那么方程(6.12)就正好是分析力学中的无穷小正则变换的方程[5]

$$\delta A = \epsilon[G, A]_{PB}. \tag{6.13}$$

其中G就叫做无穷小正则变换的生成元。

在分析力学中，如果一个正则变换保持系统的哈密顿量不变，我们就称它为力学系统的一个对称性。如果力学系统有一个连续的对称性从而使得哈密顿量在无穷小正则变换G下保持不变(为简单起见，假设G不显含t，即$\frac{\partial G}{\partial t} = 0$)，即$\delta H = \epsilon[G, H]_{PB} = 0$，从而$[G, H]_{PB} = 0$，则根据力学量$G$的哈密顿运动方程$\frac{dG}{dt} = [G, H]_{PB}$, 我们必有$\frac{dG}{dt} = 0$，也即是说连续对称性的生成元$G$必定是一个守恒量。这就是分析力学中连续对称性与守恒量之间的密切联系，通常人们是在拉格朗日量的框架下讨论它的，称之为诺特定理。后文中我们将看到连续对称性与守恒量之间的这一普遍联系在量子力学中依然成立。

最后，我们来初步验证一下算符对易子$[G, A]/(i\hbar)$与泊松括号$[G, A]_{PB}$之间的对应关系(如果是从经典泊松括号出发再对应到量子的算符对易子，人

[5]参见Goldstein H. Classical Mechanics. Third ed. 第9章-9.6节.

们就称这样的过程为正则量子化)。我们以一维运动的粒子为例，这时候在量子力学中我们有算符对易关系$[X, P] = i\hbar$，而在分析力学中我们有泊松括号$[X, P]_{PB} = 1$，很显然$[X, P]/(i\hbar) = [X, P]_{PB}$。所以，对于这一简单的$G = X$, $A = P$的情形我们就验证了量子与经典之间的这一对应关系，更一般地，注意到分析力学中的所有物理量都是正则坐标和正则动量的函数，人们可以进一步证明，对于任何这样的物理量G和A，在$\hbar \to 0$的经典极限下均有$[G, A]/(i\hbar) = [G, A]_{PB}$。由于本书并不想强调正则量子化的观点，也不想深入探讨量子力学与经典力学之间的对应关系，所以我们将忽略这个数学证明。

6.1.1 习题

1. 设A、B为两个算符，λ为一个参数，请证明

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = B + [A, B]\lambda + \frac{1}{2!}[A, [A, B]]\lambda^2 + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]]\lambda^3 + ... \tag{6.14}$$

6.2 时间平移、空间平移、空间旋转

这一节我们考察对量子系统的三种常见操作，时间平移、空间平移，以及空间旋转。我们主要考察这三种时空操作所诱导的连续幺正量子变换。

6.2.1 时间平移

我们来考察对量子系统的时间平移操作T_τ，假设在这样的时间平移操作之下，t时刻的系统被平移到$t + \tau$时刻，即系统的时间坐标从t平移到了$t + \tau$，$T_\tau : t \to T_\tau t = t + \tau$。我们记表示这个时间平移操作的量子变换为$U(\tau)$。很显然时间平移操作具有可加性，因此

$$U(\tau_1)U(\tau_2) = U(\tau_1 + \tau_2). \tag{6.15}$$

具有这种性质的算符$U(\tau)$必定具有如下形式

$$U(\tau) = \exp\big(iH\tau/\hbar\big), \tag{6.16}$$

其中厄米算符H就是时间平移的生成元，其物理意义我们马上就会清楚。

现在，我们将时间平移算符$U(\tau)$作用在系统t时刻的某个态$|\psi(t)\rangle$上，并记这种量子变换的结果为一个新的态$|\phi(t)\rangle$，$|\phi(t)\rangle = U(\tau)|\psi(t)\rangle$。由于$U(\tau)$相应于把$t$时刻的系统平移到$t+\tau$时刻，因此平移以后$t$时刻的态$|\phi(t)\rangle$必定就是平移前$t-\tau$时刻的态(此前$t-\tau$时刻的系统刚好平移到$t$时刻)，也就是$|\psi(t-\tau)\rangle$，因此我们有

$$U(\tau)|\psi(t)\rangle = |\psi(t-\tau)\rangle = |\psi(T_\tau^{-1}t)\rangle. \tag{6.17}$$

在上式中取$\tau = t$, 我们就可以得到

$$|\psi(t)\rangle = \exp\big(-iHt/\hbar\big)|\psi(0)\rangle, \tag{6.18}$$

很显然，这正是量子态的时间演化方程，从而前面引入的时间平移生成元H就是系统的哈密顿算符！

我们把通常的算符称之为薛定谔绘景中的算符，比如本书前面碰到的位置算符、动量算符等等都是薛定谔绘景中的算符。薛定谔绘景中的算符通常不随时间演化(除非这个算符的表达式本身显含时间t), 随时间演化的是量子态。但是，考虑一个薛定谔绘景中的算符A在t时刻的某个矩阵元$\langle\psi_2(t)|A|\psi_1(t)\rangle$, 利用量子态的时间演化关系我们发现这个矩阵元可以重写为

$$\begin{aligned}\langle\psi_2(t)|A|\psi_1(t)\rangle &= \langle\psi_2(0)|\exp\big(iHt/\hbar\big)A\exp\big(-iHt/\hbar\big)|\psi_1(0)\rangle \\ &= \langle\psi_2(0)|A_H(t)|\psi_1(0)\rangle.\end{aligned} \tag{6.19}$$

式中我们引入了一个新的算符$A_H(t)$, 其定义为

$$A_H(t) = \exp\big(iHt/\hbar\big)A\exp\big(-iHt/\hbar\big). \tag{6.20}$$

方程(6.19)告诉我们，对于计算真正可测量的物理量的矩阵元而言，我们既可以用通常的薛定谔绘景中的算符A，然后认为是量子态在随时间演化，也可以等价地认为量子态永远都固定在$t=0$时刻不变，但是物理量要重新表示成一个新的随时间演化的算符$A_H(t)$。如果将系统所有的算符都作(6.20)式这样的变换，那我们就进入了所谓的海森堡绘景，在海森堡绘景中，量子态不随时间演化，但是算符要按照(6.20)式这样随时间演化。$A_H(t)$这样的算符就称为海森堡绘景中的算符。

值得强调的是，薛定谔绘景和海森堡绘景是量子力学的两种等价描述。应用的时候我们选取其中之一就可以了。

有了海森堡绘景，我们就可以将时间平移的量子变换$U(\tau)$等价地作用在算符上了。事实上，在海森堡绘景中，由于量子态不随时间演化，所以再将时间平移算符作用上去就没有意义了。相反，这时候随时间演化的是$A_H(t)$这样的算符。所以我们应该等价地将时间平移的量子变换作用在$A_H(t)$上，变换以后的新算符$B_H(t)$就是$B_H(t) = U^{-1}(\tau)A_H(t)U(\tau)$。完全类似于前面关于量子态的讨论，由于量子变换$U(\tau)$是将$t-\tau$时刻的系统平移到$t$时刻，所以变换之后$t$时刻的算符$B_H(t)$应该等于变换之前$t-\tau$时刻的算符，也就是$A_H(t-\tau)$, 因此即有

$$U^{-1}(\tau)A_H(t)U(\tau) = A_H(t-\tau) = A_H(T_\tau^{-1}t). \tag{6.21}$$

在上式中取$\tau = t$，我们马上即有

$$A_H(t) = \exp\big(iHt/\hbar\big)A_H(0)\exp\big(-iHt/\hbar\big). \tag{6.22}$$

这正是海森堡绘景的算符随时间演化的关系。

6.2.2 空间平移

下面我们考察对系统的空间平移操作$T_{\mathbf{a}}$, $T_{\mathbf{a}}$的定义是将系统的空间坐标平移$\mathbf{a}$，具体来说就是，在$T_{\mathbf{a}}$的作用之下，系统中任意一个位于$\mathbf{x}$的粒子将被平移到$\mathbf{x}+\mathbf{a}$，$T_{\mathbf{a}} : \mathbf{x} \to T_{\mathbf{a}}\mathbf{x} = \mathbf{x}+\mathbf{a}$。我们记空间平移操作诱导的量子变换为$U(\mathbf{a})$。根据狭义相对论，时间坐标和空间坐标会构成一个四维矢量，注意到两个四矢量的内积具有$a_0b_0 - \mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$的形式，而由于时间平移操作$U(\tau)$具有$\exp(i\tau H/\hbar)$的形式，所以空间平移$U(\mathbf{a})$必定具有$\exp(-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar)$的形式，即

$$U(\mathbf{a}) = \exp(-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar). \tag{6.23}$$

其中厄米算符$\mathbf{P}$就是空间平移的生成元。而且，由于时间平移的生成元H是系统的总能量算符，所以空间平移生成元$\mathbf{P}$必定是系统的总动量算符，这是因为根据狭义相对论，总能量和总动量会构成一个四维矢量。一个系统的总动量算符是空间平移的生成元，这就是量子物理中对系统动量的一般性定义，它不仅适用于非相对论粒子的量子力学，而且在量子场论中也依然成立。

根据矢量的合成规则我们知道$U(\mathbf{a})U(\mathbf{b}) = U(\mathbf{a}+\mathbf{b}) = U(\mathbf{b})U(\mathbf{a})$, 也即

$$U(\mathbf{a})U(\mathbf{b}) = U(\mathbf{b})U(\mathbf{a}). \tag{6.24}$$

式中$\mathbf{a}$、$\mathbf{b}$为任意矢量。分别取$\mathbf{a}=\epsilon_1$、$\mathbf{b}=\epsilon_2$为两个无穷小矢量，从而有$U(\epsilon_1)U(\epsilon_2)=U(\epsilon_2)U(\epsilon_1)\Rightarrow(1-i\epsilon_1\cdot\mathbf{P}/\hbar)(1-i\epsilon_2\cdot\mathbf{P}/\hbar)=(1-i\epsilon_2\cdot\mathbf{P}/\hbar)(1-i\epsilon_1\cdot\mathbf{P}/\hbar)$, 从而即有$(\epsilon_1\cdot\mathbf{P})(\epsilon_2\cdot\mathbf{P})=(\epsilon_2\cdot\mathbf{P})(\epsilon_1\cdot\mathbf{P})$, 由于$\epsilon_1$、$\epsilon_2$为两个任意的无穷小矢量，从而即有

$$[P_i,P_j]=0. \tag{6.25}$$

式中$P_i,i=1,2,3$代表总动量算符$\mathbf{P}$的三个直角坐标分量。对于点粒子情形，方程(6.25)是我们早就知道的，但是，上面给出的是一个最具一般性的推导，即使在量子场论中它依然成立。

下面我们回到非相对论点粒子情形，这时候粒子的位置坐标就成了一个定义良好的算符(在量子场论中，由于粒子数不守恒，粒子可以产生湮灭，一个粒子可以转变成多个不同粒子，因此粒子的位置坐标不再是定义良好的算符)，为了简单起见，不妨假设整个系统只有一个粒子，记它的位置算符为$\mathbf{X}$，位置坐标本征值为$\mathbf{x}$，相应的坐标表象波函数为$\psi(\mathbf{x})=\langle\mathbf{x}|\psi\rangle$。则根据空间平移的定义$\phi(\mathbf{x})=U(\mathbf{a})\psi(\mathbf{x})$为空间平移以后的粒子波函数，由于平移以后$\mathbf{x}$点的粒子必定来自于平移之前$\mathbf{x}-\mathbf{a}$点的粒子，所以$\phi(\mathbf{x})$必定等于平移之前$\mathbf{x}-\mathbf{a}$点的波函数$\psi(\mathbf{x}-\mathbf{a})$，从而即有

$$U(\mathbf{a})\psi(\mathbf{x})=\psi(\mathbf{x}-\mathbf{a})=\psi(T_{\mathbf{a}}^{-1}\mathbf{x}). \tag{6.26}$$

等价的，我们也可以认为空间平移算符$U(\mathbf{a})$作用在粒子的坐标算符$\mathbf{X}$上，作用以后$\mathbf{X}$将变换为$\mathbf{X}\to U^{-1}(\mathbf{a})\mathbf{X}U(\mathbf{a})$。我们知道，这种作用相当于将测量粒子坐标的坐标系(仪器的一部分) 向反方向平移$-\mathbf{a}$，这时候粒子坐标将变换为$\mathbf{x}\to\mathbf{x}+\mathbf{a}$，因此位置算符的变换关系实际上必然为$\mathbf{X}\to\mathbf{X}+\mathbf{a}$。也即是说，我们必有

$$U^{-1}(\mathbf{a})\mathbf{X}U(\mathbf{a})=\mathbf{X}+\mathbf{a}. \tag{6.27}$$

同时，由于空间平移对于粒子的动量不会有任何影响，所以我们还必然有

$$U^{-1}(\mathbf{a})\mathbf{P}U(\mathbf{a})=\mathbf{P}. \tag{6.28}$$

由于动量算符都相互对易，所以$\mathbf{P}$与$U(\mathbf{a})=\exp(-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar)$必然相互对易，所以(6.28)式将自动得到满足。为了看清(6.27)式会告诉我们什么结果，我们取$\mathbf{a}=\epsilon$为一个无穷小矢量，从而(6.27)式等价于$(1+i\epsilon\cdot$

$\mathbf{P}/\hbar)\mathbf{X}(1-i\epsilon\cdot\mathbf{P}/\hbar)=\mathbf{X}+\epsilon$，比较这个式子左右两边的一阶无穷小项，就有$i[\epsilon\cdot\mathbf{P}/\hbar,\mathbf{X}]=\epsilon$, 注意到$\epsilon$为任意无穷小量，所以这个结果等价于

$$[X_i,P_j]=i\hbar\delta_{ij}. \tag{6.29}$$

这当然是我们熟知的量子力学对易关系，我们只是用一种更具一般性的方式再一次导出它而已。在坐标表象中，为了满足这样的对易关系，我们可以取$\mathbf{P}=-i\hbar\nabla$(注意我们这里假定只有一个粒子，因此系统的总动量也就是这个粒子的动量)，从而$U(\mathbf{a})=\exp(-\mathbf{a}\cdot\nabla)$，因此如果方程(6.26)能够满足，那我们将有

$$\exp(-\mathbf{a}\cdot\nabla)\psi(\mathbf{x})=\psi(\mathbf{x}-\mathbf{a}). \tag{6.30}$$

但这其实是一个数学恒等式，为了看清楚这一点，我们将$\exp(-\mathbf{a}\cdot\nabla)$泰勒展开为$\exp(-\mathbf{a}\cdot\nabla)=\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{n!}(-\mathbf{a}\cdot\nabla)^n$, 从而上面等式的左边就成为$\exp(-\mathbf{a}\cdot\nabla)\psi(\mathbf{x})=\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{n!}(-\mathbf{a}\cdot\nabla)^n\psi(\mathbf{x})$, 根据函数的泰勒展开公式，这个结果正好等于右边的$\psi(\mathbf{x}-\mathbf{a})$。从而方程(6.26)的确能够成立。

6.2.3　空间旋转

角动量算符代数关系

现在我们来考察对系统的空间旋转操作R，它将会把系统内的某点$\mathbf{x}$旋转到$\mathbf{x}'=R\mathbf{x}$, $\mathbf{x}'$和$\mathbf{x}$之间满足如下关系

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} & & \\ & R & \\ & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix} \tag{6.31}$$

式中R代表3×3的正交旋转矩阵，满足$R^TR=RR^T=1$，$(x,y,z)^T$代表$\mathbf{x}$的三个坐标分量，$(x',y',z')^T$代表$\mathbf{x}'$的三个坐标分量。也即是说，旋转操作和3×3的正交旋转矩阵一一对应。先后两个旋转操作的合成就对应相应两个正交旋转矩阵的矩阵相乘，而所有旋转操作所构成的旋转群，就对应于所有正交旋转矩阵按照矩阵乘法所构成的群，通常记这个群为$SO(3)$群，称为三维空间旋转群。

我们记旋转操作R所诱导的幺正量子变换为$U(R)$。首先考察绕z轴的θ角旋转$R_z(\theta)$。假设先绕z轴旋转θ_1，接着再绕z轴旋转θ_2，显然总的效果

相当于绕z轴旋转$\theta_1+\theta_2$，因此我们有$R_z(\theta_2)R_z(\theta_1)=R_z(\theta_1+\theta_2)$。类似的，对于相应的希尔伯特空间幺正量子变换而言，必有

$$U\big(R_z(\theta_2)\big)U\big(R_z(\theta_1)\big)=U\big(R_z(\theta_1+\theta_2)\big). \tag{6.32}$$

这种可加性意味着，$U\big(R_z(\theta)\big)$必定可以写成

$$U\big(R_z(\theta)\big)=\exp\big(-i\theta J_z/\hbar\big), \tag{6.33}$$

式中厄密算符J_z为绕z轴旋转的生成元，为了看清楚J_z的物理含义，我们注意到这里的绕z轴的转角θ可以看成是一个广义坐标，$R_z(\theta)$就可以看成是沿着这个坐标的“平移”，如此一来$U\big(R_z(\theta)\big)$就是这个“平移”所诱导的量子变换，从而根据上一节对空间平移的讨论，$U\big(R_z(\theta)\big)$必定具有(6.33)式这样的形式，式中的J_z就是与绕z轴的这个坐标θ相对应的系统“总动量”，那也就是绕z轴的总角动量，因为与角度坐标对应的“动量”其实就是角动量。所以，绕z轴旋转的量子变换的生成元J_z就是系统绕z轴的总角动量！

类似的，我们也可以分别考察系统绕x轴和绕y轴的旋转，并得到

$$U\big(R_x(\theta)\big)=\exp\big(-i\theta J_x/\hbar\big),\quad U\big(R_y(\theta)\big)=\exp\big(-i\theta J_y/\hbar\big). \tag{6.34}$$

式中生成元J_x、J_y分别是系统绕x轴和绕y轴的总角动量。这其实就是关于一个量子系统的总角动量算符的一般性定义，它不仅适应于单个粒子，也适应于多粒子体系，甚至适用于量子场论。

我们很容易写出$R_x(\theta)$、$R_y(\theta)$和$R_z(\theta)$的具体表达式。比方说，$R_z(\theta)$的表达式为

$$R_z(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{6.35}$$

类似的，结合x,y,z坐标轴的右手关系，人们也很容易写出$R_x(\theta)$和$R_y(\theta)$。

为了导出角动量算符所满足的代数关系式，我们现在来考察无穷小转动，即假设$\theta=\epsilon$为一无穷小量。则保留到ϵ的二阶项为止，我们有

$$R_z(\epsilon)=1+\epsilon\begin{pmatrix}0 & -1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}+\epsilon^2 C_z. \tag{6.36}$$

等式右边第一项的1代表3×3的单位矩阵，等式右边第三项的C_z是一个与ϵ无关的3×3矩阵，其具体形式与我们将要进行的推导无关。类似的，我们有

$$R_x(\epsilon) = 1+\epsilon\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}+\epsilon^2 C_x. \tag{6.37}$$

以及

$$R_y(\epsilon) = 1+\epsilon\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0\end{pmatrix}+\epsilon^2 C_y. \tag{6.38}$$

利用这些式子我们容易将表达式$R_y(-\epsilon)R_x(-\epsilon)R_y(\epsilon)R_x(\epsilon)$计算到$\epsilon$的平方阶(更高阶全部忽略)，结果为

$$R_y(-\epsilon)R_x(-\epsilon)R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = R_z(-\epsilon^2). \tag{6.39}$$

我们知道旋转操作所诱导的幺正量子变换必定构成旋转群的表示，也即是说，幺正量子变换$U(R)$将保持矩阵R之间的乘法关系。从而根据上面的(6.39)式，我们必定有

$$U\big(R_y(-\epsilon)\big)U\big(R_x(-\epsilon)\big)U\big(R_y(\epsilon)\big)U\big(R_x(\epsilon)\big) = U\big(R_z(-\epsilon^2)\big). \tag{6.40}$$

注意到$\exp\big(-i\epsilon J/\hbar\big) = 1-i\epsilon J/\hbar-\frac{1}{2}\epsilon^2 J^2/\hbar^2+...$，代入上面的(6.40)式，并比较等号两边关于$\epsilon^2$的项，我们就可以得到

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z. \tag{6.41}$$

利用三个直角坐标间的轮换关系$x\to y, y\to z, z\to x$，我们可以类似地得到

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y. \tag{6.42}$$

利用列维-西维塔符号ϵ_{ijk}以及求和约定(后文也将一直使用求和约定)，我们也可以将这几个式子统一写成

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k. \tag{6.43}$$

这就是**角动量算符的基本代数关系**。注意，和总动量算符不同，总角动量算符不同分量之间是不可对易的。

矢量算符

我们知道，旋转操作R所诱导的量子变换$U(R)$可以等价地认为是作用在物理量算符上。假设我们有一个矢量算符$\mathbf{V}$, 其三个直角坐标分量为$V_i, i = 1,2,3$，则在量子变换$U(R)$的作用下这些分量将变换为$V_i \to U^{-1}(R)V_iU(R)$。在物理上，这也就是保持量子系统不动，而将我们观测系统的仪器反向旋转，特别是将测量系统各物理矢量分量的直角坐标系反向旋转。由于这样的坐标系反向旋转，矢量分量$V_i, i = 1,2,3$将变换为，$V_i \to R_{ij}V_j$(式中R_{ij}是3×3的旋转矩阵R的矩阵元), 从而我们必有

$$U^{-1}(R)V_iU(R) = R_{ij}V_j. \tag{6.44}$$

由于各种书的定义略有区别，初学者往往搞不清，(6.44)这样的式子是应该写成(6.44)式这种形式还是应该写成$U^{-1}(R)V_iU(R) = (R^{-1})_{ij}V_j$的形式(或者等价地$U(R)V_iU^{-1}(R) = R_{ij}V_j$的形式)。下面我们提供一个实质性的数学判断方式。

假设我们将表达式(6.44)错误地写成了

$$U^{-1}(R)V_iU(R) = (R^{-1})_{ij}V_j, \tag{6.45}$$

我们该如何发现错误呢? 方法很简单，我们可以考虑接连进行的两个旋转操作$U(R_1)$和$U(R_2)$，根据错误表达式(6.45)，在$U(R_1)$作用下我们将有

$$U^{-1}(R_1)V_iU(R_1) = (R_1^{-1})_{ij}V_j, \tag{6.46}$$

接着再对这个式子进行$U(R_2)$作用，从而就有

$$\begin{aligned}
& U^{-1}(R_2)U^{-1}(R_1)V_iU(R_1)U(R_2) \\
= \ & (R_1^{-1})_{ij}U^{-1}(R_2)V_jU(R_2),
\end{aligned} \tag{6.47}$$

再次利用(6.45)式就有

$$\begin{aligned}
& U^{-1}(R_2)U^{-1}(R_1)V_iU(R_1)U(R_2) \\
= \ & (R_1^{-1})_{ij}U^{-1}(R_2)V_jU(R_2) \\
= \ & (R_1^{-1})_{ij}(R_2^{-1})_{jk}V_k,
\end{aligned} \tag{6.48}$$

整理一下，我们可以将这个式子重写为

$$\big(U(R_1)U(R_2)\big)^{-1}V_i\big(U(R_1)U(R_2)\big) = \big((R_2R_1)^{-1}\big)_{ik}V_k, \tag{6.49}$$

利用$U(R_1)U(R_2) = U(R_1R_2)$, 这也就是

$$\big(U(R_1R_2)\big)^{-1}V_i\big(U(R_1R_2)\big) = \big((R_2R_1)^{-1}\big)_{ik}V_k. \tag{6.50}$$

但这个最终的式子肯定是错的！原因在于$U(R)$构成了旋转群的表示，而表示的要义就在于保持乘法关系，但是从(6.50)中我们清楚地看到，等式左边两个旋转矩阵的乘法关系是R_1R_2，但右边的乘法关系却是R_2R_1，两边的乘法关系反过来了，这就不符合群表示的数学定义，因此(6.50)式是错的！从而作为出发点的(6.45)式也必定是错的！

相反，完全类似的推导过程，但是假如我们的出发点是正确的(6.44)式，那最终我们将得到

$$\big(U(R_1R_2)\big)^{-1}V_i\big(U(R_1R_2)\big) = (R_1R_2)_{ik}V_k. \tag{6.51}$$

很显然，这里乘法关系完全对得上，没有任何错误。总之，在我们确立(6.44)式这一类方程时，实质性的要点是要确保$U(R)$构成一个群表示！

回到(6.44)式。我们取R为绕z轴的无穷小旋转$R_z(\epsilon)$, 利用$U\big(R_z(\epsilon)\big) = 1 - i\epsilon J_z/\hbar + ...$，我们就可以由(6.44)式得到

$$(1 + i\epsilon J_z/\hbar)V_i(1 - i\epsilon J_z/\hbar) = R_z(\epsilon)_{ij}V_j. \tag{6.52}$$

代入(6.36)式，并比较上面方程左右两边关于ϵ的项，就可以得到

$$[J_z, V_x] = i\hbar V_y, \quad [J_z, V_y] = -i\hbar V_x, \quad [J_z, V_z] = 0. \tag{6.53}$$

同理，我们也可以进一步考虑绕x轴和绕y轴作无穷小旋转的情形，最终的所有结果可以归纳如下

$$[J_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k. \tag{6.54}$$

(6.54)式就是矢量算符与角动量算符之间的代数关系式，反过来，满足这样的代数关系的算符V_i就是矢量算符。比较(6.54)式和(6.43)式，我们发现，角动量算符J_i本身其实就是一种特殊的矢量算符，这正好印证了角动

量是一个矢量。从而我们可以对角动量算符使用矢量形式$\mathbf{J}$。进而我们又可以一般性地把绕$\mathbf{n}$轴($\mathbf{n}$为单位矢量)旋转的量子变换写成

$$U(\mathbf{n},\theta) = \exp(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar). \tag{6.55}$$

另外，我们也知道，一个系统的总动量算符$\mathbf{P}$必定是矢量算符，从而我们必有

$$[J_i, P_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}P_k. \tag{6.56}$$

轨道角动量

以上所有代数关系都是一般性的，我们前面谈论的始终是一般性的抽象的角动量算符。现在我们开始来研究一些具体的角动量算符。首先是轨道角动量算符。我们将以单粒子体系为例，这时候我们其实已经知道轨道角动量算符的表达式为$\mathbf{L} = \mathbf{X}\times\mathbf{P}$。但这是沿用了经典力学中对轨道角动量的定义。现在我们有了关于角动量的一般性量子力学定义，我们想试试能不能从这些一般性的量子力学结果中推导出这个轨道角动量算符的表达式。为此，我们将具体地选取坐标表象来处理问题。

在坐标表象中，当我们将系统旋转R时，系统的波函数将变换为$\psi(\mathbf{x})\to\psi'(\mathbf{x}) = U(R)\psi(\mathbf{x})$。旋转以后$\mathbf{x}$点的波函数$\psi'(\mathbf{x})$必定来源于旋转之前$R^{-1}\mathbf{x}$点的波函数$\psi(R^{-1}\mathbf{x})$ (因为原来的$R^{-1}\mathbf{x}$点刚好旋转到$\mathbf{x}$点)，即$\psi'(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x})$，从而我们必有

$$U(R)\psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x}). \tag{6.57}$$

人们可以验证这一方程的确符合$U(R)$是旋转群的表示。相反，如果人们将这样的方程写成$U(R)\psi(\mathbf{x}) = \psi(R\mathbf{x})$, 那就会和群表示相矛盾！

现在，我们考虑将系统绕$\mathbf{n}$轴旋转一个无穷小角度ϵ，则粒子的坐标将旋转为$\mathbf{x}\to\mathbf{x}+\epsilon\mathbf{n}\times\mathbf{x}$。根据(6.55)式，这时候相应的幺正变换为$U(\mathbf{n},\epsilon) = \exp(-i\epsilon\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar) = 1 - i\epsilon\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar + ...$, 从而方程(6.57)将变成

$$(1 - i\epsilon\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar)\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}-\epsilon\mathbf{n}\times\mathbf{x}). \tag{6.58}$$

根据泰勒展开，这个等式右边是$\psi(\mathbf{x}-\epsilon\mathbf{n}\times\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) - (\epsilon\mathbf{n}\times\mathbf{x})\cdot\nabla\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) - \epsilon\mathbf{n}\cdot(\mathbf{x}\times\nabla)\psi(\mathbf{x})$, 与等式(6.58)左边相比较我们就能得到，$\mathbf{J} = -i\hbar\mathbf{x}\times\nabla$, 这正是我们想要推导的轨道角动量算符的表达式，不过为了强

调它是轨道角动量算符，我们常常将之记为$\mathbf{L}$，从而我们就用量子力学的办法推导出了

$$\mathbf{L} = -i\hbar\mathbf{x} \times \nabla. \tag{6.59}$$

算符$\mathbf{L}$既然是角动量算符，那它当然满足角动量算符的一般代数关系(6.43)，我们可以将这个代数关系重写如下

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \tag{6.60}$$

不过，在这一特殊情况下，这一代数关系也可以根据$\mathbf{L} = \mathbf{X} \times \mathbf{P}$的构造直接验证。

自旋角动量

我们知道除了轨道角动量以外，电子还有一个内禀的自旋角动量，相应的角动量算符为$\mathbf{S}$，它当然也满足代数关系(6.43)，通常写作$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$。实际上我们在第二章中就是从这一代数关系出发开始讨论电子自旋算符和泡利算符的。不过，当时我们无法给出这一代数关系的推导，这个缺陷到现在才算补上。

假设我们仅仅关心电子的自旋，那么量子态就一定能写成$|\psi\rangle = \psi_\uparrow|\uparrow\rangle + \psi_\downarrow|\downarrow\rangle$的形式，式中$\psi_\uparrow, \psi_\downarrow$是两个复的叠加系数。根据(6.55)式，当我们将系统绕$\mathbf{n}$轴旋转θ角时，自旋量子态$|\psi\rangle$将变换为

$$|\psi\rangle \to \exp\big(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}/\hbar\big)|\psi\rangle = \exp\big(-i\frac{1}{2}\theta\mathbf{n}\cdot\vec{\sigma}\big)|\psi\rangle. \tag{6.61}$$

当然，我们也可以在$\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$表象中将电子的自旋态表示成列矢量$\left(\begin{smallmatrix}\psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow\end{smallmatrix}\right)$，人们通常称这一两分量列矢量为旋量，或者自旋波函数。很显然，当我们将系统绕$\mathbf{n}$轴旋转θ角时，旋量将变换为

$$\begin{pmatrix}\psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow\end{pmatrix} \to \exp\big(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}/\hbar\big)\begin{pmatrix}\psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow\end{pmatrix} = \exp\big(-i\frac{1}{2}\theta\mathbf{n}\cdot\vec{\sigma}\big)\begin{pmatrix}\psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow\end{pmatrix}. \tag{6.62}$$

当然，现在式中的$\mathbf{S}$应该理解为2×2的表示矩阵，式中的$\vec{\sigma}$应该理解为泡利矩阵。我们之所以没有更换记号是因为人们很容易根据上下文确定这些东西是抽象的算符还是矩阵。

根据我们在第三章习题中的一个结果，

$$\exp\big(-i\frac{1}{2}\theta\mathbf{n}\cdot\vec{\sigma}\big) = \cos(\frac{\theta}{2}) - i(\mathbf{n}\cdot\vec{\sigma})\sin(\frac{\theta}{2}). \tag{6.63}$$

因此，$\exp\big(-i\frac{1}{2}2\pi\mathbf{n}\cdot\vec{\sigma}\big) = -1!$, 也就是说，对于电子自旋态而言，旋转$2\pi$角会出一个负号，而不是不变。只有旋转$4\pi$角才能保证自旋态不变，因为$\exp\big(-i\frac{1}{2}4\pi\mathbf{n}\cdot\vec{\sigma}\big) = 1$。也即是说，考虑到自旋，电子要旋转720度(而不是360度)才能回到原初的状态！从经典物理的角度来看，这当然是不可思议的。

电子总角动量

现在，我们同时考虑电子的自旋自由度和空间自由度，根据第3章中所学的知识我们知道，这时候电子的波函数应该推广成两分量的旋量波函$\Psi(\mathbf{x}) = \binom{\psi_\uparrow(\mathbf{x})}{\psi_\downarrow(\mathbf{x})}$。注意, 旋量波函数$\Psi(\mathbf{x})$有双重身份，它既是一个旋量，同时又是空间坐标的波函数。因此，结合(6.57)式和(6.62)式我们可以知道，当我们将系统绕$\mathbf{n}$轴旋转θ角时，旋量波函数将变换为

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{x}) \to U(\mathbf{n},\theta)\Psi(\mathbf{x}) &= \exp(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar)\Psi(\mathbf{x}) \\ &= \exp\big(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}/\hbar\big)\Psi\big(R^{-1}(\mathbf{n},\theta)\mathbf{x}\big). \end{aligned} \tag{6.64}$$

式中$R(\mathbf{n},\theta)$表示绕$\mathbf{n}$轴旋转θ角的3×3正交旋转矩阵。

如果我们取$\theta = \epsilon$为一个无穷小旋转，那根据上面的(6.64)式，我们就有

$$(1 - i\epsilon\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}/\hbar)\Psi(\mathbf{x}) = (1 - i\epsilon\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}/\hbar)\Psi(\mathbf{x} - \epsilon\mathbf{n}\times\mathbf{x}). \tag{6.65}$$

将$\Psi(\mathbf{x} - \epsilon\mathbf{n}\times\mathbf{x})$泰勒展开，并比较上面式子左右两边的$\epsilon$相关项，我们就可以得到

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} + (-i\hbar\mathbf{x}\times\nabla) = \mathbf{S} + \mathbf{L}. \tag{6.66}$$

这个式子告诉我们，电子的总角动量其实是轨道角动量与自旋角动量的和！当然，其实自旋角动量$\mathbf{S}$和轨道角动量$\mathbf{L}$作用的对象并不相同，自旋角动量是作用在两分量旋量空间，而轨道角动量是作用在坐标空间。

6.2.4 习题

1. 空间标度变换可以定义为$\mathbf{x}\to e^{\lambda}\mathbf{x}$，其中$\lambda$为一个实参数。(1) 请证明相应的希尔伯特空间量子变换可以写成$e^{-i\lambda D}$的形式，其中D称为尺度变换生成元。(2)请导出对易子$[D,\mathbf{P}]$和对易子$[D,\mathbf{J}]$。

2. 在球坐标中，波函数可以写成$\psi(r,\theta,\phi)$的形式，根据绕z轴的旋转变换在波函数上的作用

$$e^{-i\varphi L_z/\hbar}\psi(r,\theta,\phi)=\psi(r,\theta,\phi-\varphi), \tag{6.67}$$

请导出球坐标中轨道角动量算符$L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$。

3. 假设我们定义空间平移算符$U(\mathbf{a})$在位置本征态上的作用为$U(\mathbf{a})|\mathbf{x}\rangle=|\mathbf{x}+\mathbf{a}\rangle$。并定义$U(\mathbf{a})\psi(\mathbf{x})=\langle\mathbf{x}|U(\mathbf{a})|\psi\rangle$。请据此从数学上证明：(1) $U(\mathbf{a})\psi(\mathbf{x})=\psi(\mathbf{x}-\mathbf{a})$。(2) $U^{-1}(\mathbf{a})\mathbf{X}U(\mathbf{a})=\mathbf{X}+\mathbf{a}$。

4. 我们知道空间旋转变换在电子自旋量子态上的作用为$\exp\big(-i\frac{1}{2}\theta\mathbf{n}\cdot\vec{\sigma}\big)$, 但是我们也可以利用三个欧拉角将任意一个旋转变换写成，$\exp\big(-i\frac{1}{2}\alpha\sigma_z\big)\exp\big(-i\frac{1}{2}\beta\sigma_y\big)\exp\big(-i\frac{1}{2}\gamma\sigma_z\big)$，请在数学上将这两种不同的写法联系起来。

5. 对于轨道角动量算符$\mathbf{L}=\mathbf{X}\times\mathbf{P}$，请利用对易关系$[X_i,P_j]=i\hbar\delta_{ij}$ 验证角动量的代数关系$[L_i,L_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$。

6. 我们可以将3×3的正交旋转矩阵$R(\mathbf{n},\theta)$写成$R(\mathbf{n},\theta)=\exp(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathcal{L}/\hbar)$。请证明：(1)$(\mathcal{L}_i)_{jk}=-i\hbar\epsilon_{ijk}$。(2)请验证矩阵$\mathcal{L}$满足角动量代数关系$[\mathcal{L}_i,\mathcal{L}_j]=i\hbar\mathcal{L}_k$。(3)请证明坐标的无穷小旋转$\mathbf{x}\to\exp(-i\epsilon\mathbf{n}\cdot\mathcal{L}/\hbar)\mathbf{x}$可以写成$\mathbf{x}\to\mathbf{x}+\epsilon\mathbf{n}\times\mathbf{x}$。

6.3　对称性

到现在为止，虽然我们已经讲述了空间平移和空间旋转等操作，以及它们诱导的量子变换。但是我们并没有处理空间平移对称性和空间旋转对称性，实际上，我们还没有涉及对称性。那么，什么是量子系统的对称性呢？首先，对称性当然相应于对量子系统进行一个变换，因此对称性必须对应于量子变换。其次，这样的量子变换必须保持系统的动力学规律不变，我们称之为对称变换。如果我们讨论的是包含时间平移对称性在内的时空对称性，那这第二点要求常常可以放松为，这样的量子变换构成时空对称群的表示。这一要求的含义是，我们的量子系统的动力学规律在时空对称操作下是协变的(而不一定不变)。但是，在这一节的正文中，我们讨论的实际上都是动力学规律不变的情形，不过在后面的补充内容中，我们讨论了一个动力学规律协变的例子，即非相对论系统的伽利略推动对称性。

6.3.1 对称性与守恒定律

在量子力学中，所谓的动力学规律，其实就是指量子态的演化规律。这里我们假设系统的哈密顿量H不显含t，从而量子态从0时刻到t时刻的演化规律就是

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle. \tag{6.68}$$

假设$U(T)$为系统的对称变换(这一对称变换由对系统的对称操作T诱导)，在它的作用下$|\psi(0)\rangle$将变换为$|\psi'(0)\rangle$，$|\psi'(0)\rangle = U(T)|\psi(0)\rangle$，类似的，$|\psi(t)\rangle$将变换为$|\psi'(t)\rangle$ (从而$U(T)$不包含时间反演，关于时间反演对称性我们后面会单独讨论), $|\psi'(t)\rangle = U(T)|\psi(t)\rangle$。所谓的对称变换保持系统的动力学规律不变，指的就是变换以后的$|\psi'(0)\rangle$和$|\psi'(t)\rangle$之间同样按照下式演化

$$|\psi'(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi'(0)\rangle. \tag{6.69}$$

显然这个方程意味着$U(T)|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}U(T)|\psi(0)\rangle$, 代入$|\psi(t)\rangle$的演化规律即有，$U(T)e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar}U(T)|\psi(0)\rangle$, 也即

$$U(T)e^{-iHt/\hbar} = e^{-iHt/\hbar}U(T). \tag{6.70}$$

也即是说，对称变换需要和时间演化算符对易。将$e^{-iHt/\hbar}$泰勒展开到t的一阶项并代入(6.70)式就有

$$U(T)H = HU(T). \tag{6.71}$$

即对称变换必定和哈密顿算符对易，或者等价地说哈密顿算符在对称变换下不变，即$U^{-1}(T)HU(T) = H$。

很明显，时间平移算符$U(\tau)$与$e^{-iHt/\hbar}$显然对易。因此这就告诉我们，哈密顿量不显含t的系统必定有时间平移对称性。而且很显然，对于这样的系统，如果我们计算哈密顿算符H(也即能量算符)在任意两个态$|\psi(t)\rangle$和$|\phi(t)\rangle$上的矩阵元，那么显然有$\langle\phi(t)|H|\psi(t)\rangle = \langle\phi(0)|H|\psi(0)\rangle$不依赖于时间$t$，也即是说，系统的能量是守恒的。看出这一点的更快方式是注意到H在海森堡绘景里面依然是H, 从而海森堡绘景的能量算符H不随时间演化，这就说明了系统的能量守恒。总之，有时间平移对称性的系统，就必定有能量守恒。

时间平移对称性当然是连续对称性。现在，假设我们考察的对称性是一个任意的连续对称性，我们考虑无穷小对称变换$U(\epsilon) = 1 + i\epsilon G + ...$，式中$G$为这个连续对称变换的生成元。代入(6.71)式，并比较方程两边有关ϵ的项，我们马上就能得到

$$[G, H] = 0. \tag{6.72}$$

即连续对称性的生成元必定与系统的哈密顿算符对易。当然，正如我们会在补充内容中看到的，对于对称变换使得动力学规律协变的情形，情况可能会有些不同。(6.72)式就告诉我们，算符G在海森堡绘景中依然为G, 从而海森堡绘景中的连续对称性生成元不随时间演化，这就意味着，G是一个守恒量。因此，任何连续对称性的生成元都是守恒量。连续对称性与守恒量之间有对应关系，这当然就是量子力学版本的诺特定理！

因此，如果系统有空间平移对称性，那么必定有

$$[\mathbf{P}, H] = 0, \tag{6.73}$$

同时系统总动量$\mathbf{P}$必定是守恒量。反过来也一样，如果$[\mathbf{P}, H] = 0$，那系统就必定有空间平移对称性，这是因为这时候空间平移变换$U(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}$必定和时间演化算符对易。同样的，如果系统有空间旋转对称性，那就必定有

$$[\mathbf{J}, H] = 0, \tag{6.74}$$

同时系统的总角动量$\mathbf{J}$必定守恒。反过来，如果$[\mathbf{J}, H] = 0$，那系统就必定有空间旋转对称性。

下面我们给出一个具体的具有空间平移对称性的例子。考虑一个多粒子体系，假设不存在外场，并且粒子间的相互作用势能仅仅依赖于它们的相对位置，也就是仅仅依赖于粒子之间的坐标差。一个具体的例子是具有如下哈密顿量的多粒子体系

$$H = \sum_n \frac{\mathbf{P}_n^2}{2m_n} + \sum_{n<m} V(\mathbf{X}_n - \mathbf{X}_m), \tag{6.75}$$

式中$\mathbf{X}_n$为第n个粒子的位置算符，$\mathbf{P}_n$为第n个粒子的动量算符。由于空间平移算符$U(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar}$($\mathbf{P} = \sum_n \mathbf{P}_n$为系统总动量算符)有如下代数关系

$$U^{-1}(\mathbf{a})\mathbf{X}_n U(\mathbf{a}) = \mathbf{X}_n + \mathbf{a}, \quad U^{-1}(\mathbf{a})\mathbf{P}_n U(\mathbf{a}) = \mathbf{P}_n. \tag{6.76}$$

所以很显然，$U^{-1}(\mathbf{a})HU(\mathbf{a})=\sum_n \frac{\mathbf{P}_n^2}{2m_n}+\sum_{n<m}V\big((\mathbf{X}_n-\mathbf{a})-(\mathbf{X}_m-\mathbf{a})\big)=H$，从而这样的系统具有空间平移不变性，其总动量$\mathbf{P}$必定守恒。

至于具有空间旋转对称性的例子，氢原子就是一个很好的例子。这是因为氢原子的库伦势场是一个中心力场，它是球对称的，因此当然在空间旋转之下保持不变。从而对于氢原子，必定有$[\mathbf{L},H]=0$, 角动量必定守恒。这其实就是为什么我们在求解氢原子的时候用角动量量子数l和m来标记系统量子态的原因，因为角动量守恒意味着这些量子数是所谓的“好量子数”。

实际上，任何一个孤立系统都有时间平移对称性、空间平移对称性以及空间旋转对称性，从而其总能量、总动量以及总角动量都必然是守恒的。能量守恒、动量守恒、以及角动量守恒其实源于时空的性质，因此它们才是自然界中最为基本的规律。

6.3.2 相位不变性与电荷守恒

除了能量守恒、动量守恒以及角动量守恒之外，自然界的另一条基本守恒定律是电荷守恒。为了从基本的微观层次讨论电荷守恒的起源，我们需要从微观粒子谈起，物质世界是由微观粒子组成的，而每一个微观粒子都具有一个确定的电荷。用量子力学的话来说，微观粒子是电荷的本征态。假设我们考虑一个任意的多粒子态，它由带电量分别为$q_1,q_2,...q_N$的N个粒子组成[6]，现在我们忽略每一个粒子的其它量子数，将这个多粒子态简记为$|q_1,q_2,...q_N\rangle$(粒子的种类和数目N都可变), 它当然是电荷的一个本征态。实际上，任何多粒子态都是电荷的本征态，电荷本身已经成了我们对微观粒子定义的一部分。

现在，对于任意多粒子态$|q_1,q_2,...q_N\rangle$，我们可以定义一个相位变换

$$|q_1,q_2,...q_N\rangle \to e^{iq_1\alpha}e^{iq_2\alpha}...e^{iq_N\alpha}|q_1,q_2,...q_N\rangle. \tag{6.77}$$

我们将会看到，如果这样的相位变换是世界的对称性，那就必然有电荷守恒。为了看清楚这一点，我们定义电荷算符在任意多粒子态$|q_1,q_2,...,q_N\rangle$上的作用为

$$Q|q_1,q_2,...q_N\rangle=(\sum_{n=1}^{N}q_n)|q_1,q_2,...q_N\rangle, \tag{6.78}$$

[6]在量子场论中，由于真空极化所产生的屏蔽效应，我们在不同的距离上测量粒子的电荷结果其实稍有区别，这里的电荷是指在离粒子足够远时测得的。

这样的式子其实就给出了电荷算符Q的定义。根据(6.78)式，我们可以将相位变换(6.77)重写成$|q_1, q_2, ...q_N\rangle \to e^{i\alpha Q}|q_1, q_2, ...q_N\rangle$, 这样重写以后的方程显然对于所有的多粒子态都成立，因此它也对希尔伯特空间的任意量子态$|\psi\rangle$成立(因为世界由微观粒子组成，任意量子态都必定是一些多粒子态的线性叠加)，从而原来的相位变换(6.77)即相应于希尔伯特空间的幺正变换

$$|\psi\rangle \to e^{i\alpha Q}|\psi\rangle. \tag{6.79}$$

如果我们的世界在形如(6.77)式的相位变换下对称，那就等价于说，幺正变换(6.79)是世界的一个对称性。由于相位参数α连续可变，所以这当然是一个连续对称性。根据我们在上一小节中关于对称性与守恒定律的讨论。这一连续对称性就意味着

$$[Q, H] = 0. \tag{6.80}$$

从而电荷算符Q是一个守恒量。

由于Q是守恒量，在时间演化之下，它的本征值必定要保持不变。假设某个时间演化过程使得多粒子态$|q_1, q_2, ...q_N\rangle$演化成了多粒子态$|q'_1, q'_2, ..., q'_M\rangle$。那$Q$的本征值保持不变就意味着$\sum_{n=1}^N q_n = \sum_{m=1}^M q'_m$。这就是我们通常所说的电荷守恒。总之，我们对电荷守恒起源的解释是，因为我们的世界具有$e^{i\alpha Q}$的对称性，或者说我们的世界具有某种相位对称性。

那们，为什么我们世界的电荷是量子化的呢？也就是说，为什么所有带电粒子的电荷都是某个最小电荷单元的整数倍呢？解释也很简单，取决于对称变换$e^{i\alpha Q}$的相位参数，如果相位参数α的取值范围是整个实轴，那就不会有什么电荷量子化。这时候我们称相应的相位对称性为具有对称群$\mathbb{R}^*$，$\mathbb{R}^*$就是非零实数的集合，它在实数乘法下构成一个群，$\mathbb{R}^*$的群元就是e^α。但是，如果相位参数α具有某种周期性，比方说周期为$2\pi/e$, 那就必然有电荷量子化。因为这时候我们将有$e^{i(2\pi/e)Q} = e^{i0\cdot Q} = 1$。从而$Q$的本征值只可能取$ne, n \in \mathbb{Z}$，这就是电荷量子化，$e$就是最小的电荷单元！这时候我们称相应的相位对称性为具有对称群$U(1)$，它的群元是$e^{ie\alpha}$。

所以，之所以我们有电荷守恒和电荷量子化，是因为我们的世界具有某种$U(1)$对称性！

6.3.3　对称性与能级简并

前面我们学习氢原子的时候曾经发现，不考虑自旋，氢原子的能级简

并度为n^2。这些能级简并从何而来呢？回答是，从对称性中来。

为了理解这一点，假设我们考虑一个量子系统的某个能级E, E就是这个能级的能量本征值，本征方程为

$$H|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle, \tag{6.81}$$

式中$|\psi_E\rangle$为任意一个本征值为E的本征态。假设系统有对称性$U(T)$, T表示对系统的对称操作，它们构成一个对称群$\mathcal{G}$，$U(T)$就是这个对称群在希尔伯特空间的表示。当然，$HU(T) = U(T)H$。

现在，我们将$U(T)$作用在$|\psi_E\rangle$上，得到一个新的态$U(T)|\psi_E\rangle$，由于我们有$H\big(U(T)|\psi_E\rangle\big) = U(T)H|\psi_E\rangle = E\big(U(T)|\psi_E\rangle\big)$, 所以很显然，$(U(T)|\psi_E\rangle)$也是系统的一个本征值为$E$的能量本征态。由于这里的$T$是任意的，只要是对称操作群$\mathcal{G}$中的一个群元即可，所以一般来说，总有某个$T$会使得$\big(U(T)|\psi_E\rangle\big)$与$|\psi_E\rangle$是两个不同的态。因此，一般来说，由于对称群$\mathcal{G}$的存在，能级$E$将会是简并的，我们记所有简并态所张成的希尔伯特子空间为$\mathcal{H}_E$。

很显然，上文的$|\psi_E\rangle$属于$\mathcal{H}_E$中的某个任意矢量，而且对于任意的$T \in \mathcal{G}$, $\big(U(T)|\psi_E\rangle\big)$也是$\mathcal{H}_E$中的矢量。因此也就是说，$\mathcal{H}_E$在所有可能的对称变换$U(T)$的作用下封闭！这就意味着，我们可以将任意对称变换$U(T)$限制在$\mathcal{H}_E$之内，限制以后的$U(T)$依然是$\mathcal{H}_E$空间上的一个对称变换。数学家称这样的$\mathcal{H}_E$空间为对称群$\mathcal{G}$的表示空间。因为当我们将$\mathcal{G}$在整个希尔伯特空间的表示$U(\mathcal{G})$限制在这个子空间$\mathcal{H}_E$以后，我们依然会得到$\mathcal{G}$的一个表示(因为限制以后的$U(\mathcal{G})$在$\mathcal{H}_E$上的作用封闭)，虽然这个表示要小一些[7]。所以对于一个有对称性的系统，**简并子空间将构成对称群的表示空间**。

上面我们发现，将整个希尔伯特空间限制到简并子空间$\mathcal{H}_E$以后，我们会得到对称群$\mathcal{G}$的一个小一些的表示。但是，表示空间$\mathcal{H}_E$可能依然不是最小的，也就是说，我们能够把$\mathcal{H}_E$正交分解成多个(比方说N个)更小的子空间，并且使得每一个这样的子空间都依然是对称群$\mathcal{G}$的表示空间，也即是说，可以让$\mathcal{H}_E$正交分解以后的这些子空间在任意$U(T)$的作用下自身都保持封闭。我们记分解以后的第i个子空间为$\mathcal{H}_{E,i}$, 并要求它同时是对称群$\mathcal{G}$的表示空间(在任意$U(T)$作用下具有封闭性)，则我们可以把这样的正交分解表示成如下方程

$$\mathcal{H}_E = \mathcal{H}_{E,1} \oplus \mathcal{H}_{E,2} \oplus .... \oplus \mathcal{H}_{E,N}, \tag{6.82}$$

[7]指表示空间维数小一些。

人们称$\mathcal{H}_E$可以分解为N个子空间$\mathcal{H}_{E,i}, i=1,2,...,N$的直和。可以想象，我们可以将这种正交分解过程进行到底，使得最终分解出来的每一个子空间$\mathcal{H}_{E,i}$本身是“最小”的，也就是说，$\mathcal{H}_{E,i}$不再能进一步正交分解成更小的子空间的直和，并同时让这些更小的子空间在任意$U(T)$作用下都具有封闭性。这时候，最终的这些表示空间$\mathcal{H}_{E,i}$就称为不可约表示空间，可以说不可约表示空间就是构成群表示空间的“原子”。而我们将$U(\mathcal{G})$限制在这些不可约表示空间上所得到的群表示就称之为对称群$\mathcal{G}$的不可约表示！总之，不可约表示空间的要点在于：第一，它在群作用下具有封闭性，是表示空间。第二，它不能进一步分解成更小的表示空间。

比方说，我们已经知道，氢原子具有旋转对称性，因此它任意第n能级的简并空间$\mathcal{H}_n$都必须是旋转对称群(也就是$SO(3)$群)的表示空间, 这里n表示氢原子的主量子数，相应的能量本征值为$E_n = E_1/n^2$。但是，$\mathcal{H}_n$本身不是旋转对称性的不可约表示空间。旋转对称性的不可约表示空间的角动量大小得保持恒常，也就是说，旋转对称性的不可约表示空间得是$\mathbf{L}^2$算符的简并空间。从前面对氢原子的学习中我们知道，$\mathbf{L}^2$的本征值为$l(l+1)\hbar^2$, 每一个不同的量子数l(l称作角动量量子数)对应一个不同的本征值。而且我们还知道，$\mathbf{L}^2$的本征态空间是简并的，所有l量子数相同，但是m量子数(m称作磁量子数，它由L_z的本征值$m\hbar$确定)不同的态都具有相同的$\mathbf{L}^2$本征值$l(l+1)\hbar^2$，我们通常记这些简并态为$|lm\rangle$态。$\mathbf{L}^2$的简并空间简并度为$2l+1$，因为给定l，m有$2l+1$个不同取值。所有这$2l+1$个正交归一的$\mathbf{L}^2$简并态$|lm\rangle, m = 0, \pm 1, ..., \pm l$就张成了旋转对称性的一个不可约表示空间，因此，旋转对称性的不可约表示空间可以用量子数l来标记。从对氢原子的学习中我们还知道，对于每一个氢原子能级n，l可以有n个不同取值，$l = 0, 1, ..., n-1$, 它们的能量本征值都是简并的。因此我们知道，氢原子能级的简并子空间$\mathcal{H}_n$可以分解成n个旋转群的不可约表示空间$\mathcal{H}_{n,l}$的直和，即

$$\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_{n,0} \oplus \mathcal{H}_{n,1} \oplus ... \oplus \mathcal{H}_{n,l} \oplus ... \oplus \mathcal{H}_{n,n-1}. \tag{6.83}$$

对于每一个其简并能级可以作形如(6.82)式这样分解的量子系统，我们可以设想给它加上一些微扰V，如果这些微扰保持系统原来的对称性，也就是说，微扰V与任意对称变换$U(T)$对易，则微扰以后的系统哈密顿量$H+V$将依然与$U(T)$对易。从前面第五章的学习中我们知道，微扰可以使得简并能级产生分裂，一般来说，这将导致原来相互简并的N个不可约表示空间$\mathcal{H}_{E,i}, i = 1,2,...,N$的能量本征值产生分裂。但是，假如$H+V$依

然与所有的$U(T)$对易，那微扰以后系统的能级一般来说依然会存在简并，其简并子空间依然能够分解成不可约表示空间的直和，从而这也就是说原来的不可约表示空间$\mathcal{H}_{E,i}$在微扰以后将会依然简并(因为它无法再分解)。可以设想，在一些相当一般性的对称微扰(这些微扰都与任意对称变换$U(T)$对易)之下，所有可能分裂的能级都将分裂开来，最终系统的每一个能级简并空间将正好包含对称群$\mathcal{G}$的仅仅一个不可约表示空间。只要微扰不破坏系统原来的对称性，那这些不可约表示空间的能级简并就将无法被分裂。

对于氢原子来说，我们可以设想给它加上一个相当一般性的球对称微扰$\varepsilon V(r)$, 由于球对称，这样的微扰当然保持系统原来具有的旋转对称性。在这样的微扰作用下，氢原子的能级将变成$E_{n,l}$, 也就是说，不同l量子数的态将不再简并。因此，这时候每一个系统能级的简并空间将对应唯一一个旋转对称性的不可约表示空间$\mathcal{H}_{n,l}$。也就是说，在一般性的球对称微扰$\varepsilon V(r)$之下，原来(6.83)式中氢原子的n个相互简并的不可约表示空间现在会完全分裂开来。

那么，是不是任意的球对称微扰都会使得氢原子相互简并的不可约表示空间分裂开来呢? 答案是否定的，所有$\varepsilon\frac{1}{r}$类型的微扰(也就是所有库伦势型的微扰)都不能使得(6.83)式的n个简并不可约表示空间分裂开来！这是因为，对于任意库伦势型的相互作用势能，系统的对称性将不止是$SO(3)$的旋转对称性，而是有一个更大的隐藏对称性，即所谓的$SO(4)$对称性，因为对于库伦势型的相互作用势能，系统不止角动量会守恒，而且它的龙格-楞茨矢量(Runge-Lenz vector)[8]也将会守恒，加上龙格-楞茨矢量所对应的算符，系统的对称性就会从原来的$SO(3)$扩大为$SO(4)$。而对于这个更大的$SO(4)$对称性来说，$\mathcal{H}_{n,l}$空间太小了无法保证封闭性，只有整个$\mathcal{H}_n$才是一个不可约表示空间。因此，只要不破坏$SO(4)$对称性，我们就无法将$\mathcal{H}_n$空间里的简并分裂开来。

当然，我们也可以进一步破坏氢原子的球对称性，比方说，我们给氢原子加上一个z方向的均匀磁场，这时候系统就没有整个三维空间的旋转对称性了，而仅仅只有绕z轴的旋转对称性，这种轴对称性我们称之为$SO(2)$对称性。加上一个z方向的均匀磁场破坏原来的$SO(3)$对称性以后，原来的$SO(3)$不可约表示空间$\mathcal{H}_{n,l}$中的$2l+1$个简并态就会分裂开来，氢原子在均匀磁场中的这种能级分裂就是著名的塞曼效应。所以，对于氢原子来说，原来我们有一个很大的$SO(4)$对称性，它给出了氢原子能级的n^2重

[8]假设系统的势能为$-\frac{c}{r}$, 则龙格-楞茨矢量的定义为$\mathbf{M}=\frac{\mathbf{p}\times\mathbf{L}}{m}-\frac{c}{r}\mathbf{x}$。

简并，但是，加上一个非库伦势型的球对称微扰以后，$SO(4)$对称性就被破坏了，系统的对称性将变成$SO(3)$空间旋转对称性，相应的能级简并度就是$2l+1$，进一步加上一个z方向的均匀磁场将$SO(3)$对称性破坏到$SO(2)$轴对称性以后，$2l+1$重的能级简并也没有了，所有的$|nlm\rangle$态的能量都将分裂开来，这就是塞曼效应。整个逐次破坏对称性的过程可以表示为如下数学方程

$$SO(4) \supset SO(3) \supset SO(2), \tag{6.84}$$

其中$SO(4) \supset SO(3)$这样的表达式表示$SO(4)$对称性包含$SO(3)$对称性，所以这个方程从左到右就是一个不断破坏和降低对称性的过程。

因此，对称性总会导致能级简并，而一般来说只有破坏对称性才能降低这种能级简并。

6.4　补充内容：伽利略推动(Boost)

在正文中我们集中处理的是保持动力学规律不变的对称性。如果这样的对称性是一个连续对称性，那这就要求它相应的量子变换的生成元和哈密顿量对易。但是我们也说了，对于包含时间平移对称性的时空对称群，我们实际上只需要求物理规律协变，也就是只需要求这些对称性的量子变换构成时空对称群的表示，严格来说实际上是只需构成投影表示。非相对论的伽利略对称群就是这样的一个时空对称群。这个对称群由时间平移、空间平移、空间旋转、以及伽利略推动(Boost)生成。其中，时间平移、空间平移、空间旋转我们其实都已经在正文中研究过了。这个里主要是要讨论伽利略推动对称性，当然，我们将仅仅只考虑孤立系统的伽利略推动对称性。

在非相对论力学中，我们知道，对于一个孤立系统，假设它由n个粒子组成，我们可以对它进行一个伽利略推动(Boost)，推动之后，系统中任意一个粒子a的坐标将变换为$\mathbf{x}_a \to \mathbf{x}_a + \mathbf{v}t$, 因此这个粒子的动量将变换为$\mathbf{p}_a \to \mathbf{p}'_a = \mathbf{p}_a + m_a\mathbf{v}$，式中$\mathbf{v}$为伽利略推动的速度。我们知道，对于孤立系统，这样的伽利略推动是一个对称操作，它就是著名的伽利略协变性。

伽利略推动的特殊之处就在于，它一定会影响系统的哈密顿量(或者说系统的能量)。为了考察这种影响，我们将哈密顿量中的动能项写成$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \sum_a \frac{\widetilde{\mathbf{p}}_a^2}{2m_a}$, 式中$\mathbf{p}$为系统的总动量，$m$为系统的总质量，而$\widetilde{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_a - m_a\mathbf{v}_c$($\mathbf{v}_c$为质心的速度)为粒子$a$在质心系中的动量，因此动能算符分解出

来的这两项分别代表质心的动能和系统在质心系中的动能。很显然，由于$\mathbf{p}_a$的变换与$m_a\mathbf{v}_c$的变换刚好抵消，因此在伽利略推动之下，$\tilde{\mathbf{p}}_a$将保持不变，从而系统在质心系中的动能也将保持不变。同时，对于孤立系统，系统的势能只依赖于不同粒子之间的相对位置，因此显然也是伽利略推动不变的。因此，在伽利略推动之下，系统的哈密顿量中仅仅只有质心的动能是会变的，我们不妨将哈密顿量H重写为

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + H_c, \tag{6.85}$$

式中H_c表示系统在质心系中的能量，对于孤立系统，它在伽利略推动之下保持不变，在物理上，这一点非常好理解，因为孤立系统的质心系当然与伽利略推动无关。

在量子力学上，我们记任意一个伽利略推动为幺正变换$U(\mathbf{v}) = \exp\left(i\mathbf{v}\cdot\mathbf{K}/\hbar\right)$, 式中$\mathbf{K}$为这个伽利略推动的生成元，由于伽利略推动与时间坐标t有关，因此一般来说，$\mathbf{K}$可能依赖于t。注意到在伽利略推动之下，系统总动量将变换为$\mathbf{p}\to\mathbf{p}+m\mathbf{v}$, 所以我们有

$$U^{-1}(\mathbf{v})\mathbf{P}U(\mathbf{v}) = \mathbf{P} + m\mathbf{v}, \tag{6.86}$$

式中$\mathbf{P}$表示系统的总动量算符。为了满足这个方程，我们必有

$$[K_i, P_j] = i\hbar m\delta_{ij}. \tag{6.87}$$

为了考察$\mathbf{K}$与哈密顿量H的对易关系，我们首先注意到，由于孤立系统质心系的哈密顿量H_c与伽利略推动无关，因此很显然$\mathbf{K}$与H_c对易，$[\mathbf{K}, H_c] = 0$。注意到哈密顿算符$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + H_c$, 所以由(6.87)式我们可以得到

$$[\mathbf{K}, H] = i\hbar\mathbf{P}. \tag{6.88}$$

(6.87)式和(6.88)式告诉我们，伽利略推动虽然是一个对称操作，但是它的生成元与哈密顿量H并不对易。虽然如此，但正如我们后面将会表明的，这并不会破坏对称性与守恒量之间的普遍性联系。

除了(6.87)式和(6.88)式这两个代数关系之外，注意到伽利略推动速度$\mathbf{v}$的矢量叠加性，我们有$U(\mathbf{v}_1)U(\mathbf{v}_2) = U(\mathbf{v}_1+\mathbf{v}_2) = U(\mathbf{v}_2)U(\mathbf{v}_1)$。也即是说，任意两个伽利略推动都可对易，从而我们有

$$[K_i, K_j] = 0. \tag{6.89}$$

另外，注意到$\mathbf{K}$是一个矢量算符，所以我们当然也有代数关系

$$[J_i, K_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}K_k, \tag{6.90}$$

这里我们已经默认了求和约定。

代数关系(6.87)、(6.88)以及(6.89)、(6.90), 再加上我们在本章正文中推导的$\mathbf{J}$、$\mathbf{P}$以及H这些算符之间的代数关系，就构成了所谓的伽利略对称性的代数关系。而伽利略对称性就是孤立的非相对论量子系统最一般的连续的时空对称性。

伽利略对称性可以看成是狭义相对论的庞加莱对称性在低速下的极限形式，因此它的这些生成元都可以推广到相对论情形，比方说伽利略推动在相对论中就相应于洛伦兹推动(它生成的就是著名的洛伦兹变换)。不过，相对论情形的代数关系需要作一些修正，比方说，在相对论情形，$[K_i, K_j] \neq 0$, 而大致是$[K_i, K_j] \sim -i\hbar\epsilon_{ijk}J_k/c^2$, 其中$c$为光速。实际上在相对论情形我们通常会选取不同的单位重新定义$\mathbf{K}$，大体上，相对论中的洛伦兹推动生成元相当于非相对论中的$c\mathbf{K}$。而相对论中的K_i、K_j之间的这个非零对易子所带来的物理效应就是所谓的托马斯进动。

回到我们的伽利略推动。什么样的生成元$\mathbf{K}$能满足代数(6.87)、(6.88)以及(6.89)、(6.90)呢？由于系统的总动量$\mathbf{P}$也即是质心的动量，所以很显然，系统质心的位置算符$\mathbf{X}_c$与质心动量算符$\mathbf{P}$之间有代数关系，$[X_{c,i}, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$。由此我们很容易验证，如果取$\mathbf{K} = m\mathbf{X}_c$，那么代数关系(6.87)、(6.88)以及(6.89)、(6.90)都能得到满足，其中证明(6.88)式能满足需要用到质心位置算符$\mathbf{X}_c$与质心系的哈密顿量H_c对易(这是因为在质心系中，质心位置其实确定为零)。

但是，能满足代数关系(6.87)、(6.88)以及(6.89)、(6.90)的$\mathbf{K}$并不唯一，注意到孤立系统的总动量守恒$[\mathbf{P}, H] = 0$，很容易验证$m\mathbf{X}_c + f(t)\mathbf{P}$同样满足这组代数关系。这里$f(t)$可以是关于$t$的一个任意函数。那么我们应该选哪个算符作为我们的伽利略推动生成元$\mathbf{K}$呢?

为了确定$\mathbf{K}$, 我们需要进一步考察伽利略推动在位置算符上的作用。由于在伽利略推动之下，质心位置将变换为$\mathbf{x}_c \to \mathbf{x}_c + \mathbf{v}t$，所以我们还有算符方程

$$U^{-1}(\mathbf{v})\mathbf{X}_c U(\mathbf{v}) = \mathbf{X}_c + \mathbf{v}t. \tag{6.91}$$

为了满足这个方程，必有$[K_i, X_{c,j}] = i\hbar\delta_{ij}t$，因此我们只能取

$$\mathbf{K} = m\mathbf{X}_c - \mathbf{P}t. \tag{6.92}$$

这个算符的特殊之处在于，它显含时间坐标t。

为了进一步验证对称性与守恒量之间的关系，我们可以变换到海森堡绘景，

$$\mathbf{K}_H = m\mathbf{X}_c^H - \mathbf{P}t. \tag{6.93}$$

式中$\mathbf{X}_c^H$表示海森堡绘景中的质心位置算符[9]。利用定义式$\mathbf{K}_H = e^{iHt/\hbar}\mathbf{K}e^{-iHt/\hbar}$，以及代数关系$[m\mathbf{X}_c, H] = i\hbar\mathbf{P}$，以及孤立系统的$[\mathbf{P}, H] = 0$, 我们也可以将海森堡绘景的$\mathbf{K}_H$重写为，

$$\mathbf{K}_H = m\mathbf{X}_c. \tag{6.94}$$

注意,$\mathbf{X}_c$其实是一个在薛定谔绘景中定义的算符，因此它肯定不随时间演化，这里我们只是发现它刚好可以用作海森堡绘景中的$\mathbf{K}_H$而已。可见，$\mathbf{K}_H$不随时间演化，因此它是一个守恒量！由于伽利略推动是系统的一个对称性，那么其生成元$\mathbf{K}_H$当然应该是一个守恒量。我们只不过是再一次验证了对称性与守恒量之间的普遍联系。虽然我们所考察的这个对称性有些特殊，它的生成元与哈密顿算符并不对易，但是，对称性与守恒量之间的普遍联系在这里依然成立。

我们已经得到了伽利略对称性的代数关系。但是，到现在为止我们还没有在量子力学的层次上严格验证它们的确能生成孤立系统的伽利略协变性。也就是说，我们还没有验证幺正算符$U(\mathbf{v})$能和时间平移算符$U(\tau)$, 空间平移算符$U(\mathbf{a})$(其实更一般的还要包括空间旋转幺正算符$U(R)$)一起构成伽利略对称群的表示。为此，我们首先来考察一下在孤立系统情形下，伽利略协变性对伽利略推动算符与时间平移算符的对易关系有何要求。然后我们再验证前面得到的代数关系的确能满足这样的要求。

我们考察系统的任意一个动量本征态$|\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, ..., \mathbf{p}_n\rangle$，然后将伽利略推动$U(\mathbf{v})$和时间平移算符$U(\tau) = \exp\left(iH\tau/\hbar\right)$先后作用到这个态上。首先，考察$U(\tau)U(\mathbf{v})|\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, ..., \mathbf{p}_n\rangle$, 它等于$U(\tau)|\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2, ..., \mathbf{p}'_n\rangle = \exp\{i(\frac{\mathbf{p}'^2}{2m} + H_c)\tau/\hbar\}|\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2, ..., \mathbf{p}'_n\rangle$, 式中$\mathbf{p}'$为伽利略推动之后的系统总动量，显然$\mathbf{p}' = \mathbf{p} + m\mathbf{v}$, 因此即有

$$U(\tau)U(\mathbf{v})|\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, ..., \mathbf{p}_n\rangle = \exp\{i(\frac{\mathbf{p}'^2}{2m} + H_c)\tau/\hbar\}|\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2, ..., \mathbf{p}'_n\rangle. \tag{6.95}$$

[9]注意，由于$[\mathbf{P}, H] = [\mathbf{J}, H] = 0$，所以海森堡绘景中的总动量算符和总角动量算符均与薛定谔绘景中的相应算符相同。

再考察$U(\mathbf{v})U(\tau)|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,...,\mathbf{p}_n\rangle$，对于孤立系统，由于$H_c$与$\mathbf{K}$对易，因此即有$U(\mathbf{v})U(\tau)|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,...,\mathbf{p}_n\rangle = U(\mathbf{v})\exp\{i(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+H_c)\tau/\hbar\}|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,...,\mathbf{p}_n\rangle = \exp\{i(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+H_c)\tau/\hbar\}|\mathbf{p}'_1,\mathbf{p}'_2,...,\mathbf{p}'_n\rangle$, 即

$$U(\mathbf{v})U(\tau)|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,...,\mathbf{p}_n\rangle = \exp\{i(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+H_c)\tau/\hbar\}|\mathbf{p}'_1,\mathbf{p}'_2,...,\mathbf{p}'_n\rangle. \quad (6.96)$$

比较(6.95)式和(6.96)式，我们可以得到

$$\begin{aligned} & U(\tau)U(\mathbf{v})|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,...,\mathbf{p}_n\rangle \\ = & \exp\{i(\frac{\mathbf{p}'^2}{2m}-\frac{\mathbf{p}^2}{2m})\tau/\hbar\}U(\mathbf{v})U(\tau)|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,...,\mathbf{p}_n\rangle \\ = & U(\mathbf{v})U(\tau)\exp\big(i\mathbf{P}\cdot\mathbf{v}\tau/\hbar + i\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2\tau/\hbar\big)|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,...,\mathbf{p}_n\rangle. \quad (6.97)\end{aligned}$$

式中总动量算符$\mathbf{P}$作用在动量本征态上的结果就是总动量$\mathbf{p}$。由于(6.97)式对于任意动量本征态都成立，也就是在整个动量表象中都成立，因此如果我们的孤立系统有伽利略变换协变性，那就必须满足算符等式

$$\begin{aligned} U(\tau)U(\mathbf{v}) &= U(\mathbf{v})U(\tau)\exp\big(i\mathbf{P}\cdot\mathbf{v}\tau/\hbar + i\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2\tau/\hbar\big) \\ &= \exp\big(i\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2\tau/\hbar\big)U(\mathbf{v})U(\tau)U(-\mathbf{v}\tau). \quad (6.98)\end{aligned}$$

可见，作为一种时空对称性，伽利略推动与时间平移算符不对易，(6.98)式其实就是在这种不对易的情形下，对于孤立系统，伽利略协变性强加给我们的一个具体要求。等式(6.98)右边的$U(-\mathbf{v}\tau)$表示空间平移操作，其定义为$U(\mathbf{a}) = \exp(-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}/\hbar)$, 它的作用是将系统平移到$\mathbf{x}\to\mathbf{x}+\mathbf{a}$处。很容易验证，等式(6.98)左右两边的作用都是将系统变换到$t\to t+\tau$、$\mathbf{x}\to\mathbf{x}+\mathbf{v}t$时空位置，因此这个等式正是伽利略协变性的要求。当然，在这里我们发现等式中还多出了一个相因子$\exp\big(i\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2\tau/\hbar\big)$, 它正是我们在正文中提到的对称群的投影表示相因子。

另一方面，根据Baker-Campbell-Hausdorff公式，我们有

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]+\frac{1}{2}[[A,B],A+B]+...}. \quad (6.99)$$

由此我们容易得到算符恒等式，

$$\begin{aligned} & U(\tau)U(\mathbf{v}) = U(\mathbf{v})U(\tau)\times \\ & \exp\big(-[H,\mathbf{K}\cdot\mathbf{v}]\tau/\hbar^2 - i\frac{1}{2}\tau[[H,\mathbf{K}\cdot\mathbf{v}],H\tau+\mathbf{K}\cdot\mathbf{v}]/\hbar^3+....\big) \quad (6.100)\end{aligned}$$

在这个算符恒等式中代入代数关系式(6.87)和(6.88)，我们容易验证它正好给出(6.98)式，这正好符合孤立系统伽利略协变性的要求。所以我们得到的代数关系(6.87)和(6.88)的确生成了孤立系统的伽利略协变性。

6.4.1 习题

1. 我们可以定义一个任意的非惯性坐标变换$\mathbf{x} \to \mathbf{x} + \mathbf{d}(t)$, 式中$\mathbf{d}(t)$可以是$t$的任意函数。对于这样的坐标变换，其诱导的希尔伯特空间量子变换$U[\mathbf{d}(t)]$可以写成

$$U[\mathbf{d}(t)] = e^{im\dot{\mathbf{d}}(t)\cdot\mathbf{X}_c/\hbar} e^{-i\mathbf{d}(t)\cdot\mathbf{P}/\hbar} e^{-i\frac{1}{2}m\int_0^t ds\dot{\mathbf{d}}^2(s)/\hbar}. \tag{6.101}$$

请验证：(1)$U[\mathbf{d}(t)]$在位置算符和动量算符上的作用能给出正确的变换关系。(2)对于空间平移和伽利略推动的特殊情形，$U[\mathbf{d}(t)]$分别和$U(\mathbf{a})$以及$U(\mathbf{v})$一致。

6.5 空间反演对称性与时间反演对称性

前面我们讨论的都是连续对称性。这一节我们主要讨论两个重要的离散对称性，即空间反演对称性和时间反演对称性。这两个对称性都是时空对称性，我们可以将它们包含在时间平移对称性里一起来考虑，而我们所谓的系统具有空间反演对称性或时间反演对称性是指系统的动力学规律在空间反演或时间反演之下协变。比方说，我们可以将对系统的时间平移操作T_τ与空间反演操作$\mathcal{P}$放在一起构成一个时空对称群，所谓一个系统具有空间反演对称性，即是要求对系统的空间反演操作所诱导的量子变换$\Pi = U(\mathcal{P})$与时间平移算符$U(\tau)$一起共同构成这个时空对称群的表示。类似的，我们也可以将时间平移操作T_τ与时间反演操作$\mathcal{T}$放在一起构成一个时空对称群，而时间反演对称性就意味着，时间反演操作所诱导的量子变换$\Theta = U(\mathcal{T})$与$U(\tau)$一起共同构成这个时空对称群的表示。

6.5.1 空间反演对称性

空间反演变换

我们先来讨论空间反演对称性。但在讨论对称性之前，我们先来讨论对任何系统都可以定义的空间反演操作$\mathcal{P}$，以及它所诱导的量子变

换$\Pi = U(\mathcal{P})$。当然，在空间反演操作$\mathcal{P}$的作用下，空间坐标变换为$\mathbf{x} \to \mathcal{P}\mathbf{x} = -\mathbf{x}$。另一方面，通过前面的学习我们知道，任何量子系统都可以通过空间平移操作和空间旋转操作定义一个总动量算符$\mathbf{P}$和总角动量算符$\mathbf{J}$(它们不一定要守恒)。我们首先要确立的是，这些算符和空间反演算符Π之间的代数关系。不过，在下面将要进行的讨论中，有一个微妙的问题值得预先指出，即对于连续操作的量子变换，我们能够确定它们是幺正变换，但是，空间反演是一个离散操作，因此我们并不能预先确立Π是幺正算符还是反幺正算符。

为了确立Π和$\mathbf{P}$之间的代数关系，我们注意到，在空间平移操作$T_{\mathbf{a}}$的作用下，空间坐标变换为$\mathbf{x} \to \mathbf{x} + \mathbf{a}$，而在空间反演操作$\mathcal{P}$的作用下，$\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$。因此$\mathcal{P}T_{\mathbf{a}}$的联合作用将会把$\mathbf{x}$变换为$\mathbf{x} \to -(\mathbf{x}+\mathbf{a}) = -\mathbf{x}-\mathbf{a}$。类似的，我们发现$T_{-\mathbf{a}}\mathcal{P}$的联合作用也会将$\mathbf{x}$变换为$\mathbf{x} \to= -\mathbf{x}-\mathbf{a}$，即$\mathcal{P}T_{\mathbf{a}} = T_{-\mathbf{a}}\mathcal{P}$。由于量子变换是时空操作群的表示，所以这就意味着，$U(-\mathbf{a})\Pi$和$\Pi U(\mathbf{a})$实际上是一样的，即

$$\Pi U(\mathbf{a}) = U(-\mathbf{a})\Pi. \tag{6.102}$$

取$\mathbf{a} = \epsilon$为一无穷小平移，并将上面方程左右两边展开到ϵ的一阶项，就可以得到

$$\Pi(i\mathbf{P}) = -(i\mathbf{P})\Pi. \tag{6.103}$$

类似的，我们可以考虑绕$\mathbf{n}$轴的旋转操作和空间反演操作的联合作用。很显然，$\Pi U(\mathbf{n},\theta)$的效果是将空间坐标变换为$\mathbf{x} \to -R(\mathbf{n},\theta)\mathbf{x}$, 这和$U(\mathbf{n},\theta)\Pi$的作用效果一样。因此我们有

$$\Pi U(\mathbf{n},\theta) = U(\mathbf{n},\theta)\Pi. \tag{6.104}$$

取$\theta = \epsilon$为一无穷小旋转就可以得到

$$\Pi(i\mathbf{J}) = (i\mathbf{J})\Pi. \tag{6.105}$$

但是，到现在为止我们还不能确定Π是幺正变换还是反幺正变换。为了确定这一点，我们可以考虑一个非相对论单粒子系统，这时候，粒子的坐标算符$\mathbf{X}$是一个定义良好的算符。而且我们也知道，当我们考虑对系统的空间反演操作时，可以等价地将相应的量子变换作用在$\mathbf{X}$算符上，形

如$\mathbf{X} \to \Pi^{-1}\mathbf{X}\Pi$。另一方面我们又知道，空间反演操作会将空间坐标变换为$\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$，因此坐标算符的变换关系必定是$\mathbf{X} \to -\mathbf{X}$。从而我们即有

$$\Pi^{-1}\mathbf{X}\Pi = -\mathbf{X}. \tag{6.106}$$

另外我们也知道，动量正比于速度，也即正比于坐标对时间的导数，而空间反演当然不影响时间，所以进一步我们即有

$$\Pi^{-1}\mathbf{P}\Pi = -\mathbf{P}. \tag{6.107}$$

将这个式子和前面的(6.103)式比较，我们可以知道，Π和虚数单位i一定可交换，即$\Pi i = i\Pi$，从而Π必定是一个线性算符而不可能是反线性算符，进而也就必定是一个**幺正算符**。将这个结果代入(6.105)式，我们又可以得到

$$\Pi^{-1}\mathbf{J}\Pi = \mathbf{J}. \tag{6.108}$$

读者很容易看出来，最终我们得到的结果(6.106)、(6.107)、(6.108) 与我们对空间反演的物理直观结论完全一致。这些结果中，(6.107)、(6.108)对于任何量子系统都普遍成立，因为只要利用Π是一个线性算符(而不是反线性算符)，那我们立马就能从前面的一般性结果(6.103)和(6.105)中得到它们。当然，(6.106)式只适用于非相对论量子力学，在量子场论系统中是不适用的。

在非相对论量子力学中，根据(6.106)式和(6.107)式，我们很容易有

$$\Pi^{-1}\mathbf{L}\Pi = \mathbf{L}. \tag{6.109}$$

又由于$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$，进而根据(6.108)我们又可以进一步得到

$$\Pi^{-1}\mathbf{S}\Pi = \mathbf{S}. \tag{6.110}$$

虽然都是矢量算符，但由于在空间反演之下，这些角动量算符的变换关系与通常的矢量算符，比如动量算符、位置算符，相差一个负号，所以我们通常称角动量为赝矢量。除了角动量以外，物理学中常见的赝矢量还有磁场强度$\mathbf{B}$。

对于非相对论量子系统，与前面讨论时间平移、空间平移、空间旋转时的推理一样，我们也容易知道，在坐标表象中，Π对波函数$\psi(\mathbf{x})$的作用必为

$$\Pi\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathcal{P}^{-1}\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x}). \tag{6.111}$$

一般地，我们注意到Π^2与空间平移以及空间旋转等等所有这些时空操作都对易，而且空间反演两次效果上相当于不作任何操作，所以通常来说，Π^2必定为1，即

$$\Pi^2 = 1, \tag{6.112}$$

也即$\Pi^{-1} = \Pi$。对于非相对论量子系统，我们其实很容易利用(6.111)式证明这个结果。由于$\Pi^2 = 1$, 所以Π的本征值只能为± 1, 这个本征值称之为宇称，$+1$称为偶宇称，-1称为奇宇称。而Π的本征态即是一个有确定宇称的量子态。

比方说，我们知道对于球谐函数而言将$r^l Y_{lm}$在直角坐标中表达出来就是一个l阶齐次函数，在$\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$的空间反演之下，这样的齐次函数当然会出一个$(-)^l$因子，因此$\Pi(r^l Y_{lm}) = (-)^l r^l Y_{lm}$。但是，径向坐标$r = |\mathbf{x}|$是空间反演不变的，因此这就意味着

$$\Pi Y_{lm}(\theta, \phi) = (-)^l Y_{lm}(\theta, \phi). \tag{6.113}$$

这是坐标表象的写法，如果用抽象的写法那就是

$$\Pi|lm\rangle = (-)^l |lm\rangle. \tag{6.114}$$

可见，角动量算符的本征态$|lm\rangle$具有确定的宇称$(-)^l$。

再比方说，在单自由度线性谐振子中，由于$a \sim (X + iP/m\omega)$, $a^\dagger \sim (X + iP/m\omega)$，所以很显然$\Pi^{-1} a \Pi = -a$, $\Pi^{-1} a^\dagger \Pi = -a^\dagger$。又于线性谐振子的基态波函数是一个高斯型函数，是偶函数，所以为偶宇称，即

$$\Pi|0\rangle = |0\rangle. \tag{6.115}$$

又由于$|n\rangle \sim (a^\dagger)^n |0\rangle$, 所以$\Pi|n\rangle \sim \Pi(a^\dagger)^n \Pi^{-1}|0\rangle = (-)^n (a^\dagger)^n |0\rangle$，即

$$\Pi|n\rangle = (-)^n |n\rangle. \tag{6.116}$$

所以，线性谐振子的能量本征态也都有确定的宇称。

空间反演对称性和宇称守恒

前面我们讨论的仅仅只是空间反演变换，对任何量子系统我们都可以定义这样的变换，那么什么情况下一个系统具有空间反演对称性呢?

为了弄清楚这个问题，我们可以将空间反演操作$\mathcal{P}$和时间平移操作T_τ放在一起构成一个时空对称群。所谓一个系统具有空间反演对称性即是幺正变换Π和$U(\tau)$一起共同构成这个时空对称群的表示。我们注意到$\mathcal{P}T_\tau$的联合作用会产生时空坐标变换$t \to t+\tau, \mathbf{x} \to -\mathbf{x}$，同样$T_\tau\mathcal{P}$的联合作用也会产生同样的时空坐标变换, 即$\mathcal{P}T_\tau = T_\tau\mathcal{P}$。因此，如果$\Pi$和$U(\tau)$的确构成了这个时空对称群的表示，那$U(\tau)\Pi$和$\Pi U(\tau)$就应该相等，即

$$\Pi U(\tau) = U(\tau)\Pi. \tag{6.117}$$

取$\tau = \epsilon$为一个无穷小时间平移，并将上式左右两边展开到ϵ的一阶项，同时注意到Π是一个线性幺正算符，我们就可以得到

$$\Pi H = H\Pi. \tag{6.118}$$

也即是说，如果系统具有空间反演对称性，则空间反演变换Π必定和H对易。反过来其实也一样，如果幺正算符Π和H对易，则系统就具有空间反演对称性。

前面我们讨论连续对称性的时候曾经证明，系统的每一个连续对称性都会对应一条守恒定律，这也就是著名的诺特定理。但是，现在空间反演变换Π是一个离散对称性。它有没有相应的守恒定律呢? 其实也是有的，因为很显然，这时候海森堡绘景中的空间反演算符和薛定谔绘景的Π一样，也就是说，海森堡绘景中的空间反演算符不随时间演化，而这就意味着Π本身是一个守恒量！注意，这里的情形和连续对称性情形有一个本质性的不同，连续对称性情形的守恒量是对称变换的生成元，但是，这里的守恒量是对称变换本身。对于连续对称性的生成元来说，它的本征值有一种可加性，比如能量算符H是时间平移对称性的生成元，而对于一个多粒子态而言，不同粒子的能量当然是加在一起的，同样，量子系统的动量算符是空间平移的生成元，而不同粒子的动量当然也是加在一起的。但是，对于对称变换Π来说，它的本征值(也就是宇称)具有可乘性，而不是可加性。下面我们会具体地说明这个问题。

首先，算符Π是一个守恒量意味着，如果系统初始时处于Π的本征态，有一个确定的宇称，那么无论这个量子态如何演化，它将始终是Π的本征态，而且本征值(也就是宇称)保持不变！这就是所谓的宇称守恒。因此，空间反演对称性意味着宇称守恒。

在粒子物理中，如果系统具有空间反演对称性，那我们就可以要求每一个粒子都是空间反演算符的本征态，有一个确定的宇称，这就是粒子的

内禀宇称。对于任意粒子A, 它的内禀宇称η_A就是在A静止的参考系中，粒子量子态$|A\rangle$在Π作用下的本征值，即

$$\Pi|A\rangle = \eta_A|A\rangle, \tag{6.119}$$

当然，通常来说η_A只能等于$+1$或者-1。

假设我们有两个粒子A和B，它们的内禀宇称分别为η_A, η_B, 在这个两粒子系统的质心系中，两粒子的相对轨道角动量量子数为l。则在质心系中，我们可以标记这个两粒子态为$|A,B,l\rangle$。$|A,B,l\rangle$其实也是Π的本征态，其本征值我们先记为η。下面我们将要说明如何计算这个η, 首先，Π在$|A,B,l\rangle$态上作用时，它其实是同时对三个东西进行作用，第一，它作用在A粒子上，得到内禀宇称η_A，第二，它同样作用在B上，得到内禀宇称η_B, 第三，但同时，Π还作用在两粒子相对运动的空间波函数上，也就是相对运动的球谐函数Y_{lm}上，得到宇称$(-)^l$。注意，由于Π是同时作用在这三个东西上，所以我们要把这三个宇称乘起来，得到整个量子态$|A,B,l\rangle$的宇称η, 即

$$\eta = \eta_A\eta_B(-)^l. \tag{6.120}$$

这个例子就清楚地说明了什么是宇称的可乘性。

理论分析发现电子e、质子p、中子n的内禀宇称都是$+1$, 即$\eta_e = \eta_p = \eta_n = +1$。当然，由于反粒子的量子数必定和粒子相反，所以它们的反粒子的内禀宇称就都是-1。人们知道，强相互作用有空间反演对称性，因此强相互作用过程必定宇称守恒。据此人们就可以给各种强子(包括质子、中子、π介子等等，总之强子可以简单理解为多个夸克的束缚态)标定内禀宇称，比如说人们发现三种π介子(π^0、π^+、π^-)的内禀宇称都是-1，记为$\eta_\pi = -1$。

宇称不守恒

在1956年之前，人们普遍相信，空间反演对称性是我们世界的一个基本对称性，就和时间平移对称性、空间平移对称性以及空间旋转对称性一样基本。因此，那时候人们认为宇称守恒是普遍成立的。但是，在1940年代，粒子物理学家发现了一件很困惑的事情，他们发现有两个自旋为0的标量粒子，当时人们称其中之一为τ粒子，称另一个为θ粒子，人们发现这两个粒子几乎在所有的方面都一样，有同样的质量同样的寿命等等，几乎就

像同一个粒子一样。但是，奇怪的是，人们发现τ粒子可以衰变成3个π介子[10]，而θ粒子只能衰变成两个π介子。当时人们认为，这就意味着两者必定是两个不同的粒子，因为那时候人们相信宇称守恒普遍成立，因此如果一个标量粒子会衰变成3个π介子，那它的内禀宇称就必定为$\eta_\pi^3 = -1$[11]，而如果一个标量粒子衰变成2个π介子，那它的内禀宇称就必定为$\eta_\pi^2 = +1$[12]。$+1$和-1当然是两个不同的量子数，因此，τ粒子和θ粒子必定不同。但为什么这两个不同粒子的其它方面都完全一样呢？物理学家们可不太相信巧合。

1956年李政道和杨振宁注意到，τ粒子和θ粒子衰变成π介子的过程是属于所谓的弱相互作用过程。而且他们还注意到，的确，电磁相互作用和强相互作用过程都宇称守恒，但此前人们并没有用实验检验过弱相互作用过程中宇称是否守恒。所以，李政道和杨振宁大胆地提出：τ粒子和θ粒子可能根本就是同一个粒子，只是弱相互作用过程没有空间反演对称性，在弱相互作用过程中宇称可能不守恒！因此前面关于这个粒子内禀宇称的那些分析其实根本不成立。

李政道和杨振宁提出用$\mathrm{Co}^{60} \to \mathrm{Ni}^{60} + e^- + \overline{\nu}$这样一个弱相互作用导致的衰变过程来检验他们的理论假设。在这样一个衰变过程中，初态的Co^{60}静止但是有确定的自旋，不妨设初态Co^{60}的自旋沿z轴向上，记为S_z，因此我们可以将初态标记为$|\mathrm{Co}^{60}, S_z\rangle$。实验主要关心末态放出来的电子，假设其自旋为$s_z$，动量为$\mathbf{p}$，则我们可以将末态标记为$|e^-, \mathbf{p}, s_z, ...\rangle$，省略号表示末态的其它粒子。假设弱相互作用算符为$H'$, 则衰变概率将正比于

$$\left|\langle e^-, \mathbf{p}, s_z, ...|H'|\mathrm{Co}^{60}, S_z\rangle\right|^2. \tag{6.121}$$

由于$\Pi^2 = 1$，而且如果弱相互作用有空间反演对称性，则有$\Pi H' =$

[10] π介子都是自旋为0的标量粒子。

[11] 这时候3个π介子的轨道运动部分对宇称没有贡献。因为在衰变的标量粒子静止的参考系中，由于初态总角动量为0，角动量守恒意味着，3个π介子的动量必定满足$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = 0$，衰变矩阵元只能依赖于$\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$等等诸如此类3者动量的标量积，而且不可能是$\mathbf{p}_1 \cdot (\mathbf{p}_2 \times \mathbf{p}_3)$这样的赝标量，由于$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = 0$，这种赝标量实际上必定等于0。空间反演变换虽然会将所有的动量$\mathbf{p}$变成$-\mathbf{p}$，但是对于$\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2$这样的动量标量积，在空间反演之下它们实际上是不变的。因此，3个π介子的轨道运动对宇称没有贡献。

[12] 和前一个注解一样，2个π介子的轨道运动对于宇称也没有贡献。

$H'\Pi$。因此

$$\begin{aligned} & \langle e^-, \mathbf{p}, s_z, ...|H'|\text{Co}^{60}, S_z\rangle \\ = & \langle e^-, \mathbf{p}, s_z, ...|H'\Pi^2|\text{Co}^{60}, S_z\rangle \\ = & \langle e^-, \mathbf{p}, s_z, ...|\Pi H'\Pi|\text{Co}^{60}, S_z\rangle. \end{aligned}$$

由于空间反演不改变粒子自旋，但是会将$\mathbf{p}$变成$-\mathbf{p}$, 即$\langle \mathbf{p}|\Pi = \langle -\mathbf{p}|$，所以上面的推导告诉我们$\langle e^-, \mathbf{p}, s_z, ...|H'|\text{Co}^{60}, S_z\rangle = \langle e^-, -\mathbf{p}, s_z, ...|H'|\text{Co}^{60}, S_z\rangle$，即有

$$\left|\langle e^-, \mathbf{p}, s_z, ...|H'|\text{Co}^{60}, S_z\rangle\right|^2 = \left|\langle e^-, -\mathbf{p}, s_z, ...|H'|\text{Co}^{60}, S_z\rangle\right|^2. \tag{6.122}$$

因此，如果弱相互作用过程有空间反演对称性，则电子从$+\mathbf{p}$和$-\mathbf{p}$两个方向衰变出来的概率将相等。如果我们在这两个相反方向上测到的电子数不同，那就不可能有空间反演对称性。

同一年，吴健雄领导团队用高超的实验技巧证明，两个相反方向上衰变出来的电子数真的不同，这就证实了李政道和杨振宁提出来的，弱相互作用没有空间反演对称性的理论假设！

6.5.2 时间反演对称性

时间反演变换

现在我们来讨论时间反演变换Θ。按照定义它是对系统的时间反演操作$\mathcal{T}$所诱导的量子变换, 其中$\mathcal{T}: t \to \mathcal{T}t = -t$。当然，任何量子系统都可以定义$\mathbf{P}$和$\mathbf{J}$，我们首先关心的就是，$\Theta$与它们之间的代数关系。不过，我们也要指出，由于$\Theta$是一个离散的变换，所以我们不能预先确定它是幺正的还是反幺正的(当然实际上我们使用的符号已经暗示了答案)。

首先，我们把时间反演操作$\mathcal{T}$和空间平移操作$T_{\mathbf{a}}$放在一起构成一个对时空坐标的操作群，很容易验证$\mathcal{T}T_{\mathbf{a}} = T_{\mathbf{a}}\mathcal{T}$。因此，如果$\Theta$和$U(\mathbf{a})$的确构成这些时空对称群的表示，那我们将有

$$\Theta U(\mathbf{a}) = U(\mathbf{a})\Theta. \tag{6.123}$$

取$\mathbf{a} = \epsilon$为无穷小空间平移，然后将上式左右两边展开到ϵ的一阶项，我们就有

$$\Theta(i\mathbf{P}) = (i\mathbf{P})\Theta. \tag{6.124}$$

类似的，我们可以把时间反演操作和空间旋转操作放在一起，从而最终会有

$$\Theta U(\mathbf{n},\theta) = U(\mathbf{n},\theta)\Theta. \tag{6.125}$$

取$\theta = \epsilon$为无穷小旋转，我们又可以得到

$$\Theta(i\mathbf{J}) = (i\mathbf{J})\Theta. \tag{6.126}$$

为了确定Θ是幺正变换还是反幺正变换，我们可以取一个非相对论单粒子系统，由于在时间反演操作下，粒子的时空坐标变换为$t \to -t, \mathbf{x} \to \mathbf{x}$, 因此在时间反演之下，粒子的动量将变换为$\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$。因此，当我们等价地将$\Theta$作用在厄密算符$\mathbf{P}$上式，我们将有

$$\mathbf{P} \to \Theta^{-1}\mathbf{P}\Theta = -\mathbf{P}. \tag{6.127}$$

将这个结果与(6.124)式比较，我们就能发现，Θ必定为一个**反幺正算符**，即必有$\Theta i = -i\Theta$。将这个反线性关系代入(6.126)式，我们又可以得到

$$\Theta^{-1}\mathbf{J}\Theta = -\mathbf{J}. \tag{6.128}$$

这个式子告诉我们，在时间反演之下，粒子的角动量将会反转，这和我们的直观完全一致。

利用时间反演不改变粒子位置坐标，我们当然有$\Theta^{-1}\mathbf{X}\Theta = \mathbf{X}$, 结合(6.127)式即有

$$\Theta^{-1}\mathbf{L}\Theta = -\mathbf{L}. \tag{6.129}$$

由于对于带自旋的粒子$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$，结合(6.128)式, 我们也将有

$$\Theta^{-1}\mathbf{S}\Theta = -\mathbf{S}. \tag{6.130}$$

这个式子告诉我们，在时间反演之下，粒子的自旋也会反转。

对于无自旋的非相对论粒子，其量子态可以在坐标表象中表示为

$$|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{x}\psi(\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle. \tag{6.131}$$

式中$\psi(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle$为波函数。将$\Theta$作用在这个式子两边，并注意到它的反线性性，以及粒子位置坐标时间反演不变的$\Theta|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle$式，我们就有

$$\Theta|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{x}\psi^*(\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle. \tag{6.132}$$

这个式子告诉我们，对于无自旋粒子，在坐标表象中，时间反演算符Θ其实就是复数共轭算符K (注意这里K不是伽利略推动生成元，而是表示对波函数取复数共轭)，即$\Theta = K$。从这里我们很容易证明，对于无自旋的非相对论粒子

$$\Theta^2 = 1. \tag{6.133}$$

这个结果很好理解，因为时间反演两次效果上看起来应该相当于不作任何操作。

粗略一看，(6.133)式好像允许Θ算符以任何相因子ζ为本征值。因为如果$\Theta|\zeta\rangle = \zeta|\zeta\rangle$, 则$\Theta^2|\zeta\rangle = \zeta^*\Theta|\zeta\rangle = |\zeta|^2|\zeta\rangle = |\zeta\rangle$, 完全符合(6.133)式。但实际上，这样的本征值ζ并没有任何物理意义，因为我们可以重新定义$|\zeta'\rangle = \zeta^{1/2}|\zeta\rangle$, 对于$|\zeta'\rangle$而言，$\Theta|\zeta'\rangle = (\zeta^*)^{1/2}\Theta|\zeta\rangle = (\zeta^*)^{1/2}\zeta|\zeta\rangle = \zeta^{1/2}|\zeta\rangle = |\zeta'\rangle$。总之，对于时间反演算符，我们无需考虑类似于“内禀宇称”那样的反演相因子。

但是，对于有自旋的情形，(6.133)式实际上不成立。为了说清楚这个问题，我们首先取坐标表象，从而可以将粒子的波函数表示成旋量波函数，我们假设Θ在旋量波函数上的作用可以分解为

$$\Theta = YK. \tag{6.134}$$

式中K就是反幺正的复数共轭算符，从而Y必然是一个幺正算符。注意到对于电子，在这样的旋量波函数表象中，自旋算符都表示成了2×2的矩阵，具体来说，$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$，这里$\vec{\sigma}$是泡利矩阵。注意到$\sigma_x$,$\sigma_z$都是实矩阵，而$\sigma_y$是一个虚矩阵，它满足$\sigma_y^* = -\sigma_y$。由此可知

$$K^{-1}S_xK = S_x, \quad K^{-1}S_yK = -S_y, \quad K^{-1}S_zK = S_z. \tag{6.135}$$

而另一方面我们也知道，在时间反演变换的作用下，$\Theta^{-1}\mathbf{S}\Theta = -\mathbf{S}$，即

$$\Theta^{-1}S_x\Theta = -S_x, \quad \Theta^{-1}S_y\Theta = -S_y, \quad \Theta^{-1}S_z\Theta = -S_z. \tag{6.136}$$

比较(6.135)式和(6.136)式可以知道，幺正算符Y必须满足，

$$Y^{-1}S_xY = -S_x, \quad Y^{-1}S_yY = S_y, \quad Y^{-1}S_zY = -S_z.. \tag{6.137}$$

另一方面，我们注意到自旋是一个矢量算符，因此，它们必然满足

$$\exp(i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}/\hbar)S_i\exp(-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}/\hbar) = R(\mathbf{n},\theta)_{ij}S_j. \tag{6.138}$$

特别的，注意到绕y轴旋转π角会把一个x方向和z方向的矢量转到$-x$和$-z$方向，从而我们有

$$\begin{aligned}\exp(i\pi S_y/\hbar)S_z\exp(-i\pi S_y/\hbar) &= -S_z\\ \exp(i\pi S_y/\hbar)S_x\exp(-i\pi S_y/\hbar) &= -S_x.\end{aligned} \tag{6.139}$$

所以很显然，为了满足(6.137)式，我们可以取$Y=\exp(-i\pi S_y/\hbar)$。这也即是说，对于有自旋的粒子，

$$\Theta=\exp(-i\pi S_y/\hbar)K. \tag{6.140}$$

注意到S_y是纯虚的，所以K与$\exp(-i\pi S_y/\hbar)$对易，从而对于有自旋的粒子易得$\Theta^2=\exp(-i2\pi S_y/\hbar)$。由于$J_y=L_y+S_y$, 而对于轨道角动量而言，旋转$2\pi$角相当于不变，从而我们也可以把刚才的结果写成

$$\Theta^2=\exp(-i2\pi J_y/\hbar)=U(2\pi). \tag{6.141}$$

也即是说，时间反演两次并不是等于1，而是等价于2π角旋转！在非相对论量子力学中(6.141)是普遍成立的，它不仅适用于单粒子情形，也适用于多粒子情形。在相对论量子力学中也有类似的式子，不过这时候Θ应该理解成CT变换，T指的当然就是时间反演，而C则是电荷共轭，它的作用是把粒子变换成反粒子。而在量子场论中，同样有一个类似的(6.141)式，不过这时候Θ应该理解成CPT变换，即在相对论量子力学的CT变换基础上再把空间反演变换P联合进来。

回到非相对论量子力学。对于无自旋的系统，旋转2π角当然和不作任何操作是一样的，因此这时候(6.141)式就退回到之前我们得到的$\Theta^2=1$。但是，对于单个电子这样的自旋1/2粒子的系统，由于旋转2π角会多出一个负号, 所以(6.141)式告诉我们，

$$\Theta^2=-1. \tag{6.142}$$

很明显，这个结论不仅对单个电子的系统成立，对任意奇数个电子的系统也都成立(因为奇数个-1乘起来还是-1)。

时间反演对称性

什么情况下，时间反演变换是量子系统的一个对称性呢？为了看清楚这个问题，我们将时间反演操作$\mathcal{T}$和时间平移操作T_τ放在一起构成一个

时空对称群，所谓一个系统有时间反演对称性，即是要求Θ和时间平移算符$U(\tau)$一起构成这个时空对称群的表示。

我们注意到，在$\mathcal{T}T_\tau$的联合作用下，时间坐标将变换为$t\to-(t+\tau)=-t-\tau$。类似的，我们也很容易发现$T_{-\tau}\mathcal{T}$的联合作用有同样的效果。因此

$$\mathcal{T}T_\tau = T_{-\tau}\mathcal{T}. \tag{6.143}$$

如果Θ和$U(\tau)$一起构成这个时空对称群的表示，那就必定有

$$\Theta U(\tau) = U(-\tau)\Theta. \tag{6.144}$$

取$\tau=\epsilon$为无穷小时间平移，将上式两边展开到ϵ的一阶项，即有

$$\Theta(iH) = -(iH)\Theta. \tag{6.145}$$

注意到，Θ为反线性算符，从而即有

$$\Theta H = H\Theta. \tag{6.146}$$

也即是说，如果一个系统有时间反演对称性，那Θ必定与哈密顿量对易，反过来也一样，如果时间反演变换Θ与哈密顿量对易，那系统就必定有时间反演对称性。

前面我们说了，Θ^2可能等于1，也可能等于-1。如果一个量子系统的$\Theta^2=-1$，而且它有时间反演对称性，那这个系统的每一个能级都将有偶数重简并。这是因为，假设$|\psi_E\rangle$为系统的一个能量为E的哈密顿量本征态，满足$H|\psi_E\rangle=E|\psi_E\rangle$。则由于$\Theta H=H\Theta$, $|\psi'_E\rangle=\Theta|\psi_E\rangle$ 也必定是H的一个能量为E的本征态。可以证明$|\psi'_E\rangle$必定和$|\psi_E\rangle$正交，这是因为，由于$\Theta^2=-1$，即$\Theta^{-1}=-\Theta$，所以$\langle\psi_E|\psi'_E\rangle=\langle\psi_E|\Theta\psi_E\rangle=\langle\Theta^\dagger\psi_E|\psi_E\rangle^*=\langle\psi_E|\Theta^\dagger\psi_E\rangle=\langle\psi_E|\Theta^{-1}\psi_E\rangle=-\langle\psi_E|\Theta\psi_E\rangle=-\langle\psi_E|\psi'_E\rangle$，即$\langle\psi_E|\psi'_E\rangle=-\langle\psi_E|\psi'_E\rangle$, 从而必有$\langle\psi_E|\psi'_E\rangle=0$。因此$|\psi_E\rangle$和$\Theta|\psi_E\rangle$就构成了二重简并。通常称这种偶数重简并为**Kramer简并**。

6.5.3　习题

1. 假设一个量子系统有空间反演对称性，再设$t=0$时系统的初态$|\psi(0)\rangle$有确定的宇称，请证明，系统任意时刻的量子态$|\psi(t)\rangle$都有确定的宇称，而且这个宇称恒定不变。

2. 我们可以定义一个沿着与z轴垂直的$x-y$平面作镜像反射的操作Γ_z，它的定义是$\Gamma_z: x \to x, y \to y, z \to -z$。记$\Gamma_z$诱导的量子变换为$\mathrm{M}_z = U(\Gamma_z)$, 请证明：(1) M_z是一个幺正变换。(2)请导出M_z与$\mathbf{P}$以及$\mathbf{J}$之间的代数关系。(3)系统具有M_z反射对称性的充要条件是$[\mathrm{M}_z, H] = 0$。(4)如果系统具有空间旋转对称性，请证明系统同时具有这种镜像反射对称性M_z的充要条件是它有空间反演对称性。

3. 假设系统具有时间反演对称性，请证明，时间反演算符Θ的本征值不是守恒量。

4. 请证明处于外磁场中的带电粒子系统必定没有时间反演对称性。