第四章 对称性和守恒量

4.1 力学量期待值的时间演化与守恒量

- 在任意态 $|\psi(t)\rangle$下，力学量 $\hat{F}$ 的期待值随时间的演化为

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle=\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\right)\hat{F}|\psi\rangle+\langle\psi|\hat{F}\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle\right)+\langle\psi|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}\right)|\psi\rangle$$

- 考虑到Hamiltonian是厄米算符，我们有

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle,\qquad \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)|=-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}$$

- 于是，力学量期待值随时间的演化方程为

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[\hat{F},\hat{H}]|\psi\rangle+\langle\psi|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}\right)|\psi\rangle$$

- 我们考虑$\hat{F}$不显含时间，即 $\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}=0$。如果$\hat{F}$与$\hat{H}$对易，即

$$[\hat{F},\hat{H}]=0$$

则任何状态下$\hat{F}$的期待值都不随时间变化。因此，我们称满足$[\hat{F},\hat{H}]=0$的力学量 $\hat{F}$ 为守恒量。

4.1 力学量期待值的时间演化与守恒量

- **好量子数**：力学量的本征态可以用相应的本征值来标记（或者对应的特征数值，例如角动量 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的本征态可以用l标记，$\hat{L}_z$ 的本征态可以用m标记），这些数值通常称为量子数，而守恒量对应的量子数通常称为好量子数。

- **Ehrenfest定理**：对于位置和动量算符，我们有

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\mathbf{r}},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\mathbf{r}},\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}+V(\hat{\mathbf{r}})]\rangle = \frac{1}{2i\hbar m}\langle[\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}}^2]\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\mathbf{p}},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\mathbf{p}},V(\hat{\mathbf{r}})]\rangle = -\langle\nabla V(\hat{\mathbf{r}})\rangle$$

❖ 经典力学 $$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \qquad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r})$$

- **能量时间不确定关系**：考虑一个任意的力学量$\hat{A}$，它和$\hat{H}$之间满足

$$\Delta E\Delta A \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle| = \frac{\hbar}{2}|\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle|$$

令 $\Delta t = \Delta A/|\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle|$，则 $\Delta E\Delta t \geq \hbar/2$

4.2 对称性与守恒量的关系

- 在经典力学中，对称性是指Hamiltonian（或者Lagrangian）在某种变换下保持不变的性质。对称性和守恒量之间存在密切关系（Noether 定理）。

  ❖ 例如，Hamiltonian在坐标变换 $q_i \to q_i + \delta q_i$ 下不变，则 $\dfrac{\partial H}{\partial q_i} = 0$

  于是相应的动量满足 $\dfrac{\partial p_i}{\partial t} = 0$，即动量守恒

- 在变换 $\hat{Q}$ 下，量子态的变换为

$$|\psi\rangle \quad \to \quad |\psi'\rangle = \hat{Q}|\psi\rangle$$

  ❖ 这里的变换是指时空平移、旋转和反演等

- 对称变换：使得任意两个量子态$|a\rangle$和$|b\rangle$在变换前后满足如下关系的变换称为对称变换

$$|\langle a'|b'\rangle| = |\langle a|b\rangle|$$

4.2 对称性与守恒量的关系

- **Wigner定理：** 对称变换 $\hat{Q}$ 一定是幺正算符或者反幺正算符
  - 幺正算符是线性算符，反幺正算符是反线性算符
- 我们这里考虑的都是整体变换，变换不依赖于时空坐标
- 在变换 $\hat{Q}$ 下，任意算符 $\hat{A}$ 的期待值也会发生相应的变化

$$\boxed{|\psi'\rangle = \hat{Q}|\psi\rangle}$$

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad \rightarrow \quad \langle\psi'|\hat{A}|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{Q}^\dagger\hat{A}\hat{Q}|\psi\rangle$$

因此，我们可以定义算符的变换为

$$\hat{A} \quad \rightarrow \quad \hat{A}' = \hat{Q}^\dagger\hat{A}\hat{Q}$$

- 系统具有在 $\hat{Q}$ 变换下对称性的条件为

$$\hat{Q}^\dagger\hat{H}\hat{Q} = \hat{H}\text{，即}\quad [\hat{Q},\hat{H}] = 0$$

  - 系统的Hamiltonian在变换下保持不变
  - 这也保证了Schrödinger方程在变换下不变

4.2 对称性与守恒量的关系

4.2.1 连续对称性

- 对于连续变换，$\hat{Q}$ 一定是幺正算符，

$$\hat{Q}^\dagger\hat{Q}=\hat{Q}\hat{Q}^\dagger=1$$

- 对于连续变换，可以考虑一个无穷小变化，这时只需考虑一级近似，

$$\hat{Q}(\eta)=1+i\eta\hat{F} \qquad （\eta \text{ 是无穷小量}）$$

  - 虚数因子 i 是为了保证 $\hat{F}$ 是厄米算符。由于

$$\hat{Q}^\dagger(\eta)\hat{Q}(\eta)=(1-i\eta\hat{F}^\dagger)(1+i\eta\hat{F})=1+i\eta(\hat{F}-\hat{F}^\dagger)=1$$

  于是，$\hat{F}^\dagger=\hat{F}$，即 $\hat{F}$ 是厄米算符，称为变换 $\hat{Q}$ 的生成算符。

- 无穷小变换 $\hat{Q}(\eta)$ 通常可以写为

$$\hat{Q}(\eta)=e^{i\eta\hat{F}}$$

- $\hat{F}$ 通常与力学量相联系，如果系统具有 $\hat{Q}$ 变换下得到对称性，即

  $[\hat{Q},\hat{H}]=0$，那么 $[\hat{F},\hat{H}]=0$，即 $\hat{F}$ 是守恒量

4.2 对称性与守恒量的关系

※ 平移对称性

- 考虑一个一维系统，设平移算符为 $\hat{T}$ 。在无穷小变换下，坐标的变换为

$$x \to x' = x + \delta x$$

- 在此变换下，位置算符 $\hat{x}$ 的本征态的变换为

$$\hat{T}(\delta x)|x\rangle = |x + \delta x\rangle$$

- 对于任意态矢量 $|\psi\rangle$，我们有

$$|\psi'\rangle = \hat{T}(\delta x)|\psi\rangle = \hat{T}(\delta x)\int dx|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int dx|x+\delta x\rangle\langle x|\psi\rangle$$
$$= \int dx'|x'\rangle\langle x' - \delta x|\psi\rangle, \qquad (x' = x + \delta x)$$

❖ 因此，波函数 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ 在平移变换下的变换为

$$\psi'(x) = \langle x|\hat{T}(\delta x)|\psi\rangle = \psi(x - \delta x)$$

4.2 对称性与守恒量的关系

平移算符的具体形式

$$\langle x|\hat{T}(\delta x)|\psi\rangle = \langle x|1+i\delta x\hat{F}|\psi\rangle = \langle x|\psi\rangle + i\delta x\langle x|\hat{F}|\psi\rangle$$

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

$$\boxed{\langle x|\hat{T}(\delta x)|\psi\rangle = \psi(x-\delta x)}$$

❖ 因为 $|x\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 任意，所以 x 方向平移变换的生成算符为

$$\hat{F} = -\hat{p}_x/\hbar \qquad \text{（参考 } \frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = i\langle x|\hat{p}_x|\psi\rangle/\hbar \text{ ）}$$

- 在有平移对称性的情况下，动量 $\hat{p}_x$ 是守恒量
- 有限平移 x 可以通过连续的无穷小平移得到，

$$\hat{T}(x) = \lim_{N\to\infty}\left[e^{-i\frac{x}{N}\frac{\hat{p}_x}{\hbar}}\right]^N = e^{-ix\hat{p}_x/\hbar}$$

4.2 对称性与守恒量的关系

➢ 有了平移算符，可以计算任意算符的变换，例如位置算符 $\hat{x}$ 的变换为

$$\hat{x}' = \hat{T}^\dagger(a)\hat{x}\hat{T}(a) = e^{ia\hat{p}_x/\hbar}\hat{x}e^{-ia\hat{p}_x/\hbar} = \hat{x} + a$$

Baker-Hausdorff 公式

➢ 为了计算 $\hat{f}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}$，$\lambda$ 为任意复数，将 $\hat{f}(\lambda)$ 做级数展开，

$$\hat{f}(\lambda) = \hat{f}(0) + \sum_{n=1}^{\infty}\hat{f}^{(n)}(0)\frac{\lambda^n}{n!} \qquad \text{其中，} \hat{f}(0) = \hat{B}$$

➢ $\hat{f}(\lambda)$ 各阶导数为 $\hat{f}^{(1)}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})e^{-\lambda\hat{A}} = e^{\lambda\hat{A}}[\hat{A},\hat{B}]e^{-\lambda\hat{A}},$

$$\hat{f}^{(2)}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]e^{-\lambda\hat{A}}, \quad \cdots,$$

$$\hat{f}^{(n)}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\underbrace{[\hat{A},[\hat{A},\cdots[\hat{A},[}_{n}\hat{A},\hat{B}\underbrace{]]\cdots]]}_{n}e^{-\lambda\hat{A}}$$

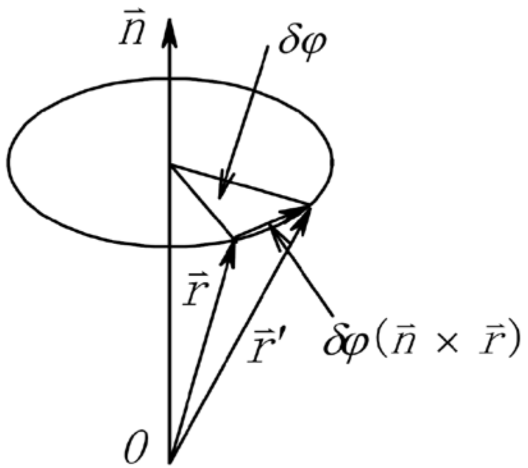
➢ 进而可以得到 $\hat{f}^{(n)}(0)$。因此，我们有

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\hat{C}_n$$

$$\hat{C}_0 = \hat{B}, \quad \hat{C}_1 = [\hat{A},\hat{B}], \quad \hat{C}_2 = [\hat{A},\hat{C}_1], \cdots, \hat{C}_n = [\hat{A},\hat{C}_{n-1}], \cdots$$

4.2 对称性与守恒量的关系

※ 旋转对称性



- 考虑绕任意 $\mathbf{n}$ 轴的无穷小旋转， $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\phi\mathbf{n}\times\mathbf{r}$
- 旋转算符为 $\hat{R}_{\mathbf{n}}(\delta\phi)$， $\hat{R}_{\mathbf{n}}(\delta\phi)|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}+\delta\phi\mathbf{n}\times\mathbf{r}\rangle$
- 波函数的变换为

$$\psi'(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\hat{R}_{\mathbf{n}}(\delta\phi)|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}-\delta\phi\mathbf{n}\times\mathbf{r})$$

- 根据波函数的变换，我们有

$$\langle\mathbf{r}|\hat{R}_{\mathbf{n}}(\delta\phi)|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}) - \delta\phi(\mathbf{n}\times\mathbf{r})\cdot\nabla\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle - i\frac{\delta\phi}{\hbar}\langle\mathbf{r}|(\mathbf{n}\times\hat{\mathbf{r}})\cdot\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle$$
$$= \langle\mathbf{r}|\psi\rangle - i\frac{\delta\phi}{\hbar}\langle\mathbf{r}|\mathbf{n}\cdot(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})|\psi\rangle = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle - i\frac{\delta\phi}{\hbar}\langle\mathbf{r}|\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}|\psi\rangle,$$

- 因此，旋转变换的生成算符是 $\hat{F} = -\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar$
- 无穷小旋转变换为 $\hat{R}_{\mathbf{n}}(\delta\phi) = e^{-i\delta\phi\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar}$
- 有限角度旋转的变换为 $\hat{R}_{\mathbf{n}}(\phi) = e^{-i\phi\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}/\hbar}$
- 如果系统具有旋转对称性，那么角动量守恒

4.2 对称性与守恒量的关系

4.2.2 离散对称性

- 离散变换下不能选择无穷小变换。我们以空间反演变换为例子
- 在空间反演变换（也是一种宇称变换）$\hat{\Pi}$ 下，坐标的变换为 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$
- 位置算符 $\hat{\mathbf{r}}$ 和动量算符 $\hat{\mathbf{p}}$ 的本征态的变换为

$$\hat{\Pi}|\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle, \quad \hat{\Pi}|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$$

- $\hat{\Pi}$ 是么正算符
- 位置算符和动量算符的变换为 $\hat{\Pi}^\dagger\hat{\mathbf{r}}\hat{\Pi} = -\hat{\mathbf{r}}, \quad \hat{\Pi}^\dagger\hat{\mathbf{p}}\hat{\Pi} = -\hat{\mathbf{p}}$
- 对任意态矢量 $|\psi\rangle$，

$$\hat{\Pi}|\psi\rangle = \hat{\Pi}\int d^3r|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \int d^3r|-\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle$$

$$= -\int_{+\infty}^{-\infty} d^3r|\mathbf{r}\rangle\langle-\mathbf{r}|\psi\rangle = \int d^3r|\mathbf{r}\rangle\langle-\mathbf{r}|\psi\rangle$$

- 在空间反演下，波函数 $\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle$ 的变换为

$$\psi'(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\hat{\Pi}|\psi\rangle = \psi(-\mathbf{r})$$

4.2 对称性与守恒量的关系

- 根据空间反演变换的定义，显然有

$$\hat{\Pi}^2|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle, \qquad \Rightarrow \qquad \hat{\Pi}^2 = 1$$

  - 所以 $\hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi}$，即 $\hat{\Pi}$ 是厄米算符。
  - $\hat{\Pi}$ 的本征方程为 $\hat{\Pi}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$
  - 再用 $\hat{\Pi}$ 作用一次，$\hat{\Pi}^2|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle = |\psi\rangle$
  - 因此 $\hat{\Pi}$ 的本征值只有两个，+1 或者−1。

$\lambda = +1$ 的本征态称为偶宇称态，$\lambda = -1$ 的本征态称为奇宇称态。

- 如果系统具有空间反演对称性，那么 $[\hat{\Pi}, \hat{H}] = 0$，系统宇称守恒

- 例子：一维谐振子。由于 $[\hat{\Pi}, \hat{H}] = 0$，其本征态具有确定的宇称。

设 $\hat{\Pi}|n\rangle = \alpha_n|n\rangle$，

利用 $\hat{\Pi}^\dagger\hat{a}\hat{\Pi} = -\hat{a}$，

$$\hat{\Pi}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{\Pi}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger\hat{\Pi}|n-1\rangle$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger\alpha_{n-1}|n-1\rangle = -\alpha_{n-1}|n\rangle,$$

$$\alpha_n = -\alpha_{n-1}$$
$$\alpha_n = (-1)^n\alpha_0$$

基态具有偶宇称，所以

$$\hat{\Pi}|n\rangle = (-1)^n|n\rangle$$

4.3 时间反演对称性

- 在时间反演变换下，时间 t 变换为 $t \to -t$，而坐标不受影响。
- 时间反演变换 $\hat{\Theta}$ 下位置和动量的本征态的变换分别为

$$\hat{\Theta}|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle, \qquad \hat{\Theta}|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$$

- 时间反演算符 $\hat{\Theta}$ 是反幺正算符
  - 反幺正算符满足

$$\langle\alpha'|\beta'\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$$

其中 $|\alpha'\rangle = \hat{\Theta}|\alpha\rangle$，$|\beta'\rangle = \hat{\Theta}|\beta\rangle$。

  - 反幺正算符同时也是反线性算符

$$\hat{\Theta}(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha^*\hat{\Theta}|\alpha\rangle + c_\beta^*\hat{\Theta}|\beta\rangle$$

- 在时间反演变换下，位置算符和动量算符的变换为

$$\hat{\Theta}\hat{\mathbf{r}}\hat{\Theta}^{-1} = \hat{\mathbf{r}}, \quad \hat{\Theta}\hat{\mathbf{p}}\hat{\Theta}^{-1} = -\hat{\mathbf{p}}$$

4.3 时间反演对称性

时间反演算符的表示

- 对于任意一个态矢量 $|\psi\rangle$，在一组基 $\{|n\rangle\}$下，有

$$|\psi'\rangle = \hat{\Theta}|\psi\rangle = \sum_n \hat{\Theta}|n\rangle\langle n|\psi\rangle^* = \sum_n |n'\rangle\langle\psi|n\rangle$$

- $\hat{\Theta}$中除了包含对展开系数取复共轭的操作 $\hat{K}$ 之外，还包括对基矢的变换
- $\hat{K}$是反幺正算符，于是对基矢的变换需要通过幺正算符实现
- 我们将时间反演算符表示为

$$\hat{\Theta} = \hat{U}\hat{K} \qquad \text{（其中 } \hat{U} \text{ 是幺正算符）}$$

- $\hat{K}$对基矢的作用不产生任何效果
- $\hat{\Theta}$的逆为 $\hat{\Theta}^{-1} = \hat{K}^{-1}\hat{U}^{-1} = \hat{K}\hat{U}^{-1} = \hat{K}\hat{U}^{\dagger}$

- 对任意态矢量 $|\psi\rangle$，

$$\hat{\Theta}|\psi\rangle = \hat{\Theta}\int d^3r|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \int d^3r|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\psi\rangle^*$$

❖ 波函数 $\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle$ 的变换为 $\psi'(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\hat{\Theta}|\psi\rangle = \psi^*(\mathbf{r})$

4.3 时间反演对称性

- 时间反演算符 $\hat{\Theta}$ 作用两次，

$$\hat{\Theta}^2 = \hat{U}\hat{K}\hat{U}\hat{K} = \hat{U}\hat{U}^* = \hat{U}(\hat{U}^T)^{-1} = \alpha \qquad \text{（其中}\,\alpha\,\text{是相位因子）}$$

  - $\hat{U} = \alpha\hat{U}^T \Rightarrow \hat{U}^T = \alpha\hat{U}$，因此，$\hat{U} = \alpha^2\hat{U}$
  - 这表明 $\alpha = \pm 1$，相应地，$\hat{\Theta}^2 = \pm 1$，即 $\hat{\Theta}^2$ 是厄米算符，本征值为 ± 1
- 时间反演算符不是厄米算符，因此时间反演对称性不对应守恒量
- 与时间反演对称性有关的一个例子：一个具有时间反演对称性的系统，如果能级 E_n 不简并，那么相应的本征函数一定可以表示为实函数。
  - 因为系统具有时间反演对称性，所以

$$\hat{\Theta}\hat{H}|n\rangle = \hat{H}\hat{\Theta}|n\rangle = E_n\hat{\Theta}|n\rangle$$

  - $|n\rangle$ 和 $\hat{\Theta}|n\rangle$ 对应相同的本征能量，由于 E_n 不简并，$|n\rangle$ 和 $\hat{\Theta}|n\rangle$ 代表同一个态，而 $\langle\mathbf{r}|\hat{\Theta}|n\rangle = \langle\mathbf{r}|n\rangle^*$，所以 $\langle\mathbf{r}|n\rangle = e^{i\delta}\langle\mathbf{r}|n\rangle^*$，$\langle\mathbf{r}|n\rangle$ 一定可以表示为实函数。
- 对于半整数自旋的系统，时间反演对称性 $\Rightarrow$ Kramers 简并

4.4 应用举例：轨道角动量本征态的性质

- 量子数 m 的取值决定角动量本征态 $|l,m\rangle$ 在旋转操作下的性质
  - 绕 z 轴的旋转操作为 $\hat{R}_z(\phi)=e^{-i\phi\hat{L}_z/\hbar}$
  - 于是 $\hat{R}_z(\phi)|l,m\rangle=e^{-im\phi}|l,m\rangle$
  - 当旋转角度为 2π 时，如果 m 为整数，则 $|l,m\rangle$ 不变，如果 m 是半整数，则 $|l,m\rangle$ 改变符号
  - 实空间转动的周期是 2π，轨道角动量的量子数 m 是整数
  - 电子自旋的量子数 m 是半整数

轨道角动量本征态$|l,m\rangle$的宇称

- 轨道角动量是赝矢量，在空间反演下不变，

$$\hat{\Pi}^\dagger\hat{\mathbf{L}}\hat{\Pi}=\hat{\Pi}^\dagger(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})\hat{\Pi}=\hat{\Pi}^\dagger\hat{\mathbf{r}}\hat{\Pi}\times\hat{\Pi}^\dagger\hat{\mathbf{p}}\hat{\Pi}=\hat{\mathbf{L}}$$

  - 即 $[\hat{\Pi},\hat{\mathbf{L}}]=0$，$[\hat{\Pi},\hat{\mathbf{L}}^2]=0$
  - 因此，$|l,m\rangle$ 有确定的宇称

4.4 应用举例：轨道角动量本征态的性质

➢ 因为 $[\hat{\Pi}, \hat{L}_\pm] = 0$ ，所以 $\hat{L}_\pm$不改变 $|l,m\rangle$ 的宇称，即 $|l,m\rangle$ 的宇称只依赖于 l，而与 m 无关。

$|l, m\rangle$的宇称与l的关系

❖ $\hat{\mathbf{r}}|l,m\rangle$有确定的宇称，并且与 $|l,m\rangle$ 的宇称不同

❖ $\hat{\mathbf{r}}$ 和 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的对易关系，

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{L}}^2] = -2i\hbar\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{L}} - 2\hbar^2\hat{\mathbf{r}}$$

❖ 该对易子与 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的对易关系，

$$[[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{L}}^2], \hat{\mathbf{L}}^2] = 2\hbar^2(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2\hat{\mathbf{r}})$$

❖ 利用这个关系，我们有

$$\langle l', m'|[[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{L}}^2], \hat{\mathbf{L}}^2]|l,m\rangle = 2\hbar^2\langle l', m'|(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2\hat{\mathbf{r}})|l,m\rangle$$

即

$$\hbar^4[l'(l'+1)-l(l+1)]^2\langle l',m'|\hat{\mathbf{r}}|l,m\rangle = 2\hbar^4[l(l+1)+l'(l'+1)]\langle l',m'|\hat{\mathbf{r}}|l,m\rangle$$

4.4 应用举例：轨道角动量本征态的性质

- 我们需要的是满足 $\langle l', m'|\hat{\mathbf{r}}|l, m\rangle \neq 0$ 的解，所以

$$[l'(l'+1) - l(l+1)]^2 = 2[l(l+1) + l'(l'+1)]$$

还可以改写为

$$[(l'+l+1)^2 - 1][(l'-l)^2 - 1] = 0$$

- 解得

$$l' = l \quad \text{（不满足要求），} \qquad l' = l \pm 1$$

即 l 变化 ± 1，$|l, m\rangle$ 宇称要改变

- $|l, m\rangle$ 的宇称可以表示为 $\eta(-1)^l$

- η 对应 $|0, 0\rangle$ 的宇称。由于 $\hat{L}_x|0,0\rangle = \hat{L}_y|0,0\rangle = \hat{L}_z|0,0\rangle = 0$，$|0,0\rangle$ 绕任意轴旋转任意角度都不变，这说明 $\langle \mathbf{r}|0,0\rangle$ 与 (θ, ϕ) 无关，因此，$\eta = 1$。

$$\hat{\Pi}|l, m\rangle = (-1)^l |l, m\rangle$$

4.4 应用举例：轨道角动量本征态的性质

时间反演变换对$|l, m\rangle$的作用

- 利用 $\hat{\Theta}\hat{L}_z = -\hat{L}_z\hat{\Theta}$，有 $\hat{L}_z\hat{\Theta}|lm\rangle = -\hat{\Theta}\hat{L}_z|lm\rangle = -m\hbar\hat{\Theta}|lm\rangle$

  因此，$\hat{\Theta}|lm\rangle \propto |l,-m\rangle$。设 $\hat{\Theta}|lm\rangle = \beta_m|l,-m\rangle$

- 利用 $\hat{\Theta}\hat{\mathbf{L}}\hat{\Theta}^{-1} = -\hat{\mathbf{L}}$，有 $\hat{\Theta}\hat{L}_{\pm}\hat{\Theta}^{-1} = -\hat{L}_{\mp}$，即 $\hat{\Theta}\hat{L}_{\pm} = -\hat{L}_{\mp}\hat{\Theta}$，于是

$$\hat{L}_+\hat{\Theta}|lm\rangle = \beta_m\hat{L}_+|l,-m\rangle = \beta_m\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\hbar|l,-m+1\rangle$$

$$= -\hat{\Theta}\hat{L}_-|lm\rangle = -\beta_{m-1}\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\hbar|l,-m+1\rangle,$$

  因此，$\beta_m = -\beta_{m-1}, \qquad \Rightarrow \qquad \beta_m = \eta(-1)^m$

- $\hat{\Theta}^2$ 的本征值为 ±1，即 $\eta^2 = \pm1$ ，而 η 是常数，不依赖于 m ，所以 η 的相位没有意义，因此，我们有

$$\hat{\Theta}|lm\rangle = (-1)^m|l,-m\rangle$$

$$\Rightarrow \quad Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m Y^*_{l,-m}(\theta,\phi)$$