学习笔记

杨锦

2021年

目 录

第一章　自旋1/2系统的泡利矩阵以及其时间反演

§1.0.1　算符的符号约定

矢量算符：$\hat{\mathbf{A}}$

算符的分量写作：$\hat{A}_\alpha$

算符的矩阵表示：$\mathbf{A}_\alpha$，$\alpha = x, y, z$

幺正算符：$\hat{U}$，$\hat{U}^\dagger$

反幺正算符：$\hat{\mathcal{U}}$，$\hat{\mathcal{U}}^\dagger$，

时间反演算符（反幺正算符）：$\hat{\mathcal{T}}$，$\hat{\mathcal{T}}^\dagger$

为了书写简洁，约定$\hbar = 1$

§1.1　自旋算符到泡利矩阵

本小节拟用三个基本的自旋算符$\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$来描述自旋1/2的系统。

假设他们满足关系式($\hbar \equiv 1$)

$$\hat{S}_\alpha^2 = \frac{1}{4}; (\alpha = x, y, z) \tag{1.1}$$

或者关系式

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4} = s(s+1); (\alpha = x, y, z) \tag{1.2}$$

这里$s \equiv 1/2$表示自旋的大小。

以及他们满足的对易关系

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = i\hat{S}_z \tag{1.3}$$

$$\left[\hat{S}_y, \hat{S}_z\right] = i\hat{S}_x \tag{1.4}$$

$$\left[\hat{S}_z, \hat{S}_x\right] = i\hat{S}_y \tag{1.5}$$

此外还可以给出由两个基本的自旋算符分量构造的算符，定义为

$$\hat{S}_\pm \equiv \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \tag{1.6}$$

结合自旋的对易关系以及自旋算符的平方$\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{3}{4}$，得到下面满足的关系式为：

$$\hat{S}_+\hat{S}_- = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z = \frac{3}{4} - \hat{S}_z^2 + \hat{S}_z \tag{1.7}$$

$$\hat{S}_-\hat{S}_+ = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 - \hat{S}_z = \frac{3}{4} - \hat{S}_z^2 - \hat{S}_z \tag{1.8}$$

有了$\hat{S}_+$，$\hat{S}_-$这两个算符，可以把对易关系，

$$\left[\hat{S}_x, i\hat{S}_y\right] = i\hat{S}_z \tag{1.9}$$

$$\left[\hat{S}_y, i\hat{S}_z\right] = i\hat{S}_x \tag{1.10}$$

$$\left[\hat{S}_z, i\hat{S}_x\right] = i\hat{S}_y \tag{1.11}$$

等价地由这组对易关系写为：

$$\left[\hat{S}_+,\hat{S}_-\right]=2\hat{S}_z \tag{1.12}$$
$$\left[\hat{S}_z,\hat{S}_+\right]=\hat{S}_+ \tag{1.13}$$

具体的等价对应关系如下

$$\left[\hat{S}_+,\hat{S}_-\right]=2\hat{S}_z \Longleftrightarrow \left[\hat{S}_x,i\hat{S}_y\right]=i\hat{S}_z \tag{1.14}$$
$$\mathrm{Re}\left[\hat{S}_z,\hat{S}_+\right]=\mathrm{Re}\,\hat{S}_+ \Longleftrightarrow \left[\hat{S}_y,\hat{S}_z\right]=i\hat{S}_x \tag{1.15}$$
$$\mathrm{Im}\left[\hat{S}_z,\hat{S}_+\right]=\mathrm{Im}\,\hat{S}_+ \Longleftrightarrow \left[\hat{S}_z,\hat{S}_x\right]=i\hat{S}_y \tag{1.16}$$

此外，当对$\left[\hat{S}_z,\hat{S}_+\right]=\hat{S}_+$的两边取厄密共轭，

$$\left(\left[\hat{S}_z,\hat{S}_+\right]\right)^\dagger=\left(\hat{S}_+\right)^\dagger$$
$$\left[\hat{S}_-,\hat{S}_z\right]=\hat{S}_- \Rightarrow \left[\hat{S}_z,\hat{S}_-\right]=-\hat{S}_- \tag{1.17}$$

即得到

$$\left[\hat{S}_z,\hat{S}_-\right]=-\hat{S}_- \tag{1.18}$$

将上式与用$\hat{S}_+$，$\hat{S}_-$表示的自旋算符满足的对易关系归纳如下

$$\left[\hat{S}_+,\hat{S}_-\right]=2\hat{S}_z \tag{1.19}$$
$$\left[\hat{S}_z,\hat{S}_+\right]=\hat{S}_+ \Longleftrightarrow \hat{S}_z\hat{S}_+=\hat{S}_+\left(\hat{S}_z+1\right) \tag{1.20}$$
$$\left[\hat{S}_z,\hat{S}_-\right]=-\hat{S}_- \Longleftrightarrow \hat{S}_z\hat{S}_-=\hat{S}_-\left(\hat{S}_z-1\right) \tag{1.21}$$

再结合关系式$\hat{S}_\alpha^2=1/4$，就可以得到有关自旋1/2的所有信息。

假设λ，$|\psi\rangle$分别是$\hat{S}_\alpha$的本征值和本征态

$$\hat{S}_\alpha|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle \tag{1.22}$$

再把$\hat{S}_\alpha$作用到上式的两边，注意，由于前提假设要求$\hat{S}_\alpha^2=1/4$，这个假设是保证力学量体系描述的是自旋1/2系统，得到

$$\hat{S}_\alpha^2|\psi\rangle=\lambda^2|\psi\rangle=\frac{1}{4}|\psi\rangle \tag{1.23}$$
$$\Rightarrow\left(\lambda^2-\frac{1}{4}\right)|\psi\rangle=0 \tag{1.24}$$

因为态矢不为零，于是得到自旋1/2系统的本征值有两个，$\lambda=\pm\frac{1}{2}$。

§1.1.1 构建泡利算符

假如规定自旋1/2系统的自旋分量$\hat{S}_z$本征值为$\frac{1}{2}$的本征态为自旋向上$|\uparrow\rangle$，本征值为$-\frac{1}{2}$的本征态为自旋向下$|\downarrow\rangle$（为什么用$\hat{S}_z$，因为前面讨论中，与原始对易关系等价的另一组对易关系只有$\hat{S}_z$还存在，而这种选择将会简化计算）

$$\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle \tag{1.25}$$

$$\hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle \tag{1.26}$$

因此在基矢$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$下，算符的矩阵表示可以写为

$$\mathbf{S}_\alpha \equiv \begin{bmatrix} \langle\uparrow|\hat{S}_\alpha|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{S}_\alpha|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\hat{S}_\alpha|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{S}_\alpha|\downarrow\rangle \end{bmatrix} \tag{1.27}$$

于是对于$\hat{S}_z$的矩阵表示

$$\mathbf{S}_z \equiv \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{1.28}$$

想得知$\hat{S}_x, \hat{S}_y$的矩阵表示，不妨先知道$\hat{S}_+$和$\hat{S}_-$的矩阵表示，因为

$$\hat{S}_x = \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} \tag{1.29}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i} \tag{1.30}$$

根据关系式

$$\hat{S}_z\hat{S}_+ = \hat{S}_+\left(\hat{S}_z + 1\right) \tag{1.31}$$

$$\hat{S}_z\hat{S}_- = \hat{S}_-\left(\hat{S}_z - 1\right) \tag{1.32}$$

1. 将$\hat{S}_z\hat{S}_+ = \hat{S}_+\left(\hat{S}_z + 1\right)$左右两边同时作用到$\hat{S}_z$的本征矢$|\uparrow\rangle$中，得到

$$\hat{S}_z\hat{S}_+|\uparrow\rangle = \hat{S}_+\left(\hat{S}_z + 1\right)|\uparrow\rangle = \frac{3}{2}\hat{S}_+|\uparrow\rangle \tag{1.33}$$

$$\hat{S}_z\left(\hat{S}_+|\uparrow\rangle\right) = \frac{3}{2}\left(\hat{S}_+|\uparrow\rangle\right) \tag{1.34}$$

这个方程要么是说$\frac{3}{2}$也是$\hat{S}_z$的一个本征值，或者是$\hat{S}_+|\uparrow\rangle = 0$。显然只有后者才成立。

2. 将$\hat{S}_z\hat{S}_+ = \hat{S}_+\left(\hat{S}_z + 1\right)$左右两边同时作用到$\hat{S}_z$的本征矢$|\downarrow\rangle$中，得到

$$\hat{S}_z\hat{S}_+|\downarrow\rangle = \hat{S}_+\left(\hat{S}_z + 1\right)|\downarrow\rangle = \frac{1}{2}\hat{S}_+|\downarrow\rangle \tag{1.35}$$

$$\hat{S}_z\left(\hat{S}_+|\downarrow\rangle\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{S}_+|\downarrow\rangle\right) \tag{1.36}$$

这个方程说明$\hat{S}_+|\downarrow\rangle$也是$\hat{S}_z$本征值为$\frac{1}{2}$的本征态。即$\hat{S}_+|\downarrow\rangle = c_+|\uparrow\rangle$

这里有一个未归一化的系数，因此将$\hat{S}_+|\downarrow\rangle = c_+|\uparrow\rangle$两边分别做内积

$$\langle\downarrow|\hat{S}_-\hat{S}_+|\downarrow\rangle = \langle\uparrow|c_+^*c_+|\uparrow\rangle = |c_+|^2 \tag{1.37}$$

对于左边，再根据$\hat{S}_-\hat{S}_+ = \frac{3}{4} - \hat{S}_z^2 - \hat{S}_z$,

$$\langle\downarrow|\hat{S}_-\hat{S}_+|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|\frac{3}{4} - \hat{S}_z^2 - \hat{S}_z|\downarrow\rangle = 1 \tag{1.38}$$

等式左右两边相等

$$|c_+|^2 = 1 \tag{1.39}$$

解得

$$c_+ = e^{i\gamma_+} \tag{1.40}$$

因为这里的方程唯一，$\hat{S}_+|\downarrow\rangle = c_+|\uparrow\rangle$，当$\hat{S}_+$表达式显示知道，那么这里的相位$\gamma_+$唯一确定。

3. 将$\hat{S}_z\hat{S}_- = \hat{S}_-\left(\hat{S}_z - 1\right)$左右两边同时作用到$\hat{S}_z$的本征矢$|\uparrow\rangle$中，得到

$$\hat{S}_z\hat{S}_-|\uparrow\rangle = \hat{S}_-\left(\hat{S}_z - 1\right)|\uparrow\rangle = -\frac{1}{2}\hat{S}_-|\uparrow\rangle \tag{1.41}$$

$$\hat{S}_z\left(\hat{S}_-|\uparrow\rangle\right) = -\frac{1}{2}\left(\hat{S}_-|\uparrow\rangle\right) \tag{1.42}$$

这个方程说明$\hat{S}_-|\uparrow\rangle$是$\hat{S}_z$本征值为$-\frac{1}{2}$的本征态。即$\hat{S}_-|\uparrow\rangle = c_-|\downarrow\rangle$

这里还剩下一个未归一化的系数，因此将$\hat{S}_-|\uparrow\rangle = c_-|\downarrow\rangle$两边分别做内积

$$\langle\uparrow|\hat{S}_+\hat{S}_-|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|c_-^*c_-|\downarrow\rangle = |c_-|^2 \tag{1.43}$$

对于左边，再根据$\hat{S}_+\hat{S}_- = \frac{3}{4} - \hat{S}_z^2 + \hat{S}_z$,

$$\langle\uparrow|\hat{S}_+\hat{S}_-|\uparrow\rangle = \langle\uparrow|\frac{3}{4} - \hat{S}_z^2 + \hat{S}_z|\uparrow\rangle = 1 \tag{1.44}$$

等式左右两边相等

$$|c_-|^2 = 1 \tag{1.45}$$

解得

$$c_- = e^{i\gamma_-} \tag{1.46}$$

4. 将$\hat{S}_z\hat{S}_- = \hat{S}_-\left(\hat{S}_z - 1\right)$左右两边同时作用到$\hat{S}_z$的本征矢$|\downarrow\rangle$中，得到

$$\hat{S}_z\hat{S}_-|\downarrow\rangle = \hat{S}_-\left(\hat{S}_z - 1\right)|\downarrow\rangle = -\frac{3}{2}\hat{S}_-|\downarrow\rangle \tag{1.47}$$

$$\hat{S}_z\left(\hat{S}_-|\downarrow\rangle\right) = -\frac{3}{2}\left(\hat{S}_-|\downarrow\rangle\right) \tag{1.48}$$

这个方程要么是说$\frac{-3}{2}$也是$\hat{S}_z$的一个本征值，或者是$\hat{S}_-|\downarrow\rangle = 0$。显然只有当为后者时才成立。

根据前面的讨论，最后总结得到

$$\hat{S}_{+}|\uparrow\rangle = 0 \tag{1.49}$$
$$\hat{S}_{+}|\downarrow\rangle = e^{i\gamma_{+}}|\uparrow\rangle \tag{1.50}$$
$$\hat{S}_{-}|\uparrow\rangle = e^{i\gamma_{-}}|\downarrow\rangle \tag{1.51}$$
$$\hat{S}_{-}|\downarrow\rangle = 0 \tag{1.52}$$

到目前为止，前面所用到的对易关系，仅剩下$\left[\hat{S}_{+},\hat{S}_{-}\right] = 2\hat{S}_{z}$这个对易关系还没用，将其左右两边都作用到$\hat{S}_{z}$的本征矢$|\uparrow\rangle$和$|\downarrow\rangle$上

$$\left[\hat{S}_{+},\hat{S}_{-}\right]|\uparrow\rangle = 2\hat{S}_{z}|\uparrow\rangle \tag{1.53}$$
$$\hat{S}_{+}\hat{S}_{-}|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \tag{1.54}$$
$$e^{i\gamma_{+}}e^{i\gamma_{-}}|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \tag{1.55}$$

得到

$$e^{i\gamma_{+}}e^{i\gamma_{-}} = 1$$

于是得到两个系数之间满足的关系：$-\gamma_{+} = \gamma_{-} = \gamma$

因此，再一次简化，得到：

$$\hat{S}_{+}|\uparrow\rangle = 0 \tag{1.56}$$
$$\hat{S}_{+}|\downarrow\rangle = e^{-i\gamma}|\uparrow\rangle \tag{1.57}$$
$$\hat{S}_{-}|\uparrow\rangle = e^{i\gamma}|\downarrow\rangle \tag{1.58}$$
$$\hat{S}_{-}|\downarrow\rangle = 0 \tag{1.59}$$

有了$\hat{S}_{+}$作用在$\hat{S}_{z}$的本征态上的关系式后，就可以写出在$\hat{S}_{z}$的本征矢构成的完备基下的矩阵表示

$$\mathbf{S}_{+} \equiv \begin{bmatrix} \langle\uparrow|\hat{S}_{+}|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{S}_{+}|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\hat{S}_{+}|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{S}_{+}|\downarrow\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\gamma} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{1.60}$$
$$\mathbf{S}_{-} \equiv \begin{bmatrix} \langle\uparrow|\hat{S}_{-}|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{S}_{-}|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|\hat{S}_{-}|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{S}_{-}|\downarrow\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ e^{-i\gamma} & 0 \end{bmatrix} \tag{1.61}$$

亦或者利用厄密共轭的关系，$\mathbf{S}_{-} \equiv (\mathbf{S}_{+})^{\dagger}$，得到$\mathbf{S}_{-}$的矩阵表示。

再根据

$$\hat{S}_{x} = \frac{\hat{S}_{+}+\hat{S}_{-}}{2} \tag{1.62}$$
$$\hat{S}_{y} = \frac{\hat{S}_{+}-\hat{S}_{-}}{2i} \tag{1.63}$$

于是$\hat{S}_x$，$\hat{S}_y$的矩阵表示为

$$\mathbf{S}_x = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & e^{i\gamma} \\ e^{-i\gamma_-} & 0 \end{bmatrix} \tag{1.64}$$

$$\mathbf{S}_y = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -ie^{i\gamma} \\ ie^{-i\gamma} & 0 \end{bmatrix} \tag{1.65}$$

$$\mathbf{S}_x = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & e^{i\gamma} \\ e^{-i\gamma_-} & 0 \end{bmatrix} \tag{1.66}$$

$$\mathbf{S}_y = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -ie^{i\gamma} \\ ie^{-i\gamma_-} & 0 \end{bmatrix} \tag{1.67}$$

$$\mathbf{S}_z = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{1.68}$$

又根据泡利算符$\sigma_{x,y,z} = 2\mathbf{S}_{x,,y,z}$

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\gamma} \\ e^{-i\gamma_-} & 0 \end{bmatrix}, \tag{1.69}$$

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -ie^{i\gamma} \\ ie^{-i\gamma_-} & 0 \end{bmatrix}, \tag{1.70}$$

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{1.71}$$

到目前前为止，我们发现基本的对易关系和前提假设$\hat{S}_\alpha^2 = 1/4$已经都用了，但得到的泡利矩阵表示并没有和习以为常的表示一致。在前文的讨论中，在$\hat{S}_z$的本征态下展开得到的泡利矩阵带有一个无法确定的相位。

如果能够找到一组新的态，在新的态下满足关系式

$$\hat{S}_+|\tilde{\uparrow}\rangle = 0 \tag{1.72}$$

$$\hat{S}_+|\tilde{\downarrow}\rangle = |\tilde{\uparrow}\rangle \tag{1.73}$$

$$\hat{S}_-|\tilde{\uparrow}\rangle = |\tilde{\downarrow}\rangle \tag{1.74}$$

$$\hat{S}_-|\tilde{\downarrow}\rangle = 0 \tag{1.75}$$

很自然的得到的泡利矩阵表示为

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{1.76}$$

当我们选取了一组良好的基态后$|\tilde{\uparrow}\rangle$，$|\tilde{\downarrow}\rangle$，就不会有在这组基$|\tilde{\uparrow}\rangle$，$|\tilde{\downarrow}\rangle$下会出现的额外相位$\gamma$

假设基$|\tilde{\uparrow}\rangle$，$|\tilde{\downarrow}\rangle$与之前基$|\uparrow\rangle$，$|\downarrow\rangle$满足关系

$$|\tilde{\uparrow}\rangle \equiv e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle \tag{1.77}$$

$$|\tilde{\downarrow}\rangle \equiv e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle \tag{1.78}$$

在量子力学中，任何表象的基态矢量都有一个整体的相位不确定性。

很显然，当$|\uparrow\rangle$，$|\downarrow\rangle$是$\hat{S}_z$的一组本征态的话，那么$|\tilde{\uparrow}\rangle$，$|\tilde{\downarrow}\rangle$同样也是，其对应的本征值都是$\pm\frac{1}{2}$。

将态矢关系带入，于是得到

$$\hat{S}_+|\tilde{\uparrow}\rangle = 0 \Rightarrow \hat{S}_+e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle = 0 \tag{1.79}$$

$$\hat{S}_+|\tilde{\downarrow}\rangle = |\tilde{\uparrow}\rangle \Rightarrow \hat{S}_+e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle = e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle \tag{1.80}$$

$$\hat{S}_-|\tilde{\uparrow}\rangle = |\tilde{\downarrow}\rangle \Rightarrow \hat{S}_-e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle = e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle \tag{1.81}$$

$$\hat{S}_-|\tilde{\downarrow}\rangle = 0 \Rightarrow \hat{S}_-e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle = 0 \tag{1.82}$$

于是得到：

$$\hat{S}_+e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle = \hat{S}_-e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle = 0 \tag{1.83}$$

$$e^{i\theta_\downarrow}\hat{S}_+|\downarrow\rangle = e^{i\theta_\downarrow}e^{-i\gamma}|\uparrow\rangle = e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle \tag{1.84}$$

$$e^{i\theta_\uparrow}\hat{S}_-|\uparrow\rangle = e^{i\theta_\uparrow}e^{i\gamma}|\downarrow\rangle = e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle \tag{1.85}$$

进一步地：

$$\hat{S}_+|\tilde{\uparrow}\rangle = 0 \tag{1.86}$$

$$\hat{S}_+|\tilde{\downarrow}\rangle = e^{-i\left(\theta_\uparrow-\theta_\downarrow\right)}e^{-i\gamma}|\tilde{\uparrow}\rangle \tag{1.87}$$

$$\hat{S}_-|\tilde{\uparrow}\rangle = e^{i\left(\theta_\uparrow-\theta_\downarrow\right)}e^{i\gamma}|\tilde{\downarrow}\rangle \tag{1.88}$$

$$\hat{S}_-|\tilde{\downarrow}\rangle = 0 \tag{1.89}$$

如果当相位$(\theta_\downarrow-\theta_\uparrow)=\gamma$，能够简化一系列计算。这里的相位有两种不同来源，回顾之前的推导步骤，我们首先是先假定$\hat{S}_z$无穷多本征矢簇中的其中一组随机的本征矢，即$|\uparrow\rangle$，$|\downarrow\rangle$为参考，最出色的本征矢$|\tilde{\uparrow}\rangle$，$|\tilde{\downarrow}\rangle$与参考的本征矢之间存在的相对相位引入了$\theta_\uparrow$，$\theta_\downarrow$。而$\gamma$是因为满足算符代数关系$\hat{S}_+|\downarrow\rangle = e^{-i\gamma}|\uparrow\rangle$时所引入的，并由这个方程所决定的相位。

总是能找到一组合理的相位，当且仅当相位满足$(\theta_\downarrow-\theta_\uparrow)=\gamma$时，关系则自然简化为：

$$\hat{S}_+|\tilde{\uparrow}\rangle = 0 \tag{1.90}$$

$$\hat{S}_+|\tilde{\downarrow}\rangle = |\tilde{\uparrow}\rangle \tag{1.91}$$

$$\hat{S}_-|\tilde{\uparrow}\rangle = |\tilde{\downarrow}\rangle \tag{1.92}$$

$$\hat{S}_-|\tilde{\downarrow}\rangle = 0 \tag{1.93}$$

得到泡利矩阵为

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{1.94}$$

有了算符的矩阵表示，按照矩阵求特征值，特征矢的方法就可以很容易的求出算符的本征矢和本征值。

应用

一个自旋1/2系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \omega_0 \hat{S}_x \tag{1.95}$$

求解系统的本征值和本征矢：

已经知道了自旋算符在基矢$|\uparrow\rangle$，$|\downarrow\rangle$的矩阵表示

$$\hat{H} = \omega_0 \hat{S}_x = \frac{\omega_0}{2}\sigma_x \tag{1.96}$$

很容易给出其本征值分别为：$\pm\frac{\omega_0}{2}$

相应的本征矢

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle \tag{1.97}$$

§1.1.1.1 补充

对于自旋1/2的例子，由于自旋算符没有经典对应量，无法给出显式的算符表达式，因此上述论述较抽象。

对于角动量算符，已知$\hat{L}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$，$\hat{L}_+ = e^{i\varphi}$

轨道角动量满足的本征方程为：

$$\hat{L}_z |m\rangle = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}|m\rangle = m|m\rangle$$

则解得

$$|m\rangle = Ce^{im\varphi}$$

由于归一化条件，因此

$$C = e^{i\gamma}$$

即本征值为m对应的本征函数$|m\rangle = e^{i\gamma}e^{im\varphi}$，其中$\gamma$为量子力学中不确定的相位

当$m = 0$时，本征函数为$|0\rangle = e^{i\gamma_0}$

当$m = 1$时，本征函数为$|1\rangle = e^{i\gamma_1}e^{i\varphi}$

$$\hat{L}_+|0\rangle = e^{i\varphi}e^{i\gamma_0} = e^{i\gamma_1}e^{i\varphi}e^{i\gamma_0}e^{-i\gamma_1} = e^{i\gamma_0}e^{-i\gamma_1}|1\rangle$$

$$\hat{L}_+|0\rangle = e^{i(\gamma_0-\gamma_1)}|1\rangle$$

显然，上式结果表明，在第一次寻找一组最佳的本征矢时，并没有从一簇本征态中找到一组本征矢使得升算符的关系式最简化。而我们想得到的最简关系式是

$$\hat{L}_+|\tilde{0}\rangle = |\tilde{1}\rangle$$

为此，我们在原本的态矢基础上，找到一组新的态

$$|\tilde{0}\rangle \equiv e^{i\kappa_0}|0\rangle$$
$$|\tilde{1}\rangle \equiv e^{i\kappa_1}|1\rangle$$

根据$\hat{L}_+|\tilde{0}\rangle = |\tilde{1}\rangle$等式的左边

$$\hat{L}_+|\tilde{0}\rangle = \hat{L}_+ e^{i\kappa_0}|0\rangle = e^{i\kappa_0}e^{i(\gamma_0-\gamma_1)}|1\rangle$$

和等式的右边

$$|\tilde{1}\rangle = e^{i\kappa_1}|1\rangle$$

等式两边要相等

$$e^{i\kappa_0}e^{i(\gamma_0-\gamma_1)} = e^{i\kappa_1}$$
$$\kappa_0 + (\gamma_0 - \gamma_1) - \kappa_1 = 0$$

取定$\kappa_0 = 0$，则$\kappa_1 = (\gamma_0 - \gamma_1)$。

这里γ_0，γ_1是量子力学中的相位，κ_0，κ_1是旋转基矢的相位。

§1.1.2 自旋1/2系统的时间反演

几个重要的结论如下：

线性算符

$$\hat{L}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\hat{L}|\psi_1\rangle + \lambda_2\hat{L}|\psi_2\rangle \tag{1.98}$$

反线性算符

$$\hat{\mathcal{A}}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1^*\hat{\mathcal{A}}|\psi_1\rangle + \lambda_2^*\hat{\mathcal{A}}|\psi_2\rangle \tag{1.99}$$

幺正算符

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = 1 \iff \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \tag{1.100}$$

$$\langle\hat{U}a|\hat{U}b\rangle = \langle a|\hat{U}^\dagger\hat{U}|b\rangle = \langle a|b\rangle \tag{1.101}$$

反幺正算符

$$\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}} = \hat{\mathcal{U}}\hat{\mathcal{U}}^\dagger = 1 \iff \hat{\mathcal{U}}^\dagger = \hat{\mathcal{U}}^{-1} \tag{1.102}$$

$$\langle \hat{\mathcal{U}}a|\hat{\mathcal{U}}b\rangle = (\langle a|\hat{\mathcal{U}}^{\dagger})\hat{\mathcal{U}}|b\rangle = (\langle a|\hat{\mathcal{U}}^{\dagger}\hat{\mathcal{U}}|b\rangle)^{*} = \langle a|b\rangle^{*} \tag{1.103}$$

对于自旋1/2系统，所谓的时间反演，即将自旋算符的所有分量反号

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_{\alpha}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{S}_{\alpha}\,(\alpha = x, y, z) \tag{1.104}$$

此外时间反演满足关系

$$\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = 1 \tag{1.105}$$

对于自旋算符满足的对易关系

$$i\hat{S}_z = \left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] \tag{1.106}$$

$$i\hat{S}_x = \left[\hat{S}_y, \hat{S}_z\right] \tag{1.107}$$

$$i\hat{S}_y = \left[\hat{S}_z, \hat{S}_x\right] \tag{1.108}$$

作用时间反演操作得到：

$$\hat{\mathcal{T}}i\hat{S}_z^{-1}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \left[\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_x^{-1}\hat{\mathcal{T}}^{-1}, \hat{\mathcal{T}}\hat{S}_y^{-1}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\right] = \left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = i\hat{S}_z \tag{1.109}$$

等式左边和等式右边

$$\hat{\mathcal{T}}i\hat{S}_z^{-1}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = i\hat{S}_z \tag{1.110}$$

$$\hat{\mathcal{T}}i\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z\hat{\mathcal{T}}^{-1} = i\hat{S}_z \tag{1.111}$$

假设$\hat{\mathcal{T}}$是幺正或者反幺正算符，满足

$$\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = 1 \tag{1.112}$$

此外

$$\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}^{\dagger} = 1 \tag{1.113}$$

$$\hat{\mathcal{T}}^{\dagger} = \hat{\mathcal{T}}^{-1} \tag{1.114}$$

因为

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z^{-1}\hat{\mathcal{T}} = -\hat{S}_z \tag{1.115}$$

要想等式$\hat{\mathcal{T}}i\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z^{-1}\hat{\mathcal{T}} = i\hat{S}_z$成立

只有

$$\hat{\mathcal{T}}i\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -i \tag{1.116}$$

即时间反演算符作用到一个复数上，得到其复共轭。

因此时间反演算符应当为一个反线性算符，并且是反幺正算符。

即

$$\langle \hat{\mathcal{T}}\psi|\hat{\mathcal{T}}\varphi\rangle = \left(\langle\psi|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\right)\hat{\mathcal{T}}|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\hat{\mathcal{T}}|\varphi\rangle^{*} = \langle\psi|\varphi\rangle^{*} \tag{1.117}$$

将时间反演算符作用到$\hat{S}_z|\uparrow\rangle$上

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle \tag{1.118}$$

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = -\hat{S}_z\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle \tag{1.119}$$

$$\hat{S}_z\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = -\frac{1}{2}\mathcal{T}|\uparrow\rangle \tag{1.120}$$

即$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle$也是$\hat{S}_z$的本征矢，且本征值为$-1/2$

$$|\psi\rangle = \hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = c|\downarrow\rangle \tag{1.121}$$

通过归一化：

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}\uparrow\big|\hat{\mathcal{T}}\uparrow\big\rangle = \langle\uparrow\big|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\hat{\mathcal{T}}\uparrow\big\rangle^{*} = \langle\uparrow|\uparrow\rangle^{*} = 1 \tag{1.122}$$

因此，$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = c|\downarrow\rangle$中的$c$是一个相位因子，$c = e^{i\kappa}$

$$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = e^{i\kappa}|\downarrow\rangle \tag{1.123}$$

同理，将时间反演算符作用到$\hat{S}_z|\downarrow\rangle$上，得到

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle \tag{1.124}$$

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z|\downarrow\rangle = \hat{\mathcal{T}}\hat{S}_z^{-1}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -\hat{S}_z\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle \tag{1.125}$$

$$\hat{S}_z\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = \frac{1}{2}\mathcal{T}|\downarrow\rangle \tag{1.126}$$

即$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle$也是$\hat{S}_z$的本征矢，且本征值为1/2

$$|\varphi\rangle = \hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = c|\uparrow\rangle \tag{1.127}$$

通过归一化：

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}\downarrow\big|\hat{\mathcal{T}}\downarrow\big\rangle = \langle\downarrow\big|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\hat{\mathcal{T}}\downarrow\big\rangle^{*} = \langle\downarrow|\downarrow\rangle^{*} = 1 \tag{1.128}$$

因此，$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = c|\downarrow\rangle$中的$c$是一个相位因子，$c = e^{i\kappa'}$

$$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = e^{i\kappa'}|\uparrow\rangle \tag{1.129}$$

归纳一下得到

$$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = e^{i\kappa}|\downarrow\rangle \tag{1.130}$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = e^{i\kappa'}|\uparrow\rangle \tag{1.131}$$

再运用时间反演算符到$\hat{S}_+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_{+}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = \hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle, \tag{1.132}$$
$$-\hat{S}_{-}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = \mathcal{T}|\uparrow\rangle, \tag{1.133}$$
$$\hat{S}_{-}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -\mathcal{T}|\uparrow\rangle \tag{1.134}$$
$$\hat{S}_{-}e^{i\kappa'}|\uparrow\rangle = -e^{i\kappa}|\downarrow\rangle \tag{1.135}$$
$$e^{i\kappa'}|\downarrow\rangle = -e^{i\kappa}|\downarrow\rangle \tag{1.136}$$

得到$e^{i\kappa'} = -e^{i\kappa}$

再运用时间反演算符到$\hat{S}_{-}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{S}_{-}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = \hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle, \tag{1.137}$$
$$-\hat{S}_{+}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = \hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle, \tag{1.138}$$
$$\hat{S}_{+}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = -\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle \tag{1.139}$$
$$\hat{S}_{+}e^{i\kappa}|\downarrow\rangle = -e^{i\kappa'}|\uparrow\rangle \tag{1.140}$$
$$e^{i\kappa}|\uparrow\rangle = -e^{i\kappa'}|\uparrow\rangle \tag{1.141}$$

同样得到$e^{i\kappa} = -e^{i\kappa'}$

$$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = e^{i\kappa}|\downarrow\rangle \tag{1.142}$$
$$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -e^{i\kappa}|\uparrow\rangle \tag{1.143}$$

线性算符$\hat{O} \equiv \hat{\mathcal{T}}^2$

$$\hat{O}|\uparrow\rangle = \hat{\mathcal{T}}e^{i\kappa}|\downarrow\rangle = e^{-i\kappa}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -e^{-i\kappa}e^{i\kappa}|\uparrow\rangle = -|\uparrow\rangle \tag{1.144}$$
$$\hat{O}|\downarrow\rangle = -\hat{\mathcal{T}}e^{i\kappa}|\uparrow\rangle = -e^{-i\kappa}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = -e^{-i\kappa}e^{i\kappa}|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle \tag{1.145}$$

得到

$$\hat{O} = \hat{O}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \hat{O}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = -|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = -1 \tag{1.146}$$

对于任意的一组基矢

$$|\tilde{\uparrow}\rangle \equiv e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle \tag{1.147}$$
$$|\tilde{\downarrow}\rangle \equiv e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle \tag{1.148}$$

时间反演作用上去

$$\hat{\mathcal{T}}|\tilde{\uparrow}\rangle = |\tilde{\downarrow}\rangle$$
$$\hat{\mathcal{T}}|\tilde{\downarrow}\rangle = -|\tilde{\uparrow}\rangle$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\tilde{\uparrow}\rangle = |\tilde{\downarrow}\rangle \Rightarrow \hat{\mathcal{T}}e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle = e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle$$
$$\hat{\mathcal{T}}|\tilde{\downarrow}\rangle = -|\tilde{\uparrow}\rangle \Rightarrow \hat{\mathcal{T}}e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle = -e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle$$

$$e^{-i\theta_\uparrow}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = e^{-i\theta_\uparrow}e^{i\kappa}|\downarrow\rangle = e^{i\theta_\downarrow}|\downarrow\rangle$$
$$e^{-i\theta_\downarrow}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -e^{-i\theta_\downarrow}e^{i\kappa}|\uparrow\rangle = -e^{i\theta_\uparrow}|\uparrow\rangle$$

显然当且仅当$\theta_\uparrow + \theta_\downarrow = \kappa$时，能找到这组基使得，

$$\hat{\mathcal{T}}\,|\uparrow\rangle_{\theta_\uparrow} = |\downarrow\rangle_{\theta_\downarrow} \tag{1.149}$$
$$\hat{\mathcal{T}}\,|\downarrow\rangle_{\theta_\downarrow} = -\,|\uparrow\rangle_{\theta_\uparrow} \tag{1.150}$$

结合前面升降算符的相位因子以及时间反演给出的相位因子，唯一确定了一组相位$\theta_\uparrow$，$\theta_\downarrow$满足关系式：

$$\theta_\uparrow + \theta_\downarrow = \kappa$$
$$\theta_\downarrow - \theta_\uparrow = \gamma$$

第二章　反线性算符

当一个映射，或者一个函数$f(\mathbf{x})$满足

$$f(\lambda_1\mathbf{x}_1+\lambda_2\mathbf{x}_2)=\lambda_1 f(\mathbf{x}_1)+\lambda_2 f(\mathbf{x}_2) \tag{2.1}$$

时，则称$f(\mathbf{x})$为一个线性映射。

而当一个函数，或者映射为

$$f(\lambda_1\mathbf{x}_1+\lambda_2\mathbf{x}_2)=\lambda_1^* f(\mathbf{x}_1)+\lambda_2^* f(\mathbf{x}_2) \tag{2.2}$$

时，则称$f(\mathbf{x})$为一个反线性映射。

举个例子：

厄密共轭$f(\cdots)\equiv(\cdots)^\dagger$是把右矢$|\psi\rangle$变为其对偶矢量$\langle\psi|$

$$(|\psi\rangle)^\dagger=\langle\psi| \tag{2.3}$$

$$(\langle\psi|)^\dagger=|\psi\rangle \tag{2.4}$$

的一个反线性映射，

$$(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle)^\dagger=\lambda_1^*\langle\psi_1|+\lambda_2^*\langle\psi_2| \tag{2.5}$$

$$(\lambda_1^*\langle\psi_1|+\lambda_2^*\langle\psi_2|)^\dagger=\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle \tag{2.6}$$

对偶矢量$\langle a|$是一个把矢量$|\psi\rangle$**映射**到一个标量的线性映射$\langle a|\psi\rangle$：

$$\langle a|(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle)=\lambda_1\langle a|\psi_1\rangle+\lambda_2\langle a|\psi_2\rangle \tag{2.7}$$

矢量$|a\rangle$是一个把矢量$\langle\psi|$**映射**到一个标量的线性映射$\langle\psi|a\rangle$:

$$(\lambda_1\langle\psi_1|+\lambda_2\langle\psi_2|)|a\rangle=\lambda_1\langle\psi_1|a\rangle+\lambda_2\langle\psi_2|a\rangle \tag{2.8}$$

一个线性算符$\hat{L}$是一个将矢量$|\psi\rangle$映射到另一个矢量$\hat{L}|\psi\rangle=\left|\hat{L}\psi\right\rangle$的线性映射。（算符$\hat{L}$作用在右边）

$$\hat{L}(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle)=\lambda_1\left|\hat{L}\psi_1\right\rangle+\lambda_2\left|\hat{L}\psi_2\right\rangle \tag{2.9}$$

这个线性算符的厄密共轭$\hat{L}^\dagger$是将一个对偶矢量$\langle\psi|$映射到另一个对偶矢量$\langle\psi|\hat{L}^\dagger\equiv\langle\hat{L}\psi|$的线性映射。

$$(\lambda_1\langle\psi_1|+\lambda_2\langle\psi_2|)\hat{L}^\dagger=\lambda_1\langle\hat{L}\psi_1|+\lambda_2\langle\hat{L}\psi_2| \tag{2.10}$$

根据上面的定义，很自然的得到

$$\left(\hat{L}|\psi\rangle\right)^\dagger=\left(\left|\hat{L}\psi\right\rangle\right)^\dagger=\langle\hat{L}\psi|=\langle\psi|\hat{L}^\dagger \tag{2.11}$$

$$\left(\langle\psi|\hat{L}^\dagger\right)^\dagger=\left(\langle\hat{L}\psi|\right)^\dagger=\left|\hat{L}\psi\right\rangle=\hat{L}|\psi\rangle \tag{2.12}$$

对于一个反线性算符$\hat{\mathcal{A}}$，其作用是将一个矢量$|\psi\rangle$映射到另一个矢量$\hat{\mathcal{A}}\,|\psi\rangle = \left|\hat{\mathcal{A}}\psi\right\rangle$的反线性映射。（算符作用在右边）

$$\hat{\mathcal{A}}\left(\lambda_1\,|\psi_1\rangle + \lambda_2\,|\psi_2\rangle\right) = \lambda_1^*\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_1\right\rangle + \lambda_2^*\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_2\right\rangle \tag{2.13}$$

这个反线性算符的厄密共轭$\hat{\mathcal{A}}^\dagger$是将一个对偶矢量$\langle\psi|$映射到另一个对偶矢量$\langle\psi|\hat{\mathcal{A}}^\dagger \equiv \langle\hat{\mathcal{A}}\psi|$的反线性映射。

$$\left(\lambda_1\langle\psi_1| + \lambda_2\langle\psi_2|\right)\hat{\mathcal{A}}^\dagger = \lambda_1^*\langle\hat{\mathcal{A}}\psi_1| + \lambda_2^*\langle\hat{\mathcal{A}}\psi_2| \tag{2.14}$$

根据上面的定义，得到

$$\left(\hat{\mathcal{A}}\,|\psi\rangle\right)^\dagger = \left(\left|\hat{\mathcal{A}}\psi\right\rangle\right)^\dagger = \langle\hat{\mathcal{A}}\psi| = \langle\psi|\hat{\mathcal{A}}^\dagger \tag{2.15}$$

$$\left(\langle\psi|\hat{\mathcal{A}}^\dagger\right)^\dagger = \left(\langle\hat{\mathcal{A}}\psi|\right)^\dagger = \left|\hat{\mathcal{A}}\psi\right\rangle = \hat{\mathcal{A}}\,|\psi\rangle \tag{2.16}$$

我们发现，对于线性算符和反线性算符，作用在态矢上是一致的效果，但是如果作用在具有含系数的态矢上，就会不一样。

注意：

1. 两个反线性算符相乘是一个线性算符，

2. 一个线性算符和另外一个反线性算符相乘是一个反线性算符。

3. 两个反线性算符$\hat{\mathcal{A}}_2$和$\hat{\mathcal{A}}_1^{-1}$由一个线性算符相联系$\hat{L} \equiv \hat{\mathcal{A}}_2\hat{\mathcal{A}}_1^{-1}; \hat{\mathcal{A}}_2 = \hat{L}\hat{\mathcal{A}}_1$。

4. 对于任意一个线性或者反线性算符$\hat{X}$，有$\left(\hat{X}_1\hat{X}_2\right)^{-1} = \left(\hat{X}_2^{-1}\hat{X}_1^{-1}\right)$，以及$\langle\psi|\hat{X}_1^\dagger\hat{X}_2^\dagger = \langle\hat{X}_1\psi|\hat{X}_2^\dagger = \langle\hat{X}_2\hat{X}_1\psi| = \langle\psi|\left(\hat{X}_2\hat{X}_1\right)^\dagger$。也就是

$$\hat{X}_1^\dagger\hat{X}_2^\dagger = \left(\hat{X}_2\hat{X}_1\right)^\dagger$$

特别强调的是，前面所讨论的算符$\hat{L}$默认只能向右作用，而$\hat{L}^\dagger$默认只能向左作用。因此，我们将拓展线性算符$\hat{L}$如何作用在对偶矢量上，即$\hat{L}$向左作用。借助态矢的内积定义，对于任意的对偶矢量$\langle a|$，矢量$\langle a|\hat{L}$是一个对偶矢量，其定义为

$$\left(\langle a|\hat{L}\right)|b\rangle \equiv \langle a\left|\hat{L}b\right\rangle$$

$|b\rangle$是任意的一个矢量。

因此，无论$\hat{L}$作用在右矢还是左矢，都可以写为$\langle a|\hat{L}\,|b\rangle$.

对上面方程求复共轭，即可得到$\hat{L}^\dagger$向右作用的结果

$$\langle b|\left(\hat{L}^\dagger\,|a\rangle\right) \equiv \langle\hat{L}b\,|a\rangle$$

即，$\hat{L}^\dagger$也可以既作用在右矢$|a\rangle$也可以作用在对偶矢量$\langle b|$上，都可以写为$\langle b|\hat{L}^\dagger\,|a\rangle = \langle a|\hat{L}\,|b\rangle^*$.

同样地，对于反线性算符$\hat{\mathcal{A}}$，也可以拓展算符$\hat{\mathcal{A}}$作用在对偶矢量（左矢）或者$\hat{\mathcal{A}}^\dagger$作用在矢量（右矢）上。

但是，如果通过$\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)|b\rangle \equiv \langle a\left|\hat{\mathcal{A}}b\right\rangle$来定义$\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)$，会导致反线性算符作用在对偶矢量之后产生的新的对偶矢量不再是一个线性映射，即$f(\cdots) \equiv \left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)(\cdots)$不是一个线性映射，因为按

照这个定义得到$\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)$并不是$\left(\hat{\mathcal{A}}\,|a\rangle\right)$的对偶矢量，这样定义的对偶矢量是一个反线性映射，而不是一个线性映射。

$$f\left(|\psi_1\rangle\right)=\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)\left(|\psi_1\rangle\right)=\langle a|\left(\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_1\right\rangle\right)=\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_1\right.\right\rangle \tag{2.17}$$
$$f\left(|\psi_2\rangle\right)=\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)\left(|\psi_2\rangle\right)=\langle a|\left(\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_2\right\rangle\right)=\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_2\right.\right\rangle \tag{2.18}$$

但是

$$\begin{aligned}f\left(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle\right)&=\langle a|\left(\hat{\mathcal{A}}\lambda_1|\psi_1\rangle+\hat{\mathcal{A}}\lambda_2|\psi_2\rangle\right)\\&=\langle a|\left(\lambda_1^*\hat{\mathcal{A}}|\psi_1\rangle+\lambda_2^*\hat{\mathcal{A}}|\psi_2\rangle\right)\\&=\lambda_1^*\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_1\right.\right\rangle+\lambda_2^*\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_2\right.\right\rangle\\&=\lambda_1^*f\left(|\psi_1\rangle\right)+\lambda_2^*f\left(|\psi_2\rangle\right)\end{aligned} \tag{2.19}$$

为了使得它是一个线性映射，对于$\langle a|\hat{\mathcal{A}}$的正确定义应该是

$$\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)|b\rangle\equiv\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}b\right.\right\rangle^* \tag{2.20}$$

所以

$$f\left(|\psi_1\rangle\right)=\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)\left(|\psi_1\rangle\right)=\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_1\right.\right\rangle^* \tag{2.21}$$
$$f\left(|\psi_2\rangle\right)=\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)\left(|\psi_2\rangle\right)=\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_2\right.\right\rangle^* \tag{2.22}$$
$$f\left(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle\right)=\left(\langle a|\hat{\mathcal{A}}\right)\left(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle\right) \tag{2.23}$$
$$=\langle a|\hat{\mathcal{A}}\left(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle\right)^* \tag{2.24}$$
$$=\lambda_1\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_1\right.\right\rangle^*+\lambda_2\left\langle a\left|\hat{\mathcal{A}}\psi_2\right.\right\rangle^* \tag{2.25}$$
$$=\lambda_1f\left(|\psi_1\rangle\right)+\lambda_2f\left(|\psi_2\rangle\right) \tag{2.26}$$

上面方程的复共轭可以推广到$\hat{\mathcal{A}}^\dagger$作用到右矢空间

$$\langle a|\left(\hat{\mathcal{A}}^\dagger|b\rangle\right)\equiv\langle\hat{\mathcal{A}}a\,|b\rangle^* \tag{2.27}$$

$\hat{\mathcal{A}}^\dagger|a\rangle$仍然是一个矢量，也是一个线性映射，将矢量$\lambda_1\langle\psi_1|+\lambda_2\langle\psi_2|$映射为标量$\lambda_1\langle\hat{\mathcal{A}}\psi_1\,|a\rangle^*+\lambda_2\langle\hat{\mathcal{A}}\psi_2\,|a\rangle^*$。对于反线性算符，需要特别小心算符是作用在右边还是左边的矢量上，在无具体说明的情况下，我们假设算符都是朝右作用的。

总结一下：

线性算符作用在态矢上为：

$$\hat{L}\left(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle\right)=\lambda_1\hat{L}|\psi_1\rangle+\lambda_2\hat{L}|\psi_2\rangle \tag{2.28}$$

反线性算符作用在态矢上为：

$$\hat{\mathcal{A}}(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle)=\lambda_1^*\hat{\mathcal{A}}|\psi_1\rangle+\lambda_2^*\hat{\mathcal{A}}|\psi_2\rangle \tag{2.29}$$

一个幺正算符是一个线性算符满足

$$\hat{U}^\dagger\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^\dagger=1 \iff \hat{U}^\dagger=\hat{U}^{-1} \tag{2.30}$$

$$\langle\hat{U}a|\hat{U}b\rangle=\langle a|\hat{U}^\dagger\hat{U}|b\rangle=\langle a|b\rangle \tag{2.31}$$

一个反幺正算符是一个反线性算符

$$\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}=\hat{\mathcal{U}}\hat{\mathcal{U}}^\dagger=1 \iff \hat{\mathcal{U}}^\dagger=\hat{\mathcal{U}}^{-1} \tag{2.32}$$

反幺正算符保持标量积的模不变

$$\langle\hat{\mathcal{U}}a|\hat{\mathcal{U}}b\rangle=(\langle a|\hat{\mathcal{U}}^\dagger)\hat{\mathcal{U}}|b\rangle=\langle a|\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}|b\rangle^*=\langle a|b\rangle^* \tag{2.33}$$

反幺正算符$\hat{\mathcal{U}}$将一个线性算符$\hat{O}$映射到另一个线性算符$\hat{\mathcal{U}}\hat{O}\hat{\mathcal{U}}^\dagger$，变换之后的矩阵元和之前的相比刚好是复共轭的

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{U}}\langle a|\hat{O}|b\rangle&=\langle\hat{\mathcal{U}}a|\hat{\mathcal{U}}\hat{O}b\rangle=\langle a|\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}\hat{O}b\rangle^*=\langle a|\hat{O}|b\rangle^*\\&=\langle\hat{\mathcal{U}}a|\hat{\mathcal{U}}\hat{O}\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}b\rangle=\langle\hat{\mathcal{U}}a|\hat{\mathcal{U}}\hat{O}\hat{\mathcal{U}}^\dagger|\hat{\mathcal{U}}b\rangle\end{aligned}$$

$$\langle\hat{\mathcal{U}}a|\hat{\mathcal{U}}\hat{O}\hat{\mathcal{U}}^\dagger|\hat{\mathcal{U}}b\rangle=\langle\hat{\mathcal{U}}a|\hat{\mathcal{U}}\hat{O}b\rangle=\langle a|\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}\hat{O}b\rangle^*=\langle a|\hat{O}|b\rangle^* \tag{2.34}$$

量子力学中的一个任意对称性操作$\hat{X}$一定会保持标量积模不变

$$|\langle\hat{X}\psi|\hat{X}\varphi\rangle|=|\langle\psi|\varphi|\rangle| \tag{2.35}$$

在对称性的要求下，Wigner证明$\hat{X}$要么是一个幺正的算符$\langle\hat{X}\psi|\hat{X}\varphi\rangle=\langle\psi|\varphi\rangle$，要么是反幺正算符$\langle\hat{X}\psi|\hat{X}\varphi\rangle=\langle\psi|\varphi\rangle^*$，而$\hat{X}$取决于相位因子。

第三章　无自旋系统

一个可以用力学量算符$\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{S}}$来描述的系统，其哈密顿量为这三个力学量算符的函数$\hat{H} = H(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{S}})$。对于任意的复合算符都可以用$\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{S}}$构造。例如角动量算符：$\hat{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$; 速度算符$\hat{\mathbf{v}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = -i\left[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{H}}\right]$

本小节和前面自旋1/2系统一样，从力学量算符之间的对易关系出发，结合空间平移算符和时间反演算符对力学量算符以及其本征态的作用，进而唯一确定一组最为方便的坐标和动量本征态：

简单起见，以一维举例子，比如记沿着x方向的位置算符记作$\hat{r}$，动量算符为$\hat{p}$

位置算符$\hat{r}$以及动量算符$\hat{p}$都是厄密的，他们满足的基本对易关系为：

$$[\hat{r}, \hat{p}] = i \leftrightarrow [\hat{p}, \hat{r}] = -i \tag{3.1}$$

通过上面的对易关系，可以很容易的验证下面的式子：

$$\begin{aligned}
\left[\hat{p}, \hat{r}^2\right] &= -2i\hat{r} = -i\frac{\partial}{\partial \hat{r}}\hat{r}^2 \\
\left[\hat{p}, \hat{r}^3\right] &= -3i\hat{r}^2 = -i\frac{\partial}{\partial \hat{r}}\hat{r}^3 \\
&\cdots \\
[\hat{p}, \hat{r}^n] &= -in\hat{r}^{n-1} = -i\frac{\partial}{\partial \hat{r}}\hat{r}^n
\end{aligned}$$

对于任意的由位置算符所组成的算符函数$f(\hat{r})$其泰勒展开式$f(\hat{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{r}^n$，其中展开系数$f_n = \frac{f^{(n)}(\hat{r})}{n!}|_{\hat{r}=\hat{0}}$，因此我们有：

$$\begin{aligned}
[\hat{p}, f(\hat{r})] &= \left[\hat{p}, \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{r}^n\right] = -i\frac{\partial}{\partial \hat{r}}\sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{r}^n \\
[\hat{p}, f(\hat{r})] &= -i\frac{\partial}{\partial \hat{r}} f(\hat{r})
\end{aligned}$$

同样地，根据基本对易关系，我们也可以给出下面的关系

$$\begin{aligned}
\left[\hat{r}, \hat{p}^2\right] &= 2i\hat{p} = i\frac{\partial}{\partial \hat{p}}\hat{p}^2 \\
\left[\hat{r}, \hat{p}^3\right] &= 3i\hat{p}^2 = i\frac{\partial}{\partial \hat{p}}\hat{p}^3 \\
&\cdots \\
[\hat{r}, \hat{p}^n] &= ni\hat{p}^{n-1} = i\frac{\partial}{\partial \hat{p}}\hat{p}^n
\end{aligned}$$

对于一个任意的算符函数$f(\hat{p})$

$$[\hat{r}, f(\hat{p})] = i\frac{\partial}{\partial \hat{p}} f(\hat{p})$$

于是，根据上面的对易关系，令$f(\hat{p}) = e^{-i\hat{p}x}$，并将其定义为位置平移算符：

$$\left[\hat{r}, e^{-i\hat{p}x}\right] = xe^{-i\hat{p}x} \Leftrightarrow \hat{r}e^{-i\hat{p}x} = e^{-i\hat{p}x}(\hat{r} + x) \tag{3.2}$$

此外，也可以定义动量平移算符$f(\hat{r}) = e^{ik\hat{r}}$满足

$$\left[\hat{p}, e^{ik\hat{r}}\right] = ke^{ik\hat{r}} \Leftrightarrow \hat{p}e^{ik\hat{r}} = e^{ik\hat{r}}(\hat{p} + k) \tag{3.3}$$

对于等式$\left[\hat{r}, e^{-i\hat{p}x}\right] = xe^{-i\hat{p}x}$两边的指数项，当$x \to 0$时，两边都保留到$x$的一阶项，则有$[\hat{r}, 1 - i\hat{p}x] = x$，即这个式子可以恢复到最基本的对易关系：

$$[\hat{r}, 1 - i\hat{p}x] = x \Leftrightarrow [\hat{r}, \hat{p}] = i$$

类似的，对于等式$\left[\hat{p}, e^{ik\hat{r}}\right] = ke^{ik\hat{r}}$，当$k \to 0$时，两边都保留到$k$的一阶项，则有$[\hat{p}, 1 + ik\hat{r}] = k$

$$[\hat{p}, 1 + ik\hat{r}] = k \leftrightarrow [\hat{r}, \hat{p}] = i$$

因此公式(3.1)和公式(3.2)以及公式(3.3)等价。

§3.1 位置本征态以及其时间反演

§3.1.1 位置本征态

我们用$|x\rangle$表示位置算符$\hat{r}$本征值为x的本征态

$$\hat{r}|x\rangle = x|x\rangle$$

因为量子力学中的相位不确定性，当本征值为0的本征态$|0\rangle$并不是唯一定义的，$|0\rangle$乘上任意的一个相因子$e^{i\varphi_0}$得到的另一个本征态$|\tilde{0}\rangle = e^{i\varphi_0}|0\rangle$仍然满足$\hat{r}|\tilde{0}\rangle = 0|\tilde{0}\rangle$。类似的，对于本征值为$x$的本征态$|x\rangle$同样也不是唯一定义的，同样也有一个任意的相位使得$|\tilde{x}\rangle = e^{i\varphi_x}|x\rangle$满足本征方程$\hat{r}|\tilde{x}\rangle = x|\tilde{x}\rangle$。

假设我们已知一个本征值$x = 0$的归一化的本征态，为了明确起见我们将这个态用$|\bigcirc\rangle$表示，内积满足归一化关系$\langle\bigcirc|\bigcirc\rangle = 1$。

将对易关系式(3.2)作用在态矢$|\bigcirc\rangle$上得到

$$\hat{r}e^{-i\hat{p}x}|\bigcirc\rangle = e^{-i\hat{p}x}(\hat{r} + x)|\bigcirc\rangle = xe^{-i\hat{p}x}|\bigcirc\rangle$$

即$\hat{r}\left(e^{-i\hat{p}x}|\bigcirc\rangle\right) = x\left(e^{-i\hat{p}x}|\bigcirc\rangle\right)$ 这表明态矢$|\psi\rangle \equiv e^{-i\hat{p}x}|\bigcirc\rangle$同样也是位置算符$\hat{r}$本征值为$x$的本征态，并且，这个态同样也是归一化的

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\bigcirc|e^{i\hat{p}x}e^{-i\hat{p}x}|\bigcirc\rangle = \langle\bigcirc|\bigcirc\rangle = 1$$

于是我们可以定义出一个任意的位置本征值为x所对应的本征态为

$$|x_{\bigcirc}\rangle \equiv e^{-i\hat{p}x}|\bigcirc\rangle$$

因此，只要给定了本征值$x=0$的一个特定的本征态$|\bigcirc\rangle$，再结合上述讨论的方程，即可以独一无二的确定本征值为x的本征态$|x_{\bigcirc}\rangle$。接下来，我们可以进一步选择$|\bigcirc\rangle$的相位来简化在时间反演操作下的变换。

§3.1.2 时间反演操作

时间反演算符的定义需要满足两个条件

（1）时间反演对位置和动量算符的作用为：

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}=\hat{\mathbf{r}}, \tag{3.4}$$

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}=-\hat{\mathbf{p}}. \tag{3.5}$$

即，时间反演算符作用在位置算符上不会改变粒子的位置，但是会使得粒子的动量反号，这与经典直觉是一致的。将时间反演算符作用在位置算符与动量算符的对易关系式的两端。（这里仍然考虑在一维情况下的对易关系$i=[\hat{r},\hat{p}]$）：

$$\hat{\mathcal{T}}i\hat{\mathcal{T}}^{-1}=\left[\hat{\mathcal{T}}\hat{r}\hat{\mathcal{T}}^{-1},\hat{\mathcal{T}}\hat{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\right]=-\left[\hat{r},\hat{p}\right]=-i$$

即时间反演算符作用在一个复数上的效果是将该复数变为其复共轭，因此时间反演算符必定是一个反线性算符。

（2）时间反演算符要么是一个幺正算符，要么是一个反幺正算符。

同时利用条件（1）和（2）立即得到时间反演算符是一个反幺正算符。即：

$$\hat{\mathcal{T}}(\langle\varphi|\psi\rangle)\equiv\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle=\langle\varphi|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle^{*}=\langle\varphi|\psi\rangle^{*}$$

§3.1.3 位置本征态的相位约定

考虑一个特殊的本征态$|\bigcirc\rangle$，其本征方程为$0=\hat{r}|\bigcirc\rangle$，将时间反演算符同时作用在两边

$$\hat{\mathcal{T}}0=\hat{\mathcal{T}}\hat{r}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\bigcirc\rangle=\hat{r}\left(\hat{\mathcal{T}}|\bigcirc\rangle\right)$$

即$\hat{r}\left(\hat{\mathcal{T}}|\bigcirc\rangle\right)=0$，这表明$|\phi\rangle\equiv\hat{\mathcal{T}}|\bigcirc\rangle$也是位置本征值为0的本征态，其满足归一化条件

$$\langle\phi|\phi\rangle=\langle\hat{\mathcal{T}}\bigcirc|\hat{\mathcal{T}}\bigcirc\rangle=\langle\bigcirc|\bigcirc\rangle^{*}=1$$

因此，$\hat{\mathcal{T}}|\bigcirc\rangle$与$|\bigcirc\rangle$之间仅仅只相差一个相位因子$e^{i\gamma_{\bigcirc}}$

$$\hat{\mathcal{T}}|\bigcirc\rangle=e^{i\gamma_{\bigcirc}}|\bigcirc\rangle$$

这个相位$\gamma_{\bigcirc}$完全由这个特殊的本征态$|\bigcirc\rangle$确定（也就是说，如果明确知道本征态$|\bigcirc\rangle$的表示，那么我们可以直接计算出$\hat{\mathcal{T}}|\bigcirc\rangle$，从而得到$e^{i\gamma_{\bigcirc}}$）。由此，可以定义另一组本征值$x=0$的本征态

$$|0_r\rangle\equiv e^{i\gamma_{\bigcirc}/2}|\bigcirc\rangle$$

或者

$$|0_r\rangle \equiv -e^{i\gamma_\bigcirc/2}|\bigcirc\rangle$$

这样定义的本征态在时间反演下是不变的

$$\hat{\mathcal{T}}|0_r\rangle = |0_r\rangle$$

从态矢$|0_r\rangle$出发，我们可以定义任意一个本征值为x的位置本征态

$$|x\rangle \equiv e^{-i\hat{p}x}|0_r\rangle$$

因为位置平移算符$e^{-i\hat{p}x}$是在时间反演下是不变的

$$\hat{\mathcal{T}}e^{-i\hat{p}x}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = e^{-\hat{\mathcal{T}}i\hat{p}x\hat{\mathcal{T}}^{-1}} = e^{-i\hat{p}x}$$

因此，由$|x\rangle \equiv e^{-i\hat{p}x}|0_r\rangle$描述的位置本征态在时间反演下也是不变的

$$\hat{\mathcal{T}}|x\rangle \equiv \hat{\mathcal{T}}e^{-i\hat{p}x}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|0_r\rangle = e^{-i\hat{p}x}|0_r\rangle = |x\rangle$$

上述讨论定义了由符号因子决定的唯一的一组完备的位置本征态。

因为$\hat{r}$是一个厄密算符，其本征态构成一组正交归一的完备基

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx|x\rangle\langle x| = \hat{1}$$

$$\langle x|x'\rangle = \delta\left(x - x'\right)$$

这里假设系统是一个长度为$L \to \infty$的一维盒子。

§3.2 动量本征态和时间反演

为了定义一组独一无二的正交归一完备的动量本征态，并且其满足本征方程

$$\hat{p}|k\rangle = k|k\rangle$$

严格遵从推导位置本征态的步骤。

考虑一个动量$k = 0$的动量态$|\otimes\rangle$满足归一化条件$\langle\otimes|\otimes\rangle = 1$。将方程(3.3)作用在本征态$|\otimes\rangle$上，得到

$$\hat{p}e^{ik\hat{r}}|\otimes\rangle = e^{ik\hat{r}}\left(\hat{p} + k\right)|\otimes\rangle = ke^{ik\hat{r}}|\otimes\rangle$$

可见$|\psi\rangle = e^{ik\hat{r}}|\otimes\rangle$同样也是本征值为$k$的本征态，此外这个态是归一化的

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\otimes|e^{-ik\hat{r}}e^{ik\hat{r}}|\otimes\rangle = 1$$

于是，我们可以定义一个动量本征值为任意值k时所对应的一个本征态为

$$|k_\otimes\rangle \equiv e^{ik\hat{r}}|\otimes\rangle$$

因此，只要给定了本征值$k=0$的一个特定本征态$|\otimes\rangle$，再结合上述的讨论，即可以独一无二的确定本征值为k的态$|k_\otimes\rangle$。接下来，我们可以进一步选择$|\otimes\rangle$的相位来简化在时间反演操作下的变换。

将时间反演算符作用在$0=\hat{p}|\otimes\rangle$

$$0=\hat{\mathcal{T}}\hat{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\otimes\rangle=-\hat{p}\hat{\mathcal{T}}|\otimes\rangle$$

这表明了$|\phi\rangle=\hat{\mathcal{T}}|\otimes\rangle$同样也是动量本征值$k=0$的本征态。此外$|\phi\rangle$是归一化的，因此$|\phi\rangle$与$|\otimes\rangle$只相差一个相位因子

$$\hat{\mathcal{T}}|\otimes\rangle=e^{i\gamma_\otimes}|\otimes\rangle$$

这个相位$\gamma_\otimes$完全由这个特殊的本征态$|\otimes\rangle$确定（也就是说，如果明确知道本征态$|\otimes\rangle$的表示，那么我们可以直接计算出$\hat{\mathcal{T}}|\otimes\rangle$从而得到$e^{i\gamma_\otimes}$）。由此，可以定义另一组在时间反演下不变的动量本征值$k=0$的本征态

$$|0_k\rangle\equiv e^{i\gamma_\otimes/2}|\otimes\rangle$$

或者

$$|0_k\rangle\equiv -e^{i\gamma_\otimes/2}|\otimes\rangle$$

这个态在时间反演下是不变的

$$\hat{\mathcal{T}}|0_k\rangle=\hat{\mathcal{T}}e^{i\gamma_\otimes/2}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\otimes\rangle=e^{i\gamma_\otimes/2}|\otimes\rangle=|0_k\rangle$$

从动量本征值为0的本征态$|0_k\rangle$出发，任意的一个本征值为k对应的本征态：

$$|k\rangle\equiv e^{i\hat{r}k}|0_k\rangle$$

时间反演操作下，动量平移算符变为

$$\hat{\mathcal{T}}e^{i\hat{r}k}\hat{\mathcal{T}}^{-1}=e^{\hat{\mathcal{T}}i\hat{r}k\hat{\mathcal{T}}^{-1}}=e^{-i\hat{r}k}$$

所以时间反演算符作用在动量本征态$|k\rangle$上得到

$$\hat{\mathcal{T}}|k\rangle=\hat{\mathcal{T}}e^{i\hat{r}k}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|0\rangle=e^{-i\hat{r}k}|0_k\rangle=|-k\rangle$$

这唯一定义了一组由符号因子决定的完备的动量本征态。

§3.3 动量和坐标本征态的内积

利用$|x\rangle\equiv e^{-i\hat{p}x}|0_x\rangle$以及$|k\rangle\equiv e^{ik\hat{r}}|0_k\rangle$得到

$$\begin{aligned}\langle x|k\rangle&=\langle 0_x|e^{i\hat{p}x}e^{ik\hat{r}}|0_k\rangle=\langle 0_x|e^{i\hat{p}x}e^{ik\hat{r}}e^{-i\hat{p}x}e^{i\hat{p}x}|0_k\rangle\\&=\langle 0_x|e^{i\hat{p}x}e^{ik\hat{r}}e^{-i\hat{p}x}\left(1+i\hat{p}x+\cdots\right)|0_k\rangle\\&=\langle 0_x|e^{i\hat{p}x}e^{ik\hat{r}}e^{-i\hat{p}x}|0_k\rangle\end{aligned}$$

接下来计算算符$e^{i\hat{p}x}e^{ik\hat{r}}e^{-i\hat{p}x}$。这里需要借助Baker-Hausdorff公式

$$
\begin{aligned}
e^{A}Be^{-A} = B + [A, B] + \frac{[A, [A, B]]}{2!} \\
+ \frac{[A, [A, [A, B]]]}{3!} + \cdots
\end{aligned}
$$

其中A和B都是算符，于是得到

$$
\begin{aligned}
e^{i\hat{p}x}e^{ik\hat{r}}e^{-i\hat{p}x} &= e^{ik\hat{r}} + (ikx)\, e^{ik\hat{r}} + \frac{(ikx)^2}{2!}e^{ik\hat{r}} \\
&+ \frac{(ikx)^3}{3!}e^{ik\hat{r}} + \cdots \\
&= e^{ik\hat{r}}e^{ikx} = e^{ik(\hat{r}+x)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[A, B] &= \left[\hat{p}, e^{ik\hat{r}}\right] = ke^{ik\hat{r}} \\
[A, [A, B]] &= -x^2k\left[\hat{p}, e^{ik\hat{r}}\right] = (ikx)^2\, e^{ik\hat{r}} \\
[A, [A, [A, B]]] &= -ix^3k^2\left[\hat{p}, e^{ik\hat{r}}\right] = (ikx)^3\, e^{ik\hat{r}} \\
&\cdots
\end{aligned}
$$

即内积为

$$
\langle x|k\rangle = \langle 0_x|e^{ik(\hat{r}+x)}|0_k\rangle = e^{ikx}\langle 0_x|0_k\rangle
$$

因为$|0_k\rangle$和$|0_x\rangle$在时间反演下都是不变的，即

$$
\langle 0_x|0_k\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}0_x|\hat{\mathcal{T}}0_k\rangle^* = \langle 0_x|0_k\rangle^*
$$

显然$\langle 0_x|0_k\rangle$必定是一个实数，因为$|0_k\rangle$是归一化的，对$\langle 0_k|0_k\rangle$插入完全性关系$\int_{-L/2}^{L/2}|0_x\rangle\langle 0_x| = 1$

$$
\begin{aligned}
1 = \langle 0_k|0_k\rangle &= \int_{-L/2}^{L/2}dx\langle 0_k|0_x\rangle\langle 0_x|0_k\rangle = \int_{-L/2}^{L/2}dx|\langle 0_k|0_x\rangle|^2 \\
&= L|\langle 0_k|0_x\rangle|^2
\end{aligned}
$$

因此，得到$\langle 0_k|0_x\rangle = s/\sqrt{L}$，其中$s$要么为1，要么为$-1$。$s$的具体取值是由$|0_k\rangle$和$|0_x\rangle$本身属性所决定。又因为$|0_k\rangle$以及$|0_x\rangle$的定义中会出现一个符号，即具体的基矢的定义将由符号因子所决定。因此可以合理的选择$|0_k\rangle$的符号，使得$\langle 0_k|0_x\rangle = 1/\sqrt{L}$。

即，动量本征态和位置本征态做内积得到

$$
\langle x|k\rangle = e^{ikx}\langle 0_x|0_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}
$$

此外，我们所考虑的系统是无穷大的一维箱体，其长度$L \to \infty$。周期边界条件要求$\langle x = \frac{L}{2}|k\rangle = \langle x = \frac{-L}{2}|k\rangle$，这意味着

$$
\begin{aligned}
\langle x = \frac{L}{2}|k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikL/2} \\
\langle x = \frac{-L}{2}|k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{L}}e^{-ikL/2}
\end{aligned}
$$

$$e^{ikL}=1\Longrightarrow k=\frac{2\pi n}{L}\,(n=0,\pm1,\pm2)$$

也就是说，动量是离散的取值，又因为$\hat{p}$是一个厄密算符，它的本征态形成一个正交归一的完备基

$$\sum_k|k\rangle\langle k|=\hat{1}$$

$$\langle k|k'\rangle=\delta_{k,k'}$$

由于体系的边界为无穷大，因此动量间隔可以视作连续变化，此时对动量求和的式子就可以用积分式替换：

$$\sum_k(\cdots)=\frac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk$$

§3.4 坐标和动量表象

位置算符$\hat{r}$的本征态$\{|x\rangle\}$所构成的一组正交归一完备集

$$\int_{-L/2}^{L/2}dx|x\rangle\langle x|=\hat{1}\qquad(\text{完全性关系})$$

$$\langle x|x'\rangle=\delta\left(x-x'\right)\quad(\text{正交归一关系})$$

动量算符符$\hat{p}$的本征态$\{|k\rangle\}$所构成的一组正交归一完备集

$$\sum_k|k\rangle\langle k|=\hat{1}\qquad(\text{完全性关系})$$

$$\langle k|k'\rangle=\delta_{k,k'}\qquad(\text{正交归一关系})$$

两个态矢作内积

$$\langle x|k\rangle=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx},\langle k|x\rangle=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{-ikx}$$

求和转换为积分的公式为

$$\sum_k g\left(k\right)=\frac{L}{2\pi}\int dkg\left(k\right)$$

对于这个公式的应用，我们可以利用动量空间的完全性关系$\sum_k|k\rangle\langle k|=\hat{1}$ 推导出位置本征态的正交归一化关系。

$$\begin{aligned}\langle x|x'\rangle&=\sum_k\langle x|k\rangle\langle k|x'\rangle=\sum_k\frac{1}{L}e^{ik(x-x')}\\&=\frac{L}{2\pi}\int\frac{dk}{L}e^{ik(x-x')}\\&=\frac{1}{2\pi}2\pi\delta\left(x-x'\right)\\&=\delta\left(x-x'\right)\end{aligned}$$

作为这个公式的第二个应用，对于任意的函数$g(k)$，有

$$g(k)=\sum_{k'}\delta_{kk'}g(k')=\frac{L}{2\pi}\int\delta_{kk'}g(k')\,dk'$$

相比

$$g(k)=\int\delta(k-k')\,g(k')\,dk'$$

因此可以得到

$$\delta(k-k')=\frac{L}{2\pi}\delta_{kk'}$$

当$k\neq k'$时，$\delta(k-k')=\delta_{k,k'}=0$。

当$k=k'$时，$\delta(k-k'=0)=\frac{L}{2\pi}\to\infty$。因为$L\to\infty$。利用位置本征态的完全性关系$\int_{-L/2}^{L/2}dx|x\rangle\langle x|=\hat{1}$以及刚刚得到$\delta(k-k')$与$\frac{L}{2\pi}\delta_{kk'}$之间的关系，可以推出动量本征态满足的正交归一化关系

$$\begin{aligned}\langle k|k'\rangle&=\int_{-L/2}^{L/2}dx\langle k|x\rangle\langle x|k'\rangle=\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2}dxe^{-i(k-k')x}\\&=\frac{1}{L}2\pi\delta(k-k')=\frac{2\pi}{L}\frac{L}{2\pi}\delta_{kk'}\\&=\delta_{kk'}\end{aligned}$$

也可以得到动量本征态满足的完备性关系：

$$\begin{aligned}\sum_k|k\rangle\langle k|&=\sum_k\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdx'|x\rangle\langle x|k\rangle\langle k|x'\rangle\langle x'|\\&=\sum_k\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdx'|x\rangle e^{ik(x-x')}\langle x'|\\&=\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdx'|x\rangle\langle x'|\sum_k\frac{1}{L}e^{ik(x-x')}\\&=\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdx'|x\rangle\langle x'|\int\frac{dk}{2\pi}e^{ik(x-x')}\\&=\int_{-L/2}^{L/2}\int_{-L/2}^{L/2}dxdx'|x\rangle\langle x'|\delta(x-x')\\&=\int_{-L/2}^{L/2}dx|x\rangle\langle x|=\hat{1}\end{aligned}$$

反过来也可以用$\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{1}$推导出$\int_{-L/2}^{L/2} dx|x\rangle\langle x| = \hat{1}$

$$\begin{aligned}
\int_{-L/2}^{L/2} dx|x\rangle\langle x| &= \sum_k \sum_{k'} \int_{-L/2}^{L/2} dx|k\rangle\langle k|x\rangle\langle x|k'\rangle\langle k'| \\
&= \sum_k \sum_{k'} |k\rangle\langle k'| \int_{-L/2}^{L/2} \frac{1}{L} e^{-ix(k-k')} dx \\
&= \sum_k \sum_{k'} |k\rangle\langle k'| \frac{2\pi}{L} \delta\left(k-k'\right) \\
&= \sum_k \sum_{k'} |k\rangle\langle k'| \frac{2\pi}{L} \frac{L}{2\pi} \delta_{k,k'} \\
&= \sum_k \sum_{k'} |k\rangle\langle k'| \delta_{k,k'} \\
&= \sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{1}
\end{aligned}$$

值得注意的是两个积分

$$\frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-ix(k-k')} = \frac{2\pi}{L} \delta\left(k-k'\right)$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x')} = \delta\left(x-x'\right)$$

使用位置本征态的完全性关系，任意的量子态$|\psi\rangle$都可以表示为

$$|\psi\rangle = \int dx|x\rangle\langle x|\psi\rangle \equiv \int dx|x\rangle\psi\left(x\right)$$

这里$\psi\left(x\right) \equiv \langle x|\psi\rangle$是坐标空间的波函数，或者说是态$|\psi\rangle$的坐标表示

同样的利用动量本征态的完全性关系

$$|\psi\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\psi\rangle \equiv \sum_k |k\rangle\psi\left(k\right) = \frac{L}{2\pi} \int dk|k\rangle\psi\left(k\right)$$

这里$\psi\left(k\right) \equiv \langle k|\psi\rangle$是动量空间的波函数。或者说是态$|\psi\rangle$的动量表示。一个态在不同表示下的函数形式是完全不一样的，比如一个动量态$|k_0\rangle$他在坐标表示和动量表示下的函数形式分别为：

$$\langle x|k_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_0 x}$$
$$\langle k|k_0\rangle = \delta_{k,k_0}$$

接下来，推导出各种算符的坐标表示形式。

最简单的就是位置算符$\hat{r}$。因为$\hat{r}|\psi\rangle$是一个量子态，所以他的坐标表示为：

$$\langle x|\hat{r}|\psi\rangle = x\langle x|\psi\rangle = x\psi\left(x\right)$$

也就是说，将$\hat{r}$作用在态$|\psi\rangle$上的作用是将其坐标表示$\psi(x)$变成了$x\psi(x)$

$$|\psi\rangle \overset{\text{坐标表示}}{\to} \langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$
$$\hat{r}|\psi\rangle \overset{\text{坐标表示}}{\to} = \langle x|\hat{r}|\psi\rangle = x\psi(x)$$

上面的态显然并没有起到什么作用，当然只要$|\psi\rangle$不是位置本征态，可以将$|\psi\rangle$用$\cdots$替换，即

$$\langle x|\hat{r}\cdots = x\langle x|\cdots$$

动量算符的坐标表示，因为$\hat{p}|\psi\rangle$是一个量子态，其坐标表示为

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \sum_k \langle x|\hat{p}|k\rangle\langle k|\psi\rangle = \sum_k k\langle x|k\rangle\langle k|\psi\rangle \\
&= \sum_k ke^{ikx}\langle k|\psi\rangle = \sum_k \left(-i\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx}\right)\langle k|\psi\rangle \\
&= \sum_k \left(-i\partial_x\langle x|k\rangle\right)\langle k|\psi\rangle \\
&= -i\partial_x \sum_k \langle x|k\rangle\langle k|\psi\rangle \\
&= -i\partial_x\langle x|\psi\rangle \\
&= -i\partial_x\psi(x)
\end{aligned}$$

这里$\partial_x \equiv \partial/\partial_x$。即，将动量算符$\hat{p}$作用在态$|\psi\rangle$上的作用是将其坐标表示$\psi(x)$变成得到的新的一个量子态对应的坐标表示

$$|\psi\rangle \overset{\text{坐标表示}}{\to} \langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$
$$\hat{p}|\psi\rangle \overset{\text{坐标表示}}{\to} = \langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\partial_x\psi(x)$$

上面的态显然并没有起到什么作用，当然只要$|\psi\rangle$不是位置本征态，可以将$|\psi\rangle$用$\cdots$替换，即

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{p}\cdots &= \sum_k \langle x|\hat{p}|k\rangle\langle k|\cdots = \sum_k \left(-i\partial_x\langle x|k\rangle\right)\langle k|\cdots \\
&= -i\partial_x \sum_k \langle x|k\rangle\langle k|\cdots \\
&= -i\partial_x\langle x|\cdots
\end{aligned}$$

因此有动量算符的坐标表示为

$$\hat{p}\cdots \overset{\text{坐标表示}}{\to} \langle x|\hat{p}\cdots = -i\partial_x\langle x|\cdots$$

其中$\cdots$不能是关于x的态或者函数。

例子1：静态Schrödinger方程

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0}+V(\hat{r})\right]|\psi\rangle=E|\psi\rangle$$

方程两边同时左乘位置本征态$\langle x|$

$$\langle x|\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0}+V(\hat{r})\right]|\psi\rangle=\langle x|E|\psi\rangle=E\psi(x)$$

根据

$$\begin{aligned}\langle x|V(\hat{r})\cdots&=V(x)\langle x|\cdots\\ \langle x|\hat{p}^2\cdots&=\langle x|\hat{p}\hat{p}\cdots=(-i\partial_x)\langle x|\hat{p}\cdots=(-i\partial_x)^2\langle x|\hat{p}\cdots\end{aligned}$$

于是有

$$\begin{aligned}\langle x|\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0}+V(\hat{r})\right]|\psi\rangle&=\left[\frac{(-i\partial_x)^2}{2m_0}+V(x)\right]\langle x|\psi\rangle\\&=\left[\frac{(-i\partial_x)^2}{2m_0}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)\end{aligned}$$

即

$$\left[\frac{(-i\partial_x)^2}{2m_0}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

例子2：推迟格林函数　推迟格林函数定义：

$$\hat{G}(E)\equiv\frac{1}{E-\hat{H}+i0^+}$$

这里$\hat{H}$是系统的哈密顿量，该系统的本征值和本征函数分别为：E_n，$|\phi_n\rangle$。

$$\hat{H}|\phi_n\rangle=E_n|\phi_n\rangle$$

因为哈密顿量是一个厄密算符，因此，其本征态构成的正交归一的完备集

$$\sum_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n|=\hat{1}\quad\text{完全性关系}$$

$$\langle\phi_n|\phi_n\rangle=\delta_{m,n}\quad\text{正交归一化关系}$$

将哈密顿顿量本征矢构成的完全性关系插入到格林函数中，可以得将格林函数表示为

$$\begin{aligned}\hat{G}(E)&\equiv\sum_n\frac{1}{E-\hat{H}+i0^+}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\\&=\sum_n\frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{E-E_n+i0^+}\end{aligned}$$

上式中用到了

$$g(\hat{H})|\phi_n\rangle = g(E_n)|\phi_n\rangle$$

即$g(\hat{H})$可以通过泰勒展开，展开为$\hat{H}$的幂级数组成的函数。

不同位置本征态下的格林函数矩阵元

$$\begin{aligned}G(x,x') \equiv \langle x|\hat{G}|x'\rangle &= \langle x|\frac{1}{E-\hat{H}+i0^+}|x'\rangle = \\ &= \sum_n \frac{\langle x|\phi_n\rangle\langle\phi_n|x'\rangle}{E-E_n+i0^+} \\ &= \sum_n \frac{\phi_n(x)\phi_n^*(x')}{E-E_n+i0^+}\end{aligned}$$

其中$\phi_n(x) \equiv \langle x|\phi_n\rangle$是能量本征态$|\phi_n\rangle$的坐标表示。

只要系统的本征态$\{|\phi_n\rangle\}$ 和本征值$\{E_n\}$ 已知的情况下，我们就可以通过这个表达式计算格林函数。

比如，对于自由粒子，其哈密顿量为$\hat{H}_0 = \hat{p}/2m_0$。这个哈密顿量的本征态是动量的本征态，即$|\phi_n\rangle = |k\rangle$，本征能量$\varepsilon_k = k^2/2m_0$。系统的格林函数为

$$\hat{G}(E) \equiv \sum_k \frac{1}{E-\hat{H}_0+i0^+}|k\rangle\langle k| = \sum_k \frac{|k\rangle\langle k|}{E-\varepsilon_k+i0^+}$$

在动量本征态下的矩阵表示为：

$$\begin{aligned}G(k,k') \equiv \langle k|\hat{G}|k'\rangle &= \langle k|\frac{1}{E-\hat{H}_0+i0^+}|k'\rangle \\ &= \frac{\langle k|k'\rangle}{E-\varepsilon_k+i0^+} \\ &= \delta_{k,k'}G(k)\end{aligned}$$

其中$G(k) = 1/(E-\varepsilon_k+i0^+)$。这就是动量空间的格林函数。

坐标本征态下的格林函数

$$\begin{aligned}G(x,x') \equiv \langle x|\hat{G}|x'\rangle &= \langle x|\frac{1}{E-\hat{H}_0+i0^+}|x'\rangle \\ &= \sum_k \langle x|\frac{1}{E-\hat{H}_0+i0^+}|k\rangle\langle k|x'\rangle \\ &= \sum_k \frac{\langle x|k\rangle\langle k|x'\rangle}{E-\varepsilon_k+i0^+} \\ &= \frac{1}{L}\sum_k \frac{e^{ikx}e^{-ikx'}}{E-\varepsilon_k+i0^+} \\ &= \int \frac{dk}{2\pi}\frac{e^{ik(x-x')}}{E-\varepsilon_k+i0^+}\end{aligned}$$

位置空间的格林函数矩阵元$G(x,x')$只与$(x-x')$有关，因此可以用$G(x-x')$表示$G(x,x')$，其与动量空间的格林函数之间由Fourier变化联系。

$$G(x,x') = \int \frac{dk}{2\pi}e^{ik(x-x')}G(k)$$

第四章　无自旋–三维情形

只考虑一个粒子

$$
\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{y}] = [\hat{y},\hat{z}] = [\hat{z},\hat{x}] = 0 \\
\left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right] = \left[\hat{p}_y,\hat{p}_z\right] = [\hat{p}_z,\hat{p}_x] = 0 \\
\left[\hat{x},\hat{p}_y\right] = [\hat{y},\hat{p}_z] = [\hat{z},\hat{p}_x] = 0 \\
[\hat{x},\hat{p}_z] = [\hat{y},\hat{p}_x] = \left[\hat{z},\hat{p}_y\right] = 0 \\
[\hat{x},\hat{p}_x] = \left[\hat{y},\hat{p}_y\right] = [\hat{z},\hat{p}_z] = i
\end{aligned}
$$

或者归纳为

$$\left[\hat{r}_\alpha,\hat{r}_\beta\right] = 0, \left[\hat{p}_\alpha,\hat{p}_\beta\right] = 0, \left[\hat{r}_\alpha,\hat{p}_\beta\right] = i\delta_{\alpha\beta}$$

其中α,β可以取x,y,z，$\hat{r}_\alpha$，$\hat{r}_\beta$取坐标的三个分量$\hat{x},\hat{y},\hat{z}$.

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\mathbf{r}}, \tag{4.1}$$

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{p}}, \tag{4.2}$$

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{S}}. \tag{4.3}$$

接下来讨论，时间反演算符作用在位置和动量本征态上的关系：
对于位置本征态$|\mathbf{x}\rangle$，其定义为

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle. \tag{4.4}$$

其满足的正交归一化关系为

$$\int d\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| = 1, \tag{4.5}$$

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \tag{4.6}$$

对于动量本征态$|\mathbf{k}\rangle$：其定义为

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle. \tag{4.7}$$

根据箱归一化条件：$V = L^3$为箱的体积$\mathbf{k} = (2\pi n_1/L)\mathbf{e}_x + (2\pi n_2/L)\mathbf{e}_y + (2\pi n_3/L)\mathbf{e}_z$
每一个小的动量的体积为：$(2\pi/L)^3 = (2\pi)^3/V$
求和变积分的关系：

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi/L)^3}\int f(\mathbf{k})d\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3}\int f(\mathbf{k})d\mathbf{k}. \tag{4.8}$$

其中

$$\sum_{\mathbf{k}} 1 = \frac{\int d\mathbf{k}}{(2\pi/L)^3} = \text{Number of cubes.} \tag{4.9}$$

动量态满足的正交归一化关系

$$\sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = 1, \tag{4.10}$$

$$\langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}.$$

动量本征态与位置本征态做内积：

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \Leftrightarrow \langle\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tag{4.11}$$

满足的关系：

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{x}'\rangle = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \tag{4.12}$$

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\mathbf{r}}, \tag{4.13}$$

位置算符作用在位置本本征态上为：

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle, \tag{4.14}$$

将时间反演算符作用在上式两边

$$(\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{T}}^{-1})\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle), \tag{4.15}$$

$$\hat{\mathbf{r}}(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle) = \mathbf{x}(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle), \tag{4.16}$$

因此，得到$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle$仍然是位置算符$\hat{\mathbf{r}}$的本征态，并且本征值仍然是$\mathbf{x}$

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle = \lambda|\mathbf{x}\rangle. \tag{4.17}$$

因为$|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}\rangle \equiv \hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle$ 是归一化的: $\langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}\rangle = \langle\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle^* = 1$, 因此得到$|\lambda| = 1$, 即$\lambda = e^{i\gamma_{\mathbf{x}}}$,则

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle = e^{i\gamma_{\mathbf{x}}}|\mathbf{x}\rangle. \tag{4.18}$$

在定义位置本征态时我们选择：

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle. \tag{4.19}$$

然后根据有

$$|\mathbf{k}\rangle = \int d\mathbf{x}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle \tag{4.20}$$

得到动量本征态时间反演作用之后应该满足的关系：

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle = \hat{\mathcal{T}}\int d\mathbf{x}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \int d\mathbf{x}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = |-\mathbf{k}\rangle. \tag{4.21}$$

****

上述的关系也可以通过对动量算符，以及动量算符满足的方程出发得到。

时间反演算符对动量算符的作用关系为

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{p}} \tag{4.22}$$

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle, \tag{4.23}$$

$$(\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{T}}^{-1})\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle), \tag{4.24}$$

$$\hat{\mathbf{p}}(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle) = -\mathbf{k}(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle), \tag{4.25}$$

因此$|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k}\rangle \equiv \hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle$ 仍然是动量算符$\mathbf{p}$对应的本征值为$-\mathbf{k}$的一个归一化的本征态。类似于时间反演作用在位置本征态下：有

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle = e^{i\gamma_{\mathbf{k}}}|-\mathbf{k}\rangle. \tag{4.26}$$

由于一致性要求，在选择合适相位$\gamma_{\mathbf{k}}$后满足$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle$.

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle &= \hat{\mathcal{T}}\sum_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle = \sum_{\mathbf{k}}e^{i\gamma_{\mathbf{k}}}|-\mathbf{k}\rangle(\langle\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle)^* \\ &= \sum_{\mathbf{k}}e^{i\gamma_{\mathbf{k}}}|-\mathbf{k}\rangle\langle-\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle.\end{aligned} \tag{4.27}$$

对于上式，则有

$$\sum_{\mathbf{k}}e^{i\gamma_{\mathbf{k}}}|-\mathbf{k}\rangle\langle-\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle. \tag{4.28}$$

两边同时左乘$\langle\mathbf{k}_0|$

$$e^{i\gamma_{-\mathbf{k}_0}}\langle\mathbf{k}_0|\mathbf{x}\rangle = \langle\mathbf{k}_0|\mathbf{x}\rangle \Rightarrow e^{i\gamma_{-\mathbf{k}_0}} = 1 \tag{4.29}$$

对于所有的$\mathbf{k}_0 \Rightarrow e^{i\gamma_{\mathbf{k}}} = 1$对所有的$\mathbf{k}$都成立.

另外一种方法

我们要求$\langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k}\rangle = \langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle^*$.

左边

$$\langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k}\rangle = \langle\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k}\rangle = e^{i\gamma_{\mathbf{k}}}\langle\mathbf{x}|-\mathbf{k}\rangle = e^{i\gamma_{\mathbf{k}}}\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle^*, \tag{4.30}$$

同样地有：对所有的$\mathbf{k}$有$e^{i\gamma_{\mathbf{k}}} = 1$.

****

回顾自旋算符

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{s}}. \tag{4.31}$$

s_z的本征态定义为$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$，满足

$$\hat{s}_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle, \tag{4.32}$$

$$\hat{s}_z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle. \tag{4.33}$$

根据时间反演算符的操作规则：

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{s}_z\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle, \tag{4.34}$$

$$\hat{s}_z(\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle) = (-\frac{1}{2})(\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle), \tag{4.35}$$

因此$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle$仍然是$\hat{s}_z$的本征值为$-1/2$的本征态

$$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = e^{i\gamma}|\downarrow\rangle. \tag{4.36}$$

同理

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{s}_z\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle,$$

$$\hat{s}_z\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = \frac{1}{2}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle,$$

得到$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle$仍然是$s_z$的本征值为$1/2$的本征态，即

$$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = e^{i\gamma}|\downarrow\rangle,$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = e^{i\gamma'}|\uparrow\rangle.$$

$$\hat{\mathcal{T}}^2|\uparrow\rangle = e^{-i\gamma}\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = e^{-i\gamma}e^{i\gamma'}|\uparrow\rangle,$$

$$\gamma' = \gamma + \pi.$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = e^{i\gamma}|\downarrow\rangle,$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -e^{i\gamma}|\uparrow\rangle.$$

选择这么一组定义$|\uparrow\rangle$ 因此有$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$即

$$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle,$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -|\uparrow\rangle.$$

时间反演算符作用在态矢外积形式上的算符$|\psi\rangle\langle\varphi|$ 上

$$\hat{\mathcal{T}}(|\psi\rangle\langle\varphi|)\hat{\mathcal{T}}^{-1} = |\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|.$$

证明如下：

$$O \equiv \hat{\mathcal{T}}(|\psi\rangle\langle\varphi|)\hat{\mathcal{T}}^{-1},$$

$$\langle m|O|n\rangle \overset{?}{=} \langle m|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle.$$

$$
\begin{aligned}
\langle m|O|n\rangle &= \langle m|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\hat{\mathcal{T}}O|n\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}m|\hat{\mathcal{T}}O|n\rangle^{*} \\
&= \left(\langle\hat{\mathcal{T}}m|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}(|\psi\rangle\langle\varphi|)\hat{\mathcal{T}}^{-1}|n\rangle\right)^{*} \\
&= -\left(\langle\hat{\mathcal{T}}m|(|\psi\rangle\langle\varphi|)\hat{\mathcal{T}}^{-1}|n\rangle\right)^{*} \\
&= -\left(\langle\hat{\mathcal{T}}m|\psi\rangle\langle\varphi|\hat{\mathcal{T}}^{-1}n\rangle\right)^{*} \\
&= -\left(\langle\hat{\mathcal{T}}m|\psi\rangle^{*}\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle\right) \\
&= -\left(\langle\psi|\hat{\mathcal{T}}m\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle\right) \\
&= -\left(\left(\hat{\mathcal{T}}\langle\psi|\hat{\mathcal{T}}m\rangle\right)^{*}\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle\right) \\
&= \left(\left(\langle\hat{\mathcal{T}}\psi|m\rangle\right)^{*}\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle\right) \\
&= \langle m|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle
\end{aligned}
\tag{4.37}
$$

$$
\begin{aligned}
LHS &= \langle m|On\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}m|\hat{\mathcal{T}}On\rangle^{*} = \\
(\langle\hat{\mathcal{T}}m|\hat{\mathcal{T}}O|n\rangle)^{*} &= -(\langle\hat{\mathcal{T}}m|\psi\rangle\langle\varphi|\hat{\mathcal{T}}^{-1}|n\rangle)^{*} \\
&= -\langle\hat{\mathcal{T}}m|\psi\rangle^{*}\langle\varphi|\hat{\mathcal{T}}^{-1}n\rangle^{*} = -\langle\hat{\mathcal{T}}m|\psi\rangle^{*}\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle \\
&= -\langle\psi|\hat{\mathcal{T}}m\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle = -\langle\hat{\mathcal{T}}\psi|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}m\rangle^{*}\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle \\
&= \langle m|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|n\rangle = RHS.
\end{aligned}
\tag{4.38}
$$

$s_x = \sigma_x/2$ 的本征态为

$$|+\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \tag{4.39}$$

$$|-\rangle = \frac{|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{4.40}$$

时间反演算符作用在s_x的本征态上为：

$$\hat{\mathcal{T}}|+\rangle = -|-\rangle, \tag{4.41}$$

$$\hat{\mathcal{T}}|-\rangle = |+\rangle. \tag{4.42}$$

在坐标表象下，算符的具体表示为$\hat{\mathbf{p}} = -i\partial_{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{x}}$, 以及在这组基下$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, 自旋算符为$s_\alpha = \sigma_\alpha/2$ $(\alpha = x, y, z)$. 则时间反演算符：

$$\hat{\mathcal{T}} = i\sigma_y K \Rightarrow \hat{\mathcal{T}}^{-1} = -i\sigma_y K. \tag{4.43}$$

其中K 将其取为复共轭，例如

$$(\hat{\mathcal{T}}\mathbf{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1})(\cdots) = (i\sigma_y)\mathbf{p}^{*}(i\sigma_y^{*})(\cdots) = -\mathbf{p}(\cdots). \tag{4.44}$$

****

时间反演算符作用在角动量算符上$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$:

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\times\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}$$
$$= \hat{\mathbf{r}}\times(-\hat{\mathbf{p}}) = -\hat{\mathbf{L}}. \tag{4.45}$$

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{s}}, \tag{4.46}$$
$$\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{J}}. \tag{4.47}$$

无自旋的情况：

$$\hat{\mathcal{T}}\psi(\mathbf{x}) = \hat{\mathcal{T}}\langle\mathbf{x}|\psi\rangle = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle^* = \langle\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle. \tag{4.48}$$

$$|\psi\rangle\to\psi(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle, \tag{4.49}$$
$$|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle\to\langle\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle^* = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle^* = \psi^*(\mathbf{x}). \tag{4.50}$$

自旋1/2的粒子：

$$\langle\mathbf{x}|\psi\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}|\chi\rangle, \tag{4.51}$$
$$\langle\mathbf{x},\uparrow|\psi\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\langle\uparrow|\chi\rangle, \tag{4.52}$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x},\uparrow\rangle = |\mathbf{x},\downarrow\rangle, \tag{4.53}$$
$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x},\downarrow\rangle = -|\mathbf{x},\uparrow\rangle. \tag{4.54}$$

$$\psi_\uparrow(\mathbf{x}) \equiv \langle\mathbf{x},\uparrow|\psi\rangle, \tag{4.55}$$
$$\psi_\downarrow(\mathbf{x}) \equiv \langle\mathbf{x},\downarrow|\psi\rangle,$$

$$\langle\mathbf{x},\uparrow|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}(\mathbf{x},\uparrow)|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle^* = -\langle\mathbf{x},\downarrow|\psi\rangle^*$$
$$= -\psi_\downarrow^*(\mathbf{x}), \tag{4.56}$$
$$\langle\mathbf{x},\downarrow|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}(\mathbf{x},\downarrow)|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle^* = \langle\mathbf{x},\uparrow|\psi\rangle^*$$
$$= \psi_\uparrow^*(\mathbf{x}), \tag{4.57}$$

****

石墨烯$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{R},\tau\rangle = |\mathbf{R},\tau\rangle$.

$$\sigma_x = e^{i\pi/6}|\mathbf{K},A\rangle\langle\mathbf{K},B| + |\mathbf{K},B\rangle\langle\mathbf{K},A|.$$

****

从$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle$以及

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}\left(\int d\mathbf{x}\,|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\right) = \int d\mathbf{x}\,\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|,$$

出发，有

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{T}}\mathbf{r}\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \hat{\mathcal{T}}\left[\int d\mathbf{x}\,\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\right]\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \int d\mathbf{x}\,\mathbf{x}\,(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}^{-1}) \\
&= \int d\mathbf{x}\,\mathbf{x}\,|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}| = \mathbf{r}. \\
\hat{\mathcal{T}}\mathbf{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \hat{\mathcal{T}}\left[\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\right]\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\hat{\mathcal{T}}^{-1} \\
&= \sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k}\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k}| = \sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}|-\mathbf{k}\rangle\langle-\mathbf{k}| = -\mathbf{p}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
s_x &= \frac{1}{2}\sum_{\mu\nu=\uparrow,\downarrow}|\mu\rangle\langle\nu|(\sigma_x)_{\mu\nu} = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|, \\
s_z &= \frac{1}{2}\sum_{\mu\nu=\uparrow,\downarrow}|\mu\rangle\langle\nu|(\sigma_z)_{\mu\nu} = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|, \\
s_y &= \frac{1}{2}\sum_{\mu\nu=\uparrow,\downarrow}|\mu\rangle\langle\nu|(\sigma_y)_{\mu\nu} = \frac{-i}{2}|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{i}{2}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{T}}s_x\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \frac{1}{2}|\hat{\mathcal{T}}\uparrow\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\downarrow| + \frac{1}{2}|\hat{\mathcal{T}}\downarrow\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\uparrow| \\
&= -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\uparrow| - \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\downarrow| = -s_x.
\end{aligned}$$

第五章　多粒子无相互作用

单电子的哈密顿量

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\hat{\mathbf{r}})$$

多体哈密顿量

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \hat{H}_i = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m_0} + V(\hat{\mathbf{r}}_i)$$

不考虑电子电子相互作用，就可以用单体方法去处理问题

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi_k\rangle &= E_k|\psi_k\rangle, \\ \hat{H}^n|\psi_k\rangle &= E_k^n|\psi_k\rangle, \\ g(\hat{H}) &= g(E_k)|\psi_k\rangle. \end{aligned}$$

$$\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = 1,\ \langle\psi_k|\psi_{k'}\rangle = \delta_{kk'}.$$

单粒子的格林函数为

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{E + i0^+ - \hat{H}}$$

格林函数在坐标表象下的矩阵表示为

$$\begin{aligned} G(E, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \langle\mathbf{x}_1|\frac{1}{E - \hat{H} + i0^+}|\mathbf{x}_2\rangle \\ &= \sum_k \langle\mathbf{x}_1|\frac{1}{E - \hat{H} + i0^+}|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\mathbf{x}_2\rangle \\ &= \sum_k \langle\mathbf{x}_1|\frac{1}{E - E_k + i0^+}|\psi_k\rangle\psi_k^*(\mathbf{x}_2) \\ &= \sum_k \frac{\psi_k(\mathbf{x}_1)\psi_k^*(\mathbf{x}_2)}{E - E_k + i0^+}. \end{aligned}$$

局域态密度为

$$\begin{aligned} \rho(E, \mathbf{x}) &= -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G(E, \mathbf{x}, \mathbf{x}) \\ &= -\frac{1}{\pi}\sum_k |\psi_k(\mathbf{x})|^2\,\mathrm{Im}\,\frac{1}{E - E_k + i0^+} \\ &= \sum_k |\psi_k(\mathbf{x})|^2\,\delta(E - E_k). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho(E,\mathbf{R}) &= -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\mathbf{G}(\mathbf{R},\mathbf{R},E)\\
&= -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\langle\mathbf{R},\alpha|\frac{1}{E-H+i0^+}|\mathbf{R},\alpha\rangle\\
&= -\frac{1}{\pi}\sum_{k,\beta}\mathrm{Tr}\,\mathrm{Im}\langle\mathbf{R},\alpha|\frac{1}{E-H+i0^+}|\mathbf{k},\beta\rangle\langle\mathbf{k},\beta|\mathbf{R},\alpha\rangle\\
&= -\frac{1}{\pi}\sum_{k}\frac{1}{N}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\mathrm{Tr}\,\mathrm{Im}\left[\frac{1}{E-\mathbf{H}(k)+i0^+}\right]\\
&= -\frac{1}{\pi}\sum_{k}|\psi_k(\mathbf{R})|^2\sum_{\alpha}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{E-\mathbf{H}(k)+i0^+}\right]_{\alpha\alpha}\\
&= \sum_{k,\alpha}|\psi_k(\mathbf{R})|^2\delta\left(E-\mathbf{H}(k)\right)_{\alpha\alpha}
\end{aligned}$$

其中

$$\frac{1}{(x+i0^+)} = \mathcal{P}(\frac{1}{x}) - i\pi\delta(x).$$

态密度与位置无关

$$\rho(E) \equiv \sum_k \delta(E-E_k).$$

对于多粒子的处理，考虑费米能E_F，费米分布为$f(E)=\frac{1}{e^{\beta(E-E_F)}+1}$, 其中$\beta = 1/(k_BT)$. 相对于单粒子的算符$O(\mathbf{x})$来讲，多粒子的算符为

$$O(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} O_i(\mathbf{x}) = \sum_{k,k'}\langle\psi_k|O(\mathbf{x})|\psi_{k'}\rangle\, C_k^\dagger C_{k'}$$

一个多粒子算符，用单粒子的算符加的时候，得标记上粒子的编号，而用二次量子化形式给出时，只需要告诉在那个态上会出现一个粒子即可。

这里$C_k^\dagger$表示在本征态$|\psi_k\rangle$处产生一个粒子，例如$C_k^\dagger|0\rangle = |1_k\rangle$

热力学平衡态做期望值：$\left\langle C_k^\dagger C_{k'}\right\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle O(\mathbf{x})\rangle &= \sum_{k,k'}\left\langle\psi_k|\hat{O}(\mathbf{x})|\psi_{k'}\right\rangle\left\langle C_k^\dagger C_{k'}\right\rangle\\
&= \sum_{k,k'}\langle\psi_k|O(\mathbf{x})|\psi_{k'}\rangle\,\delta_{k,k'}f(E_k)\\
&= \sum_{k}\langle\psi_k|O(\mathbf{x})|\psi_k\rangle\, f(E_k).
\end{aligned}$$

总的电子

处于k态上的粒子是多少，等于费米分布。

总电子数：单体的和多体的有个对应

多体的电子数等于单体的粒子数再乘上分布，单体的粒子数为1，

$$
\begin{aligned}
\mathcal{N} &= \sum_k \left\langle \psi_k | \hat{N} | \psi_k \right\rangle f(E_k) = \sum_k f(E_k) \\
&= \int dE \sum_k f(E_k)\delta(E - E_k) = \int f(E)\rho(E) dE
\end{aligned}
$$

最后得到，总的粒子数等于态密度乘上分布对能量的积分

在位置$\mathbf{x}$处多体的密度算符。

总的粒子数密度：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{N}(\mathbf{x}) \equiv \left\langle \hat{\mathcal{N}}(\mathbf{x}) \right\rangle &= \sum_k \left\langle \psi_k | \hat{N}(\mathbf{x}) | \psi_k \right\rangle f(E_k) \\
&= \sum_k |\psi_k(\mathbf{x})|^2 f(E_k) = \int f(E)\rho(E,\mathbf{x}) dE.
\end{aligned}
$$

局域态密度：

$$
\rho(E,\mathbf{x}) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G(E,\mathbf{x},\mathbf{x}) = \sum_k |\psi_k(\mathbf{x})|^2 \delta(E - E_k).
$$

$$
\int d\mathbf{x}\, \rho(E,\mathbf{x}) = \rho(E).
$$

$$
\begin{aligned}
\delta\rho(E,\mathbf{x}) &= \rho(E,\mathbf{x}) - \rho_0(E,\mathbf{x}) \\
&= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G(E,\mathbf{x},\mathbf{x}) - \left[-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_0(E,\mathbf{x},\mathbf{x}) \right]
\end{aligned}
$$

§5.1 从紧束缚模型到连续模型

对于任意一个由N个原胞以及原胞内有M个轨道组成的晶格体系，我们用$\mathbf{R}_n (n = 1, 2, \cdots, N)$来标记$N$个原胞，以及用$\alpha = 1, 2, \cdots, M$来标记在同一个原胞中的$M$轨道, 因此$|\mathbf{R}_n, \alpha\rangle$是第$n$个原胞中轨道为$\alpha$的基矢。并且满足正交归一化关系$\langle \mathbf{R}_n, \alpha | \mathbf{R}_{n'}, \alpha' \rangle = \delta_{nn'}\delta_{\alpha,\alpha'}$。由于晶体哈密顿量$\hat{H}$具有平移不变性，哈密顿量的矩阵元$H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}) \equiv \langle \mathbf{R}_n, \alpha | \hat{H} | \mathbf{R}_{n'}, \alpha' \rangle$仅仅依赖于$\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$。利用平移不变性，我们通过离散Fourier变换将实空间的基矢变换到Bloch基矢

$$
\left[e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0} |\mathbf{R}\rangle \right]^\dagger = \langle \mathbf{R} | e^{i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0} = \langle \mathbf{R} + \mathbf{R}_0 |
$$

定义一个平移算符，$e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0}$，其中$\mathbf{R}_0$是一个倒格矢，

$$
\begin{aligned}
e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0} |\mathbf{R}\rangle &= \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{R}\rangle = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_0} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{R}\rangle \\
&= \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_0} |\mathbf{k}\rangle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{R}_0)} \\
&= |\mathbf{R} + \mathbf{R}_0\rangle
\end{aligned}
$$

哈密顿量满足平移不变性：$e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0}\hat{H} = \hat{H}e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0}$

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= e^{i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0}\hat{H}e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0} \\
\langle\mathbf{R}_n,\alpha|\hat{H}|\mathbf{R}_{n'},\alpha'\rangle &= \langle\mathbf{R}_n,\alpha|e^{i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0}\hat{H}e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0}|\mathbf{R}_{n'},\alpha'\rangle \\
&= \langle\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_0,\alpha|\hat{H}|\mathbf{R}_0+\mathbf{R}_{n'},\alpha'\rangle \\
H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_{n'}) &= H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_{n'})
\end{aligned}
$$

$$
\langle\mathbf{k}',\alpha|e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}_0}|\mathbf{R}_{n'},\alpha'\rangle = \langle\mathbf{k}',\alpha|e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_0}|\mathbf{R}_{n'},\alpha'\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{R}_n+\mathbf{R}_0)}\langle\mathbf{R}_n,\alpha|\mathbf{R}_{n'},\alpha'\rangle
$$

$$
|\mathbf{k},\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}|\mathbf{R}_n,\alpha\rangle,
$$

在Bloch基下，使用$(1/N)\sum_n e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_n} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$满足正交归一关系$\langle\mathbf{k},\alpha|\mathbf{k}',\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$

$$
\begin{aligned}
\langle\mathbf{k},\alpha|\mathbf{k}',\alpha'\rangle &= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{n'=1}^{N}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{n'}}\langle\mathbf{R}_n,\alpha|\mathbf{R}_{n'},\alpha'\rangle \\
&= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{n'=1}^{N}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{n'}}\delta_{n,n'}\delta_{\alpha\alpha'} \\
&= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_n}\delta_{\alpha\alpha'} \\
&= \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}
\end{aligned}
$$

对于任意的一个倒格矢，$e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} = 1$，即Bolch态满足平移不变性$|\mathbf{k}+\mathbf{G},\alpha\rangle = |\mathbf{k},\alpha\rangle$，于是可以将$\mathbf{k}$限制在第一布里渊区，其中$\mathbf{k}$所允许的取值与原胞的数目$N$相等，因此，总的Bolch态的数目与实空间的基矢的数目一致为NM个。在Bloch基矢下，晶体哈密顿量H的矩阵元是对角的

$$
\begin{aligned}
\langle\mathbf{k},\alpha|H|\mathbf{k}',\alpha'\rangle &= \frac{1}{N}\sum_{n,n'}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{n'}}H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_{n'}) \\
&= \frac{1}{N}\sum_{n,n'}e^{-i\mathbf{k}\cdot\left(\mathbf{L}_n+\mathbf{R}_{n'}\right)}e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{n'}}H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{L}_n) \\
&= \frac{1}{N}\sum_{n,n'}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{L}_n}e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_{n'}}H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{L}_n) \\
&= \sum_{n}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{L}_n}H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{L}_n)\frac{1}{N}\sum_{n'}e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_{n'}} \\
&= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\sum_{n}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{L}_n}H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{L}_n) \\
&= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\sum_{n}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_n) \\
&\equiv \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}),
\end{aligned}
$$

其中运用了两次变量替换：

$$\mathbf{L}_n = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$$
$$\mathbf{R}_n = \mathbf{L}_n$$

因此$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \sum_n e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\mathbf{H}(\mathbf{R}_n)$是一个$M\times M$的矩阵。$\mathbf{H}(\mathbf{k})$是$M$-轨道的紧束缚哈密顿量.

总的晶体哈密顿量为：

$$H = \sum_{\mathbf{k}}\sum_{\alpha\alpha'}|\mathbf{k},\alpha\rangle H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k})\langle\mathbf{k},\alpha'| = \sum_{\mathbf{k}}[|\mathbf{k},1\rangle,\cdots,|\mathbf{k},M\rangle]\mathbf{H}(\mathbf{k})\begin{bmatrix}\langle\mathbf{k},1|\\ \vdots\\ \langle\mathbf{k},M|\end{bmatrix}.$$

通过对角化$M\times M$的矩阵$\mathbf{H}(\mathbf{k})$，我们得到M个本征值$E_m(\mathbf{k})$和M个本征态$\mathbf{C}_m$。并且本征态满足$\mathbf{C}_m^\dagger\mathbf{C}_{m'} = \delta_{mm'}$，其中$m = 1,2,\cdots,M$。因此，总的标量哈密顿量$H$的本征值为$E_m(\mathbf{k})$，本征态为

$$|\psi_{\mathbf{k},m}\rangle = \sum_\alpha C_m^\alpha|\mathbf{k},\alpha\rangle \Rightarrow \langle\psi_{\mathbf{k}m}|\psi_{\mathbf{k}'m'}\rangle = \delta_{kk'}\delta_{mm'},$$

对于上面的理解，$\mathbf{C}_m$是一个本征值为$E_m(\mathbf{k})$所对应的归一化的本征矢，并且其行数为M行，将所有本征值对应的本征矢构成一个幺正矩阵$\mathbf{U} = |\mathbf{C_1},\mathbf{C_2},\cdots,\mathbf{C}_M\rangle$，满足

$$\mathbf{H}(\mathbf{k})\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{H}(\mathbf{k})_{\mathrm{diag}}$$
$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{U}\mathbf{H}(\mathbf{k})_{\mathrm{diag}}\mathbf{U}^{-1}$$

因此上面的

$$H = \sum_{\mathbf{k}}\sum_{\alpha\alpha'}|\mathbf{k},\alpha\rangle H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k})\langle\mathbf{k},\alpha'| = \sum_{\mathbf{k}}[|\mathbf{k},1\rangle,\cdots,|\mathbf{k},M\rangle]\mathbf{U}\mathbf{H}(\mathbf{k})_{\mathrm{diag}}\mathbf{U}^{-1}\begin{bmatrix}\langle\mathbf{k},1|\\ \vdots\\ \langle\mathbf{k},M|\end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}|\psi_{\mathbf{k},m}\rangle &= [|\mathbf{k},1\rangle,\cdots,|\mathbf{k},M\rangle]\mathbf{U}\\ &= \sum_\alpha|\mathbf{k},\alpha\rangle C_m^\alpha\end{aligned}$$

这组新的基式满足：

$$\langle\psi_{\mathbf{k},m}|\psi_{\mathbf{k}',m'}\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{m,m'}$$

这里的C_m^α表示的是$|\mathbf{C_1},\mathbf{C_2},\cdots,\mathbf{C}_M\rangle$在这个矩阵中，第$m$列的本征矢中的第$\alpha$个分量。

如何理解，首先，一个哈密顿量，选取一组完备的基$|\mathbf{k},\alpha\rangle$，将哈密顿量的坐标给出（即在这组基下的矩阵给出$\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{H}(\mathbf{k})$），但是我们希望能够得到一组对角化的矩阵表示$\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{H}(\mathbf{k})_{\mathrm{diag}}$，哈密顿量在自身表象下写出来的矩阵表示就是对角的，这样问题就是转化为，寻找到一组非常好

的基$|\psi_{\mathbf{k},m}\rangle$，让整个哈密顿量在这组基下是对角的，然后找到新的基$|\psi_{\mathbf{k},m}\rangle$与$|\mathbf{k},\alpha\rangle$之间满足的关联)，换个理解为，找到一组幺正变换，使得

$$|\psi_{\mathbf{k},m}\rangle = \hat{\mathbf{U}}|\mathbf{k},\alpha\rangle$$

这里注意$|\mathbf{k},\alpha\rangle$是1列，$N*M$行的行矢量。

通常可以选取一组离散的晶格基矢为$|\mathbf{R}_n,\alpha\rangle$，其在时间反演下是不变。其Bloch基矢在时间反演下为$\mathcal{T}|\mathbf{k},\alpha\rangle = |-\mathbf{k},\alpha\rangle$，

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k},\alpha\rangle &= \hat{\mathcal{T}}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}|\mathbf{R}_n,\alpha\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}\hat{\mathcal{T}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{R}_n,\alpha\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}|\mathbf{R}_n,\alpha\rangle \\
&= |-\mathbf{k},\alpha\rangle
\end{aligned}$$

因此哈密顿量在满足时间反演下不变。

$$\begin{aligned}
\langle\mathbf{k},\alpha|H|\mathbf{k},\alpha'\rangle &= \mathbf{H}(\mathbf{k}) \\
\langle-\mathbf{k},\alpha|H|-\mathbf{k},\alpha'\rangle &= \mathbf{H}(-\mathbf{k}) \\
\left(\langle\mathbf{k},\alpha|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\right)H\left(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k},\alpha'\rangle\right) &= \langle\mathbf{k},\alpha|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}H\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k},\alpha'\rangle^* \\
&= \mathbf{H}(\mathbf{k})^*
\end{aligned}$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{k})^* = \mathbf{H}(-\mathbf{k})$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{T}}\left(\langle\mathbf{k},\alpha|H|\mathbf{k},\alpha'\rangle\right)\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k},\alpha|\hat{H}\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k},\alpha'\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k},\alpha|H\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k},\alpha'\rangle \\
&= \left(\langle\mathbf{k},\alpha|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\right)\hat{H}\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k},\alpha'\rangle \\
&= \langle\mathbf{k},\alpha|\hat{\mathcal{T}}^{\dagger}\hat{H}\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k},\alpha'\rangle^* \\
&= \langle\mathbf{k},\alpha|\hat{H}|\mathbf{k},\alpha'\rangle^* \\
&= \mathbf{H}(\mathbf{k})^*
\end{aligned}$$

因此当哈密顿量H在时间反演下不变，即哈密顿量的矩阵满足如下关系

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{H}^*(-\mathbf{k}).$$

在连续极限下，单胞的标记$\mathbf{R}_n \to \mathbf{R}$连续，然后定义一组离散基与连续基

$$|\mathbf{R},\alpha\rangle_{CM} \equiv \frac{1}{\sqrt{\Omega}}|\mathbf{R}_n,\alpha\rangle$$

这里Ω是每个原胞的体积，$\mathbf{R}$是坐标本征态$|\mathbf{R},\alpha\rangle$时对应的位置本征值，并且满足$\langle\mathbf{R},\alpha|\mathbf{R}',\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}')$

其与Bloch态之间满足关系：

$$|\mathbf{k},\alpha\rangle = \int d\mathbf{R}\,\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\,|\mathbf{R},\alpha\rangle$$

这里$V\equiv N\Omega$是整个系统的总体积，在连续极限下，此时的$|\mathbf{k},\alpha\rangle$变为了动量本征值为$\mathbf{k}$的本征态。

假设，我们讨论的物理系统包含一对时间反演的点$\mathbf{k}\approx\mathbf{K}_\pm$，根据$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{H}^*(-\mathbf{k})$.有$\mathbf{H}_+(\mathbf{q}) = \mathbf{H}_-^*(-\mathbf{q})$其中

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(\mathbf{K}_+ + \mathbf{q}) &\equiv \mathbf{H}_+(\mathbf{q}),\\ \mathbf{H}(\mathbf{K}_- + \mathbf{q}) &\equiv \mathbf{H}_-(\mathbf{q})\\ \mathbf{K}_+ &= -\mathbf{K}_-\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(\mathbf{K}_+ + \mathbf{q}) &= \mathbf{H}(-\mathbf{K}_+ - \mathbf{q})^* = \mathbf{H}(\mathbf{K}_- - \mathbf{q})^*\\ \mathbf{H}_+(\mathbf{q}) &= \mathbf{H}_-^*(-\mathbf{q})\end{aligned}$$

其满足时间反演对称性：

当构造哈密顿量的轨道是满足时间反演不变的轨道的时候，构造出来的哈密顿量满足这个关系。而其连续模型下得哈密顿量满足：

证明：

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{H}(\mathbf{K}_+ + \mathbf{q}) = \mathbf{H}(\mathbf{K}_+) + \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\mathbf{H}(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_+} + \cdots$$

然后考虑在$\mathbf{K}_-$处做展开

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}') = \mathbf{H}(\mathbf{K}_-) + \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}'}\mathbf{H}(\mathbf{k}')|_{\mathbf{k}'=\mathbf{K}_-} + \cdots$$

变量替换，当$\mathbf{k}\to\mathbf{k}'$，再将$\mathbf{k}'\to -\mathbf{k}$

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(-\mathbf{k}) &= \mathbf{H}(-\mathbf{K}_+) - \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\mathbf{H}(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=-\mathbf{K}_+} + \cdots\\ &= \mathbf{H}(\mathbf{K}_-) - \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\mathbf{H}(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_-} = \mathbf{H}(\mathbf{K}_- - \mathbf{q})\end{aligned}$$

因为$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{H}^*(-\mathbf{k})$

所以

$$\mathbf{H}(\mathbf{K}_+) = \mathbf{H}(\mathbf{K}_-)^*$$
$$\mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\mathbf{H}(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_+} = [-\mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\mathbf{H}(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_-}]^*$$

因此对于低能模型有：

$$\mathbf{H}_+(\mathbf{q}) = \mathbf{H}_-^*(-\mathbf{q}).$$

因为哈密顿量在Bloch态下是时间对角的$\langle\mathbf{k},\alpha|H|\mathbf{k}',\beta\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\mathbf{H}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$，因此$f(H)$在Bloch基下展开仍然是对角的，$\langle\mathbf{k},\alpha|f(H)|\mathbf{k}',\beta\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}f(\mathbf{H}(\mathbf{k}))_{\alpha\beta}$；只要利用泰勒展开即可证明。因此在Bolch基下的格林函数也是对角化的。

$$\langle\mathbf{k},\alpha|\frac{1}{E-H+i0^+}|\mathbf{k}',\beta\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\left[\frac{1}{E-\mathbf{H}(\mathbf{k})+i0^+}\right]_{\alpha\beta}$$

根据推迟格林函数的定义：

$$G = \frac{1}{E-H+i0^+}$$

分别用对偶矢量$\langle\mathbf{R}_2,\alpha|$左乘，以及矢量$|\mathbf{R}_1,\beta\rangle$右乘上式坐标基矢

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,E) = \langle\mathbf{R}_2,\alpha|\frac{1}{E-H+i0^+}|\mathbf{R}_1,\beta\rangle$$

再插入一组动量本征态的完全性关系：

$$|\mathbf{k},\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}|\mathbf{R}_n,\alpha\rangle,$$

格林函数矩阵元满足的关系为

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,E) &= \langle\mathbf{R}_2,\alpha|\frac{1}{E-H+i0^+}|\mathbf{R}_1,\beta\rangle \\
&= \sum_{n\gamma}\langle\mathbf{R}_2,\alpha|\frac{|\mathbf{k},\gamma\rangle\langle\mathbf{k},\gamma|}{E-H+i0^+}|\mathbf{R}_1,\beta\rangle \\
&= \sum_{n}\langle\mathbf{R}_2|\mathbf{k}\rangle\frac{\delta_{\alpha\beta}}{E-\mathbf{H}(\mathbf{k})+i0^+}\langle\mathbf{k}|\mathbf{R}_1\rangle \\
&= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\left[\frac{1}{E-\mathbf{H}(\mathbf{k})+i0^+}\right]_{\alpha\beta}.
\end{aligned}$$

总的哈密顿量为：

$$\mathbf{G}(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,E) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}(\mathbf{k})+i0^+}.$$

紧束缚模型下的总的格林函数为：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{G}_{TB}(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,E) &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\approx\mathbf{K}_+} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}(\mathbf{k})+i0^+} \\
&+ \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\approx\mathbf{K}_-} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}(\mathbf{k})+i0^+} \\
&= \frac{1}{N}e^{i\mathbf{K}_+\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+} \\
&+ \frac{1}{N}e^{i\mathbf{K}_-\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\sum_{\mathbf{q}_-} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_-(\mathbf{q})+i0^+}
\end{aligned}
$$

连续模型下的总的格林函数：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{G}_{CM}(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_1,E) &=_{CM} \langle\mathbf{R}_2,\alpha|\frac{1}{E-H+i0^+}|\mathbf{R}_1,\beta\rangle_{CM} \\
&= \frac{1}{\Omega}\langle\mathbf{R}_2,\alpha|\frac{1}{E-H+i0^+}|\mathbf{R}_1,\beta\rangle \\
&= \frac{1}{N\Omega}e^{i\mathbf{K}_+\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+} \\
&+ \frac{1}{N\Omega}e^{i\mathbf{K}_-\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\sum_{\mathbf{q}_-} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_-(\mathbf{q})+i0^+} \\
&= e^{i\mathbf{K}_+\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\left[\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+}\right] \\
&+ e^{i\mathbf{K}_-\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\left[\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}_-} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_-(\mathbf{q})+i0^+}\right].
\end{aligned}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{q}}\frac{1}{V}e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+} &= \sum_{\mathbf{q}}\langle\mathbf{R}_2|\mathbf{q}\rangle\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+}\langle\mathbf{q}|\mathbf{R}_1\rangle \\
&= \langle\mathbf{R}_2|\left(\sum_{\mathbf{q}}|\mathbf{q}\rangle\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+}\langle\mathbf{q}|\right)|\mathbf{R}_1\rangle \\
&= \langle\mathbf{R}_2|\left(\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{p})+i0^+}\right)|\mathbf{R}_1\rangle.
\end{aligned}
$$

以及

$$
\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{q}}\frac{1}{V}e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+} &= \frac{V}{(2\pi)^d}\int d\mathbf{q}\frac{1}{V}e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+} \\
&= \int\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)}\frac{1}{E-\mathbf{H}_+(\mathbf{q})+i0^+}
\end{aligned}
$$

在连续模型下，哈密顿量$\mathbf{H}_\xi(\mathbf{k})$的时间反演操作下为$\mathbf{H}^*_{-\xi}(-\mathbf{k})$。即：$\hat{\mathcal{T}}\mathbf{H}_\xi(\mathbf{k})\hat{\mathcal{T}}^{-1}=\mathbf{H}^*_{-\xi}(-\mathbf{k})$。此外，哈密顿量的厄密性为：$\mathbf{H}^*_\xi(\mathbf{k})=\mathbf{H}^T_\xi(\mathbf{k})$。根据格林函数的定义，格林函数可以写为：$\mathbf{g}_\xi(\mathbf{k})=\left[E+i0^+-\mathbf{H}_\xi(\mathbf{k})\right]^{-1}$，动量空间中的格林函数在时间反演下的不变性满足：

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_\xi(\mathbf{k})&=\frac{1}{E+i0^+-\mathbf{H}_\xi(\mathbf{k})}\\&=\frac{1}{E+i0^+-\mathbf{H}^*_{-\xi}(-\mathbf{k})}\\&=\left[\frac{1}{E+i0^+-\mathbf{H}_{-\xi}(-\mathbf{k})}\right]^T\\&=\mathbf{g}^T_{-\xi}(-\mathbf{k})\end{aligned}\tag{5.1}$$

更具傅里叶变换，实空间中的格林函数在时间反演操作下满足：

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_\xi(\mathbf{R})&=\frac{1}{4\pi^2}\int d\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\mathbf{g}_\xi(\mathbf{k})\\&=\frac{1}{4\pi^2}\int d\mathbf{k}'e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}\mathbf{g}_\xi(-\mathbf{k}')\\&=\frac{1}{4\pi^2}\int d\mathbf{k}'e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}\mathbf{g}^T_{-\xi}(\mathbf{k}')\\&=\mathbf{g}^T_{-\xi}(-\mathbf{R})\end{aligned}\tag{5.2}$$

其中，在第二行用了变量替换$\mathbf{k}\to-\mathbf{k}'$。

§5.2 T矩阵方法计算δ势散射问题

杂质微扰之后的和无微扰的格林函数算符分别定义为：

$$\begin{aligned}\hat{G}(E)&=\frac{1}{E-\hat{H}+i0^+},\\\hat{G}_0(E)&=\frac{1}{E-\hat{H}_0+i0^+}.\end{aligned}$$

其中有杂质势能和无杂质势能的哈密顿量的关系

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$$

使用格林函数的定义，总的格林函数可以重写为

$$\hat{G}(E)=\frac{1}{E-\hat{H}+i0^+}=\frac{1}{E+i0^+-(\hat{H}_0+\hat{V})}$$

$$\begin{aligned}\hat{G}(E) &= \frac{1}{z-(\hat{H}_0+\hat{V})} = \frac{1}{z-\hat{H}_0-\hat{V}} \\ &= \frac{1}{(z-\hat{H}_0)(1-(z-\hat{H}_0)^{-1}\hat{V})} \\ &= \frac{1}{(1-(z-\hat{H}_0)^{-1}\hat{V})}\frac{1}{z-\hat{H}_0} \\ &= \frac{1}{1-\hat{G}_0(E)\hat{V}}\hat{G}_0(E)\end{aligned}$$

将$\frac{1}{1-\hat{G}_0(E)\hat{V}}$按照$\frac{1}{1-x}$的级数展开为$1+x+x^2+x^3+\cdots+x^n$

$$\begin{aligned}\hat{G}(E) &= \hat{G}_0(E)+\hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}_0(E) \\ &\quad +\hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}_0(E)+\cdots \\ &= \hat{G}_0(E)+\hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}(E) \\ &= \hat{G}_0(E)+\hat{G}(E)\hat{V}\hat{G}_0(E) \\ &= \hat{G}_0(E)+\hat{G}_0(E)\hat{T}(E)\,\hat{G}_0(E)\end{aligned}$$

其中$\hat{T}(z)$称之为T矩阵

$$\begin{aligned}\hat{T}(E) &= \hat{V}+\hat{V}\hat{G}_0(E)\hat{V}+\hat{V}\hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}_0(E)\hat{V}+\cdots \\ &= \hat{V}+\hat{V}G(E)\hat{V} \\ &= \hat{V}+\hat{V}\hat{G}_0(E)\hat{T}(E) \\ &= \left[1-\hat{V}\hat{G}_0(E)\right]^{-1}\hat{V} \\ &= \hat{V}+\hat{T}(z)\,\hat{G}_0(E)\hat{V}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{T}(E) &= \left(1+\hat{V}\hat{G}_0(E)+\hat{V}\hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}_0(E)+\cdots\right)\hat{V} \\ &= \left[1-\hat{V}\hat{G}_0(E)\right]^{-1}\hat{V}\end{aligned}$$

如果考虑势为一个δ势，其在坐标表象下为

$$\langle\mathbf{x}_1|\hat{V}|\mathbf{x}_2\rangle = V\delta(\mathbf{x}_1)\langle\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2\rangle = V\delta(\mathbf{x}_1)\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)$$

这个公式的来源来自于《Green’s functions in quantum physics, Economous》E. N. Economou 公式1.6 $\delta(r-r')\,L(r)\equiv\langle r|\hat{L}|r'\rangle$

则将坐标表示下的格林函数写出

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E)+\hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}(E)$$

$$\begin{aligned}G(E,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) &= G_0(E,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)+G_0(E,\mathbf{x}_1,\mathbf{0})VG(E,\mathbf{0},\mathbf{x}_2) \\ &= G_0(E,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)+G_0(E,\mathbf{x}_1,\mathbf{0})T(E)\,G_0(E,\mathbf{0},\mathbf{x}_2)\end{aligned}$$

其中T矩阵在坐标表象下为：

$$
\begin{aligned}
T(E) &= [1 - VG_0(z,\mathbf{0},\mathbf{0})]^{-1})V \\
&= \left[1 - V\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_0(E,\mathbf{k})\right]^{-1})V
\end{aligned}
$$

第二式根据动量空间的格林函数与实空间中的格林函数之间的傅里叶变换得到：

$$
G_0(E,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)} G_0(E,\mathbf{k})
$$

其中更具局域态密度得定义：在位置为$\mathbf{R}$处得地方，能量为E的态的密度。

$$
\begin{aligned}
\delta\rho(E,\mathbf{x}) &= \rho(E,\mathbf{x}) - \rho_0(E,\mathbf{x}) \\
&= -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,[G(E,\mathbf{x},\mathbf{x}) - G_0(E,\mathbf{x},\mathbf{x})] \\
&= -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G_0(E,\mathbf{x},\mathbf{0})T(E)\,G_0(E,\mathbf{0},\mathbf{x})
\end{aligned}
$$

Tr是如何加入进去的呢？

$$
\delta\rho(E,\mathbf{x}) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G_0(E,\mathbf{x},\mathbf{0})T(E)\,G_0(E,\mathbf{0},\mathbf{x})
$$

为了得到在动量空间中得准粒子干涉图，我们利用傅里叶变换将实空间得局域态密度的虚部转为动量空间为

$$
\delta\rho(E,\mathbf{k}) = \int d\mathbf{x}\delta\rho(E,\mathbf{x})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}
$$

利用一个数的虚部由复数及其复共轭的关系得到，即$\mathrm{Im}\,z = \frac{1}{2i}(z - z^*)$。

$$
\begin{aligned}
\delta\rho(E,\mathbf{k}) = -\frac{1}{2\pi i}\int d\mathbf{x}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}[&G_0(E,\mathbf{x},\mathbf{0})T(E)\,G_0(E,\mathbf{0},\mathbf{x}) \\
&- G_0^*(E,\mathbf{x},\mathbf{0})T^*(E)\,G_0^*(E,\mathbf{0},\mathbf{x})]
\end{aligned}
$$

将未微扰的实空间的格林函数通过傅里叶变换展开，于是上式中的表达式为

$$
\begin{aligned}
\delta\rho(E,\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2\pi i}\int d\mathbf{x}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\int\int \frac{d\mathbf{q}d\tilde{\mathbf{q}}}{(2\pi)^4} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}e^{-i\tilde{\mathbf{q}}\cdot\mathbf{x}}[G_0(E,\mathbf{q})T(E)\,G_0(E,\tilde{\mathbf{q}}) - G_0^*(E,\mathbf{q})T^*(E)\,G_0^*(E,\tilde{\mathbf{q}})] \\
&= -\frac{1}{2\pi i}\int \frac{d\mathbf{x}}{(2\pi)^4} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{q}})\cdot\mathbf{x}}\int\int d\mathbf{q}d\tilde{\mathbf{q}}[G_0(E,\mathbf{q})T(E)\,G_0(E,\tilde{\mathbf{q}}) - G_0^*(E,\mathbf{q})T^*(E)\,G_0^*(E,\tilde{\mathbf{q}})] \\
&= -\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{(2\pi)^2}\delta(\mathbf{q}-\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{q}})\int\int d\mathbf{q}d\tilde{\mathbf{q}}[G_0(E,\mathbf{q})T(E)\,G_0(E,\tilde{\mathbf{q}}) - G_0^*(E,\mathbf{q})T^*(E)\,G_0^*(E,\tilde{\mathbf{q}})] \\
&= -\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\mathbf{q}[G_0(E,\mathbf{q})T(E)\,G_0(E,\mathbf{q}-\mathbf{k}) - G_0^*(E,\mathbf{q})T^*(E)\,G_0^*(E,\mathbf{q}-\mathbf{k})] \\
&= \frac{i}{2\pi}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2}[G_0(E,\mathbf{q})T(E)\,G_0(E,\mathbf{q}-\mathbf{k}) - G_0^*(E,\mathbf{q})T^*(E)\,G_0^*(E,\mathbf{q}-\mathbf{k})] \\
&= \frac{i}{2\pi}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2}\mathbb{G}(E,\mathbf{q},\mathbf{k})
\end{aligned}
$$

其中δ函数的定义为

$$\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\mathbf{x}e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{q}})\cdot\mathbf{x}} = \delta(\mathbf{q}-\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{q}})$$

$$\begin{aligned}\mathbb{G}(E,\mathbf{q},\mathbf{k}) &= G_0(E,\mathbf{q})T(E)G_0(E,\mathbf{q}-\mathbf{k}) \\ &\quad - G_0^*(E,\mathbf{q})T^*(E)G_0^*(E,\mathbf{q}-\mathbf{k})\end{aligned}$$

因此得到在动量空间中的准粒子干涉图为：

$$\delta\rho(E,\mathbf{k}) = \frac{i}{2\pi}\int\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2}\mathbb{G}(E,\mathbf{q},\mathbf{k})$$

无自旋下满足的关系

$$H = \sum_{\mathbf{k}}\sum_{\alpha\alpha'}|\mathbf{k};\alpha\rangle\langle\mathbf{k};\alpha|H|\mathbf{k};\alpha'\rangle\langle\mathbf{k};\alpha'|$$

两边同时用时间反演操作作用上去

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{T}}H\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \hat{\mathcal{T}}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\alpha\alpha'}|\mathbf{k};\alpha\rangle\langle\mathbf{k};\alpha|H|\mathbf{k};\alpha'\rangle\langle\mathbf{k};\alpha'|\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \sum_{\mathbf{k}}\sum_{\alpha\alpha'}|-\mathbf{k};\alpha\rangle H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k})^*\langle-\mathbf{k};\alpha'| \\ &= \sum_{\mathbf{k}}\sum_{\alpha\alpha'}|\mathbf{k};\alpha\rangle H_{\alpha\alpha'}(-\mathbf{k})^*\langle\mathbf{k};\alpha'| \\ &= H = \sum_{\mathbf{k}}\sum_{\alpha\alpha'}|\mathbf{k};\alpha\rangle H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k})\langle\mathbf{k};\alpha'|\end{aligned}$$

于是得到，哈密顿量矩阵在时间反演下满足得关系为：

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{H}^*(-\mathbf{k})$$

§5.3 三维实矢量的转动

一个正当转动可以完全由转动轴$\mathbf{n}$和转动角度$\theta\in\mathbb{R}$完全描述，或者，等价的由一个矢量ω其方向; $n=\omega/|\omega|$，转动角度大小为$\theta\equiv|\omega|$。三维空间矢量的真实基矢

$$\mathbf{e}_x = \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}, \mathbf{e}_y = \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}, \mathbf{e}_z = \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$$

任意的一个三维空间中的矢量可以写为

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix}v_x\\v_y\\v_z\end{bmatrix} = v_x\mathbf{e}_x + v_y\mathbf{e}_y + v_z\mathbf{e}_z$$

三维实矢量的正当转动可以通过一个三维矩阵$\mathbf{g}(\omega)$描述，其作用效果是将一个矢量

$$\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{v} = \mathbf{g}(\omega)\begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} = v_x\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_x + v_y\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_y + v_z\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_z$$

设三维转动矢量为$\mathbf{g}(\omega)$

$$\mathbf{g}(\omega) = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix}$$

其作用效果是

$$\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_x = \begin{bmatrix} g_{11} \\ g_{21} \\ g_{31} \end{bmatrix}, \mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} g_{12} \\ g_{22} \\ g_{32} \end{bmatrix}, \mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} g_{13} \\ g_{23} \\ g_{33} \end{bmatrix}$$

或者

$$\mathbf{g}(\omega) = \left[\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_x, \mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_y, \mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_z\right] = \mathbf{g}(\omega)\left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right]$$

三维转动矩阵的物理理解为，将第i列变为$\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_i$，上面的式子亦可写为：

$$\mathbf{g}(\omega) = \left[\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_x, \mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_y, \mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_z\right] = \left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right]\mathbf{g}(\omega)$$

其中

$$\left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

因此，可以给出一个简单旋转的三维转动矩阵。例如，关于绕z轴转动θ角度可以通过一个实矢量$\omega = \theta\mathbf{e}_z$描述。为了得到这个三维矩阵，我们利用

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\,\mathbf{e}_x = \cos\theta\mathbf{e}_x + \sin\theta\mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\,\mathbf{e}_y = -\sin\theta\mathbf{e}_x + \cos\theta\mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\,\mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

于是得到

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z) = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

类似的，关于绕x轴转动θ角度可以通过一个实矢量$\omega = \theta\mathbf{e}_x$描述。

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_x)\,\mathbf{e}_x = \mathbf{e}_x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_x)\,\mathbf{e}_y = \cos\theta\mathbf{e}_y + \sin\theta\mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} 0 \\ \cos\theta \\ \sin\theta \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_x)\,\mathbf{e}_z = -\sin\theta\mathbf{e}_y + \cos\theta\mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} 0 \\ -\sin\theta \\ \cos\theta \end{bmatrix}$$

于是得到

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_x) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

类似的，关于绕y轴转动θ角度可以通过一个实矢量$\omega = \theta\mathbf{e}_y$描述。

$$\mathbf{g}\left(\theta\mathbf{e}_y\right)\mathbf{e}_x = \cos\theta\mathbf{e}_x - \sin\theta\mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} \cos\theta \\ 0 \\ -\sin\theta \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g}\left(\theta\mathbf{e}_y\right)\mathbf{e}_y = \mathbf{e}_y = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g}\left(\theta\mathbf{e}_y\right)\mathbf{e}_z = \sin\theta\mathbf{e}_x + \cos\theta\mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} \sin\theta \\ 0 \\ \cos\theta \end{bmatrix}$$

于是得到

$$\mathbf{g}\left(\theta\mathbf{e}_y\right) = \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix}$$

一个特殊旋转

$$\mathbf{g}(\varphi\mathbf{e}_z)\,\mathbf{g}\left(\theta\mathbf{e}_y\right)=\begin{bmatrix}\cos\theta\cos\varphi & -\sin\varphi & \sin\theta\cos\varphi\\ \cos\theta\sin\varphi & \cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{bmatrix}$$

将单位矢量$\mathbf{e}_z$转为具有及极角θ，方位角φ的新矢量。

对于绕着z轴的$\pi/2$转动，有

$$\mathbf{g}(\frac{\pi}{2}\mathbf{e}_z)=\begin{bmatrix}0 & -1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

即

$$\mathbf{g}(\frac{\pi}{2}\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_x=\mathbf{e}_y$$
$$\mathbf{g}(\frac{\pi}{2}\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_y=-\mathbf{e}_x$$
$$\mathbf{g}(\frac{\pi}{2}\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z=\mathbf{e}_z$$

对于任意的转动ω的三维转动矩阵是一个正交的实矩阵：

$$\mathbf{g}(\omega)\equiv e^{-i\mathbf{I}\cdot\omega}$$

满足$\mathbf{g}^T(\omega)\,\mathbf{g}(\omega)=\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{g}^T(\omega)=1$，其中

$$\mathbf{I}_x=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -i\\ 0 & i & \end{bmatrix},\mathbf{I}_y=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -i\\ 0 & i & \end{bmatrix},\mathbf{I}_z=\begin{bmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & 0\\ 0 & 0 & \end{bmatrix}$$

简言之$(\mathbf{I}_\alpha)_{\beta\gamma}=-i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$为厄密生成元。

例如，我们可以很容易验证

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_\alpha)=e^{-i\theta\mathbf{I}_\alpha}(\alpha=x,y,z)$$

需要验证噢

以上我们仅仅考虑的是正当转动，通常其行列式为$\mathbf{g}(\omega)=\mathbf{1}$，除了正当转动，另一个作用在矢量上的操作是空间反演$\mathcal{I}$。如果一个矢量$[v_x,v_y,v_z]^T$在空间反演下改变符号，那么我们说矢量这个矢量$\mathbf{v}$是一个极矢量（polar）；如果说矢量$\mathbf{v}$在空间反演下不变，则称矢量$\mathbf{v}$为轴矢量（axial）或者是赝矢量（pseudo）。例如，如果$\mathbf{a}=[a_x,a_y,a_z]^T$，$\mathbf{b}=[b_x,b_y,b_z]^T$是极矢量，则$\mathbf{a}\times\mathbf{b}$是一个轴矢量。

§5.4 轨道空间中的转动算符

一个在轨道空间中的正规转动ω将任意算符A转化为

$$e^{-i\mathbf{L}\cdot\omega}Ae^{i\mathbf{L}\cdot\omega} = \hat{\mathbf{g}}\,(\omega)\,A\hat{\mathbf{g}}^{-1}\,(\omega)$$

其中$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$是轨道空间中的角动量算符，$\hat{\mathbf{g}}\,(\omega) = e^{-i\mathbf{L}\cdot\omega}$是描述轨道空间中转动$\omega$的算符。位置算符

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

有三个分量且满足

$$\left[L_\alpha, r_\beta\right] = i\sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r_\gamma$$

动量算符有三个分量

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{bmatrix}$$

同样满足

$$\left[L_\alpha, p_\beta\right] = i\sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} p_\gamma$$

位置算符$\mathbf{r}$和动量算符$\mathbf{p}$都是在轨道空间中的矢量算符。

当一个算符有三个分量，

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{bmatrix}$$

且满足关系

$$[L_\alpha, V_\beta] = i\sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} V_\gamma,$$

则称算符$\mathbf{V}$ 为一个在轨道空间的算符矢量，

对于一个一般旋转$\boldsymbol{\omega}$，它作用在任意的矢量算符$\mathbf{V}$上为

$$\hat{\mathbf{g}}_{\mathrm{orb}}(\boldsymbol{\omega})\mathbf{V}\hat{\mathbf{g}}_{\mathrm{orb}}^{-1}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{g}^{-1}(\boldsymbol{\omega})\mathbf{V} \Leftrightarrow \hat{\mathbf{g}}_{\mathrm{orb}}(\boldsymbol{\omega})\begin{bmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{bmatrix}\hat{\mathbf{g}}_{\mathrm{orb}}^{-1}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{g}^{-1}(\boldsymbol{\omega})\begin{bmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{bmatrix} \tag{5.3}$$

$\mathbf{g}^{-1}(\boldsymbol{\omega})$是一个三乘三的转动矩阵作用在三维实矢量上，取矩阵的转置

$$\hat{\mathbf{g}}_{\mathrm{orb}}(\boldsymbol{\omega})\left[V_x, V_y, V_z\right]\hat{\mathbf{g}}_{\mathrm{orb}}^{-1}(\boldsymbol{\omega}) = \left[V_x, V_y, V_z\right]\mathbf{g}(\boldsymbol{\omega})$$

(上面的左边表示的是，对每个算符都做转动操作，等于右边的矩阵运算)
与之前对单位矢量的转动操作对比：

$$\left[\mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_x, \mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_y, \mathbf{g}(\omega)\,\mathbf{e}_z\right] = \left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right]\mathbf{g}(\omega)$$

对比发现，算符矢量$\left[V_x, V_y, V_z\right]$与$\left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right]$服从相同的转换规则。

$$\left[V_x, V_y, V_z\right] \overset{\hat{\mathbf{g}}(\omega)}{\to} \left[V_x, V_y, V_z\right]\mathbf{g}(\omega)$$
$$\left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right] \overset{\mathbf{g}(\omega)}{\to} \left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right]\mathbf{g}(\omega)$$

例如，一个绕z轴转θ角

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right] = \left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right]\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

或者

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_x = \cos\theta\mathbf{e}_x - \sin\theta\mathbf{e}_y$$
$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_y = \sin\theta\mathbf{e}_x + \cos\theta\mathbf{e}_y$$
$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z$$

相应的，算符转动为

$$\hat{\mathbf{g}}_{\text{orb}}(\omega)\left[V_x, V_y, V_z\right]\hat{\mathbf{g}}^{-1}_{\text{orb}}(\omega) = \left[V_x, V_y, V_z\right]\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

显示的写出

$$\hat{\mathbf{g}}_{\text{orb}}(\theta\mathbf{e}_z)V_x = \cos\theta V_x - \sin\theta V_y$$
$$\hat{\mathbf{g}}_{\text{orb}}(\theta\mathbf{e}_z)V_y = \sin\theta V_x + \cos\theta V_y$$
$$\hat{\mathbf{g}}_{\text{orb}}(\theta\mathbf{e}_z)V_z = V_z$$

可以重新写为：

$$\hat{\mathbf{g}}_{\text{orb}}(\omega)\,(\mathbf{V}\cdot\mathbf{n})\,\hat{\mathbf{g}}^{-1}_{\text{orb}}(\omega) = \mathbf{V}\cdot[\mathbf{g}(\omega)\mathbf{n}]$$

其中对$\hat{\mathbf{g}}_{\text{orb}}(\omega)\mathbf{V}\hat{\mathbf{g}}^{-1}_{\text{orb}}(\omega) = \hat{\mathbf{g}}^{-1}_{\text{orb}}(\omega)\mathbf{V}$两边都乘以单位矢量$\mathbf{n}$得到。

以上的讨论都是考虑的是正当转动，其转动矩阵的行列式为1。除了正当转动外，另外的对，算符的操作就是空间反演操作$\mathcal{I}$，空间反演是一个幺正算符

$$\mathcal{I}\mathbf{r}\mathcal{I}^{-1} = -\mathbf{r}$$
$$\mathcal{I}\mathbf{p}\mathcal{I}^{-1} = -\mathbf{p}$$
$$\mathcal{I}\mathbf{L}\mathcal{I}^{-1} = \mathbf{L}$$

如果一个矢量$\mathbf{V} = \left[V_x, V_y, V_z\right]^T$算符在空间反演操作下改变符号，则我们称这个矢量算符$\mathbf{V}$是极矢量算符，如果一个算符在空间反演下符号不改变，则称这个算符$\mathbf{V}$是一个轴矢量算符亦或者称为赝矢量算符。例如，如果算符如果$\mathbf{A} = [A_x, A_y, A_z]^T$，$\mathbf{B} = [B_x, B_y, B_z]^T$是极矢量算符，则$\mathbf{A}\times\mathbf{B}$是一个轴矢量算符。举个粒子就是$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$是一个轴矢量算符。

最后，给出方程（5.3）的推导。

矢量算符$\mathbf{V} = \left[V_x, V_y, V_z\right]$在转动$\delta\omega$下的表示为

$$e^{-i\mathbf{L}\cdot\delta\omega}\mathbf{V}\cdot\mathbf{m}e^{i\mathbf{L}\cdot\delta\omega} \approx \mathbf{V}\cdot\mathbf{m} - i\,[\mathbf{L}\cdot\delta\omega, \mathbf{V}\cdot\mathbf{m}] = \mathbf{V}\cdot\mathbf{m} + \mathbf{V}\cdot(\delta\omega\times\mathbf{m}) + O\left(\delta\omega^2\right)$$

其中

$$[\mathbf{L}\cdot n, \mathbf{V}\cdot\mathbf{m}] = i\mathbf{V}\cdot(\mathbf{n}\times\mathbf{m})$$

特别地：对$\delta\omega = \mathbf{e}_x\delta\theta$有

$$e^{-iL_x\delta\theta}V_x e^{iL_x\delta\theta} \approx V_x$$
$$e^{-iL_x\delta\theta}V_y e^{iL_x\delta\theta} \approx V_y + V_z\delta\theta$$
$$e^{-iL_x\delta\theta}V_z e^{iL_x\delta\theta} \approx V_z - V_y\delta\theta$$

从3×3的矩阵生成元出发$(\mathbf{I}_\alpha)_{\beta\gamma} = -i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$满足对易关系$\left[\mathbf{I}_\alpha, \mathbf{I}_\beta\right] = -i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathbf{I}_\gamma$，有

$$e^{-iL_x\delta\theta}\left[V_x, V_y, V_z\right]e^{iL_x\delta\theta} = \left[V_x, V_y, V_z\right]e^{-i\mathbf{I}_x\delta\theta}$$
$$e^{-iL_y\delta\theta}\left[V_x, V_y, V_z\right]e^{iL_y\delta\theta} = \left[V_x, V_y, V_z\right]e^{-i\mathbf{I}_y\delta\theta}$$
$$e^{-iL_z\delta\theta}\left[V_x, V_y, V_z\right]e^{iL_z\delta\theta} = \left[V_x, V_y, V_z\right]e^{-i\mathbf{I}_z\delta\theta}$$

因此，对有限转动

$$e^{-iL_x\theta}\left[V_x, V_y, V_z\right]e^{iL_x\theta} = \left[V_x, V_y, V_z\right]e^{-i\mathbf{I}_x\theta}$$
$$e^{-iL_y\theta}\left[V_x, V_y, V_z\right]e^{iL_y\theta} = \left[V_x, V_y, V_z\right]e^{-i\mathbf{I}_y\theta}$$
$$e^{-iL_z\theta}\left[V_x, V_y, V_z\right]e^{iL_z\theta} = \left[V_x, V_y, V_z\right]e^{-i\mathbf{I}_z\theta}$$

更一般的的转动

$$e^{-i\mathbf{L}\cdot\omega}\left[V_x, V_y, V_z\right]e^{i\mathbf{L}\cdot\omega} = \left[V_x, V_y, V_z\right]e^{-i\mathbf{I}\cdot\omega}$$

§5.5 自旋空间中的转动算符

一个在自旋空间中的正规转动ω将任意算符A转化为

$$e^{-i\mathbf{s}\cdot\omega}Ae^{i\mathbf{s}\cdot\omega}=\hat{\mathbf{g}}(\omega)A\hat{\mathbf{g}}^{-1}(\omega)$$

其中$\mathbf{s}$是自旋空间中的算符

$$\mathbf{s}=\begin{bmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{bmatrix}$$

，$\hat{\mathbf{g}}(\omega)=e^{-i\mathbf{s}\cdot\omega}$是描述轨道空间中转动$\omega$的算符。三个分量且满足

$$\left[s_\alpha,s_\beta\right]=i\sum_\gamma\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}s_\gamma$$

当一个算符有三个分量，

$$\mathbf{V}=\begin{bmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{bmatrix}$$

且满足关系

$$[s_\alpha,V_\beta]=i\sum_\gamma\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}V_\gamma,$$

则称算符$\mathbf{V}$ 为一个在自旋空间的算符矢量，

对于一个一般旋转$\boldsymbol{\omega}$，它作用在任意的矢量算符$\mathbf{V}$上为

$$\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\boldsymbol{\omega})\mathbf{V}\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}^{-1}(\boldsymbol{\omega})=\mathbf{g}^{-1}(\boldsymbol{\omega})\mathbf{V}\Leftrightarrow\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\boldsymbol{\omega})\begin{bmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{bmatrix}\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}^{-1}(\boldsymbol{\omega})=\mathbf{g}^{-1}(\boldsymbol{\omega})\begin{bmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{bmatrix}$$

$\mathbf{g}^{-1}(\boldsymbol{\omega})$是一个三乘三的转动矩阵作用在三维实矢量上，取矩阵的转置

$$\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\boldsymbol{\omega})\left[V_x,V_y,V_z\right]\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}^{-1}(\boldsymbol{\omega})=\left[V_x,V_y,V_z\right]\mathbf{g}(\boldsymbol{\omega})$$

(上面的左边表示的是，对每个算符都做转动操作，等于右边的矩阵运算)
与之前对单位矢量的转动操作对比：

$$\left[\mathbf{g}(\omega)\mathbf{e}_x,\mathbf{g}(\omega)\mathbf{e}_y,\mathbf{g}(\omega)\mathbf{e}_z\right]=\left[\mathbf{e}_x,\mathbf{e}_y,\mathbf{e}_z\right]\mathbf{g}(\omega)$$

对比发现，算符矢量$\left[V_x,V_y,V_z\right]$与$\left[\mathbf{e}_x,\mathbf{e}_y,\mathbf{e}_z\right]$服从相同的转换规则。

$$\left[V_x, V_y, V_z\right] \overset{\hat{\mathbf{g}}(\omega)}{\rightarrow} \left[V_x, V_y, V_z\right] \mathbf{g}\left(\omega\right)$$
$$\left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right] \overset{\mathbf{g}(\omega)}{\rightarrow} \left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right] \mathbf{g}\left(\omega\right)$$

例如，一个绕z轴转θ角

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right] = \left[\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\right]\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

或者

$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_x = \cos\theta\mathbf{e}_x - \sin\theta\mathbf{e}_y$$
$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_y = \sin\theta\mathbf{e}_x + \cos\theta\mathbf{e}_y$$
$$\mathbf{g}(\theta\mathbf{e}_z)\mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z$$

相应的，算符转动为

$$\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\omega)\left[V_x, V_y, V_z\right]\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}^{-1}(\omega) = \left[V_x, V_y, V_z\right]\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

显示的写出

$$\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\theta\mathbf{e}_z)V_x = \cos\theta V_x - \sin\theta V_y$$
$$\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\theta\mathbf{e}_z)V_y = \sin\theta V_x + \cos\theta V_y$$
$$\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\theta\mathbf{e}_z)V_z = V_z$$

可以重新写为：

$$\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\omega)\left(\mathbf{V}\cdot\mathbf{n}\right)\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}^{-1}(\omega) = \mathbf{V}\cdot[\mathbf{g}(\omega)\mathbf{n}]$$

其中对$\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}(\omega)\mathbf{V}\hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}^{-1}(\omega) = \hat{\mathbf{g}}_\mathrm{s}^{-1}(\omega)\mathbf{V}$两边都乘以单位矢量$\mathbf{n}$得到。

以上的讨论都是考虑的是正当转动，其转动矩阵的行列式为1。除了正当转动外，另外的对，算符的操作就是空间反演操作$\mathcal{I}$，空间反演是一个幺正算符

$$\mathcal{I}\mathbf{s}\mathcal{I}^{-1} = \mathbf{s}$$

如果一个矢量$\mathbf{V} = \left[V_x, V_y, V_z\right]^T$算符在空间反演操作下改变符号，则我们称这个矢量算符$\mathbf{V}$是极矢量算符，如果一个算符在空间反演下符号不改变，则称这个算符$\mathbf{V}$是一个轴矢量算符亦或者称为赝矢量算符。例如，如果算符如果$\mathbf{A} = [A_x, A_y, A_z]^T$，$\mathbf{B} = [B_x, B_y, B_z]^T$是极矢量算符，则$\mathbf{A}\times\mathbf{B}$是一个轴矢量算符。举个粒子就是$\mathbf{s}$是一个轴矢量算符。

自旋和轨道关于轴$\boldsymbol{\omega}$转动角度$|\boldsymbol{\omega}|$ 的联合操作将算符A变为

$$e^{-i\mathbf{J}\cdot\boldsymbol{\omega}}Ae^{i\mathbf{J}\cdot\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{g}_{\text{orb}}(\boldsymbol{\omega})\mathbf{g}_{\text{s}}(\boldsymbol{\omega})A\mathbf{g}_{\text{s}}^{-1}(\boldsymbol{\omega})\mathbf{g}_{\text{orb}}^{-1}(\boldsymbol{\omega}),$$

这里$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$。

§5.6 算符的转动操作

一个绕着z轴由轨道和自旋联合转动不变的哈密顿量

$$\mathbf{H} = v_x(k_x\sigma_x + k_y\sigma_y)$$

定义联合操作为：

$$\hat{g}(\omega) = \hat{g}_{\text{orb}}(\omega)\,\hat{g}_{\text{s}}(\omega)$$

那么有

$$\hat{g}_{\text{orb}}(\omega)\,\hat{g}_{\text{s}}(\omega)\,\hat{H}\hat{g}_{\text{s}}^{-1}(\omega)\,\hat{g}_{\text{orb}}^{-1}(\omega) = \hat{H}$$

对于绕z轴转动θ角度的转动：$\omega = \mathbf{e}_z\theta$

$$\hat{g}_{\text{s}}(\omega) = e^{-i\theta s_z} = e^{-i\theta\sigma_z/2}$$

$$e^{-i\theta\sigma_z/2}|A\rangle = e^{-i\theta/2}|A\rangle$$
$$e^{-i\theta\sigma_z/2}|B\rangle = e^{i\theta/2}|B\rangle$$

对于格林函数

$$\begin{aligned}\hat{g}_{\text{orb}}(\omega)\,\hat{g}_{\text{s}}(\omega)\,\hat{G}\hat{g}_{\text{s}}^{-1}(\omega)\,\hat{g}_{\text{orb}}^{-1}(\omega) &= \hat{g}_{\text{orb}}(\omega)\,\hat{g}_{\text{s}}(\omega)\,\frac{1}{z-H}\hat{g}_{\text{s}}^{-1}(\omega)\,\hat{g}_{\text{orb}}^{-1}(\omega)\\ &= \frac{1}{z-H}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{r}_1,\alpha|G|\mathbf{r}_2,\beta\rangle &= \langle\hat{g}(\mathbf{r}_1,\alpha)|\hat{g}G\hat{g}^{-1}|\hat{g}(\mathbf{r}_2,\beta)\rangle\\ &= \langle\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_1,\mathbf{g}_{\text{pse}}\alpha\right)|G|\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_2,\mathbf{g}_{\text{pse}}\beta\right)\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{r}_1,A|G|\mathbf{r}_2,A\rangle &= \langle\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_1,\mathbf{g}_{\text{pse}}A\right)|G|\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_2,\mathbf{g}_{\text{pse}}A\right)\rangle\\ &= \langle\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_1,A|G|\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_2,A\rangle\\ G_{AA}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) &= G_{AA}(\mathbf{g}_{\text{orb}}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2))\\ G_{AA}(\mathbf{r}) &= G_{AA}(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r})\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}_1, A|G|\mathbf{r}_2, B\rangle &= \langle\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_1, \mathbf{g}_{\text{pse}}A\right)|G|\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_2, \mathbf{g}_{\text{pse}}B\right)\rangle \\
&= e^{i\theta/2}\langle \mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_1, A|G|\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}_2, A\rangle \\
G_{AB}\left(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\right) &= e^{i\theta/2}G_{AB}\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\left(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\right)\right) \\
G_{AA}\left(\mathbf{r}\right) &= e^{i\theta/2}G_{AB}\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}\right) \\
e^{-i\theta_{\text{r}}/2}G_{AB}\left(\mathbf{r}\right) &= G_{AB}\left(\mathbf{g}_{\text{orb}}\mathbf{r}\right)
\end{aligned}
$$

and

$$
\boldsymbol{r}\left(\mathcal{R}_{\text{orb}}|\mathbf{r}\rangle\right) = \mathcal{R}_{\text{orb}}\left(\mathcal{R}_{\text{orb}}^{-1}\boldsymbol{r}\mathcal{R}_{\text{orb}}\right)|\mathbf{r}\rangle = \mathcal{R}_{\text{orb}}\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}\mathcal{R}_{\text{orb}}|\mathbf{r}\rangle
$$

$$
\mathcal{R}_{\text{orb}}\left(\mathcal{R}_{\text{orb}}^{-1}\boldsymbol{r}\mathcal{R}_{\text{orb}}\right)|\mathbf{r}\rangle = \mathcal{R}_{\text{orb}}\boldsymbol{R}_{\text{orb}}\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle = \boldsymbol{R}_{\text{orb}}\mathbf{r}\mathcal{R}_{\text{orb}}|\mathbf{r}\rangle
$$

$$
\mathcal{R}_{\text{orb}}|\mathbf{r}\rangle = |\boldsymbol{R}_{\text{orb}}\mathbf{r}\rangle
$$

第六章　哈密顿量的低能有效近似

§6.1　格林函数中转法

通常一个任意的哈密顿量满足分块形式：

$$H = \begin{bmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{bmatrix}$$

其中非对角的块阵满足

$$H_{BA} = H_{AB}^{\dagger}$$

根据格林函数定义$G = (E - H)^{-1}$，其满足同样的形式，但是$G_{AB} \neq G_{BA}$

$$G = \begin{bmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{bmatrix}$$

由格林函数的定义得到恒等式

$$[E - H]\,G = 1$$

即：

$$\begin{bmatrix} E - H_{AA} & -H_{AB} \\ -H_{BA} & E - H_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

该恒等式等价于四个算符方程

$$\begin{aligned} (E - H_{AA})\,G_{AA} - H_{AB}G_{BA} &= 1 \\ (E - H_{AA})\,G_{AB} - H_{AB}G_{BB} &= 0 \\ -H_{BA}G_{AA} + (E - H_{BB})\,G_{BA} &= 0 \\ -H_{BA}G_{AB} + (E - H_{BB})\,G_{BB} &= 1 \end{aligned} \tag{6.1}$$

将上述第三行方称改写为

$$\begin{aligned} (E - H_{BB})\,G_{BA} &= H_{BA}G_{AA} \\ G_{AA} &= H_{BA}^{-1}\,(E - H_{BB})\,G_{BA} \end{aligned}$$

对上述方程两边左乘H_{BA}^{-1}得到：

$$G_{BA} = (E - H_{BB})^{-1}\,H_{BA}G_{AA}$$

再将方程(6.1)改写为:

$$
\begin{aligned}
G_{AA} &= (E-H_{AA})^{-1} + (E-H_{AA})^{-1} H_{AB} G_{BA} \\
&= (E-H_{AA})^{-1} + (E-H_{AA})^{-1} H_{AB} (E-H_{BB})^{-1} H_{BA} G_{AA} \\
\left(1-(E-H_{AA})^{-1} H_{AB} (E-H_{BB})^{-1} H_{BA}\right) G_{AA} &= (E-H_{AA})^{-1} \\
G_{AA} &= \left(1-(E-H_{AA})^{-1} H_{AB} (E-H_{BB})^{-1} H_{BA}\right)^{-1} (E-H_{AA})^{-1} \\
&= \left[(E-H_{AA}) - H_{AB} (E-H_{BB})^{-1} H_{BA}\right]^{-1}
\end{aligned}
$$

于是得到格林函数：

$$
\begin{aligned}
G_{AA} &= \left[(E-H_{AA}) - H_{AB} (E-H_{BB})^{-1} H_{BA}\right]^{-1} \\
\left(E-H_{AA}^{\mathrm{eff}}\right)^{-1} &= \left[(E-H_{AA}) - H_{AB} (E-H_{BB})^{-1} H_{BA}\right]^{-1}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H_{AA}^{\mathrm{eff}} &= H_{AA} + H_{AB} (E-H_{BB})^{-1} H_{BA} \\
&= H_{AA} + \Sigma_{AA}
\end{aligned}
$$

定义自能为：

$$
\Sigma_{AA} = H_{AB} (E-H_{BB})^{-1} H_{BA}
$$

H_{AA}^{eff}有效哈密顿量则通过考虑H_{AA}能谱的大小：

$$
H_{AA} = \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix}
$$

那么上述的$E-H_{BB}$中的能量取值就固定为$E \approx 0$则：

$$
H_{AA}^{\mathrm{eff}} = H_{AA} - H_{AB} H_{BB}^{-1} H_{BA}
$$

§6.2 Schröinger方程法

根据Schröinger方程：

$$
H|\psi\rangle = E|\psi\rangle
$$

如果哈密顿量写为分块矩阵

$$
\begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_A\rangle \\ |\psi_B\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\psi_A\rangle \\ |\psi_B\rangle \end{pmatrix}
$$

满足两个耦合方程：

$$H_{AA}|\psi_A\rangle + H_{AB}|\psi_B\rangle = E|\psi_A\rangle \tag{6.2}$$

$$H_{BA}|\psi_A\rangle + H_{BB}|\psi_B\rangle = E|\psi_B\rangle \tag{6.3}$$

将6.3改写为：

$$(E - H_{BB})^{-1} H_{BA}|\psi_A\rangle = |\psi_B\rangle$$

然后再带入6.2得到：

$$H_{AA}|\psi_A\rangle + H_{AB} (E - H_{BB})^{-1} H_{BA}|\psi_A\rangle = E|\psi_A\rangle$$

于是得到耦合哈密顿量：

$$H_{AA}^{\text{eff}} = H_{AA} + H_{AB} (E - H_{BB})^{-1} H_{BA}$$

如果考虑的能量是在$E \approx 0$附近

$$H_{AA}^{\text{eff}} \approx H_{AA} - H_{AB} (H_{BB})^{-1} H_{BA}$$

第七章　二能级系统：

§7.1　自旋1/2

一个任意的2×2的矩阵为：

$$\mathbf{M}=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

按照$\sigma_0,\sigma_{x,y,z}$可以将该矩阵写为：

$$\begin{aligned}\mathbf{M}&=a\frac{\sigma_0+\sigma_z}{2}+d\frac{\sigma_0-\sigma_z}{2}+b\frac{\sigma_x+i\sigma_y}{2}+c\frac{\sigma_x-i\sigma_y}{2}\\&=\frac{a+d}{2}\sigma_0+\frac{b+c}{2}\sigma_x+i\frac{b-c}{2}\sigma_y+\frac{a-d}{2}\sigma_z\\&=\frac{1}{2}B_0\sigma_0+\frac{1}{2}B_x\sigma_x+\frac{1}{2}B_y\sigma_y+\frac{1}{2}B_z\sigma_z\end{aligned}$$

其中a,b,c,d可以为实数，也可以是复数。因此任意的一个2×2的矩阵都可以写为上述形式。

定义

$$B_0=a+d,B_x=b+c,B_y=i\left(b-c\right),B_z=a-d$$

而通常量子力学中哈密顿量具有厄密性，因此$B_{0,x,y,z}$都是实数，此外b，c互为复共轭。则哈密顿量可以写为

$$\begin{aligned}\mathbf{H}&=\frac{1}{2}B_0\sigma_0+\frac{1}{2}B_x\sigma_x+\frac{1}{2}B_y\sigma_y+\frac{1}{2}B_z\sigma_z\\&=\frac{1}{2}B_0\sigma_0+\frac{1}{2}\mathbf{B}_n\cdot\sigma\end{aligned}$$

其中三维矢量的$\mathbf{B}_n$

$$\mathbf{B}_n=B_x\mathbf{e}_x+B_y\mathbf{e}_y+B_z\mathbf{e}_z$$

长度为

$$B=\sqrt{B_x^2+B_y^2+B_z^2}$$

在球坐标下定义该矢量$\mathbf{B}_n\equiv B\mathbf{e}_n$的方位角$\varphi$，极角为$\theta$于是

$$\mathbf{e}_n=\cos\varphi\sin\theta\mathbf{e}_x+\sin\varphi\sin\theta\mathbf{e}_y+\cos\theta\mathbf{e}_z$$

其中

$$\begin{aligned}\cos\varphi\sin\theta&=\frac{B_x}{B}\\\sin\varphi\sin\theta&=\frac{B_y}{B}\\\cos\theta&=\frac{B_z}{B}\end{aligned}$$

此外，该哈密顿量的本征态总是可以假设一个二分量的旋量A，B为任意的复数，

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |A|e^{i\varphi_A} \\ |B|e^{i\varphi_B} \end{bmatrix} = e^{i\varphi_A} \begin{bmatrix} |A| \\ |B|e^{i(\varphi_B - \varphi_A)} \end{bmatrix}$$

其中

$$|A|^2 + |B|^2 = 1$$

因此总是可以另定义

$$|A| = \cos\frac{\theta}{2}$$
$$|B| = \sin\frac{\theta}{2}$$
$$\varphi = (\varphi_B - \varphi_A)$$

当$\mathbf{e}_n$沿着任意方向，此时本征值$B/2 + B_0/2$对应的本征态为

$$|+\rangle_n = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix} \tag{7.1}$$

本征值$-B/2 + B_0/2$对应的本征态：

$$|-\rangle_n = \sin\frac{\theta}{2}|+\rangle - \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle = \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix} \tag{7.2}$$

此外σ的期望值为：

$${}_n\langle+|\sigma_x|+\rangle_n = \cos\varphi\sin\theta = \frac{B_x}{B}$$
$${}_n\langle+|\sigma_y|+\rangle_n = \sin\varphi\sin\theta = \frac{B_y}{B}$$
$${}_n\langle+|\sigma_z|+\rangle_n = \cos\theta = \frac{B_z}{B}$$

表示沿着x, y, z正方向的磁场比上总的磁场的大小。同理，本征值为$-B/2 + B_0/2$时，σ的期望值为：

$${}_n\langle-|\sigma_x|-\rangle_n = -\cos\varphi\sin\theta = -\frac{B_x}{B}$$
$${}_n\langle-|\sigma_y|-\rangle_n = -\sin\varphi\sin\theta = -\frac{B_y}{B}$$
$${}_n\langle-|\sigma_z|-\rangle_n = -\cos\theta = -\frac{B_z}{B}$$

表示沿着x, y, z负方向的磁场比上总的磁场的大小。

上面讨论对任意的2×2矩阵都满足上。

当自旋角动量的z分量为$\hat{S}_z$时，其在自身表象下的矩阵表示为

$$\mathbf{S}_z = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

其本征值为$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$对应的本征矢分别为

$$|+\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}; |-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

考虑在极角为θ方位角为φ的单位矢量$\mathbf{e}_n$方向上的自旋分量，即自旋在该方向上的投影为$\hat{S}_n = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{e}_n$。其中

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{S}_x\mathbf{e}_x + \hat{S}_y\mathbf{e}_y + \hat{S}_z\mathbf{e}_z$$
$$\mathbf{e}_n = \cos\varphi\sin\theta\mathbf{e}_x + \sin\varphi\sin\theta\mathbf{e}_y + \cos\theta\mathbf{e}_z$$

$\mathbf{e}_n$为沿着任意方向的单位矢量。则相应的在均匀磁场$\mathbf{B}$沿着$\mathbf{e}_n$方向的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}$$

一般地，$\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\hat{\sigma}$，哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \frac{B}{2}\hat{\sigma} \cdot \mathbf{e}_n$$

因此，哈密顿量在基矢为$\{|+\rangle, |-\rangle\}$下的矩阵表示为

$$\mathbf{H} = \frac{B}{2}\sigma \cdot \mathbf{e}_n = \frac{B}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

1. 当$\mathbf{e}_n$沿着$\mathbf{e}_z$方向上时，即极角$\theta = 0$，方位角φ取任意值，此时哈密顿量。

$$\mathbf{H} = \frac{B}{2}\sigma \cdot \mathbf{e}_z = \frac{B}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

B即表示磁场的大小，而本征值的正符号表示磁场的方向。即$B/2$和$-B/2$对应的本征态为：

$$|+\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}; |-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

本征值为$B/2$时从方程（7.1）退化得到得结果为：

$$|+\rangle_z = |+\rangle + 0e^{i\varphi}|-\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

本征值为$-B/2$时，从方程（7.2）退化得到的波函数为：

$$|-\rangle_z = 0|+\rangle - e^{i\varphi}|-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ -e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$

注意，两个本征函数会出现一点小的区别，当$\varphi = \pm\pi$时，恢复为$|-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$。由哈密顿量得到得本征态与任意态退回到沿着$z$方向的态之间会相差一个全局相位因子。该相位因子并不会影响

这时候自旋在本征态下的期望值为

$$
\begin{aligned}
{}_z\langle+|S_x|+\rangle_z &= 0; {}_z\langle-|S_x|-\rangle_z = 0 \\
{}_z\langle+|S_y|+\rangle_z &= 0; {}_z\langle-|S_y|-\rangle_z = 0 \\
{}_z\langle+|S_z|+\rangle_z &= \frac{1}{2}; {}_z\langle-|S_z|-\rangle_z = -\frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

自旋期望值表示自旋沿着这些方向的投影，显然当，自旋沿着z轴时候，自旋不会在x，y方向上由分量。沿着z轴正方向和负方向的长度都是1/2，其中的符号区分自旋朝着正向还是负向。

2. 当$\mathbf{e}_n$沿着$\mathbf{e}_x$方向上时，并且：$\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0$

$$
\mathbf{H} = \frac{B}{2}\sigma \cdot \mathbf{e}_x = \frac{B}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}
$$

本征值$\frac{B}{2}$和$-\frac{B}{2}$对应的本征态为：

$$
\begin{aligned}
|+\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\
|-\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

本征值为$B/2$时从方程（7.1）退化得到得结果为：

$$
|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}
$$

本征值为$-B/2$时，从方程（7.2）退化得到的波函数为：

$$
|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}
$$

这时候自旋在沿着x轴正向的本征态的期望值为

$$
\begin{aligned}
{}_x\langle+|S_x|+\rangle_x &= \frac{1}{2}; {}_x\langle-|S_x|-\rangle_x = -\frac{1}{2} \\
{}_x\langle+|S_y|+\rangle_x &= 0; {}_x\langle-|S_y|-\rangle_x = 0 \\
{}_x\langle+|S_z|+\rangle_x &= 0; {}_x\langle-|S_z|-\rangle_x = 0
\end{aligned}
$$

3. 当$\mathbf{e}_n$沿着$\mathbf{e}_y$方向上时，$\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = \frac{\pi}{2}$

$$
\mathbf{H} = \frac{B}{2}\sigma \cdot \mathbf{e}_y = \frac{B}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}
$$

本征值$B/2$和$-B/2$对应的本征态为：

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$$
$$|-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}$$

本征值为$B/2$时从方程（7.1）退化得到得结果为：

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}i|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} \tag{7.3}$$

本征值为$-B/2$时，从方程（7.2）退化得到的波函数为：

$$|-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}i|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \tag{7.4}$$

这时候自旋在沿着y轴正向的本征态的期望值为

$$_y\langle+|S_x|+\rangle_y = 0;_y\langle-|S_x|-\rangle_y = 0$$
$$_y\langle+|S_y|+\rangle_y = \frac{1}{2};_y\langle-|S_y|-\rangle_y = -\frac{1}{2}$$
$$_y\langle+|S_z|+\rangle_y = 0;_y\langle-|S_z|-\rangle_y = 0$$

4. 当$\mathbf{e}_n$沿着$-\mathbf{e}_x$方向上时，$\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = \pi$

$$\mathbf{H} = -\frac{B}{2}\sigma \cdot \mathbf{e}_x = -\frac{B}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

本征值$\frac{B}{2}$和$-\frac{B}{2}$对应的本征态为：

$$|+\rangle_{-x} = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$
$$|-\rangle_{-x} = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

本征值为$B/2$时从方程（7.1）退化得到得结果为：

$$|+\rangle_{-x} = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

本征值为$-B/2$时，从方程（7.2）退化得到的波函数为：

$$|-\rangle_{-x}=\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$$

这时候自旋在沿着$-x$轴正向的本征态的期望值为

$$\begin{aligned}{}_{-x}\langle+|S_x|+\rangle_{-x}&=-\frac{1}{2};{}_{-x}\langle-|S_x|-\rangle_{-x}=\frac{1}{2}\\{}_{-x}\langle+|S_y|+\rangle_{-x}&=0;{}_{-x}\langle-|S_y|-\rangle_{-x}=0\\{}_{-x}\langle+|S_z|+\rangle_{-x}&=0;{}_{-x}\langle-|S_z|-\rangle_{-x}=0\end{aligned}$$

5. 当$\mathbf{e}_n$沿着任意方向，本征值$B/2$对应的本征态

$$|+\rangle_n=\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle+\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle=\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{bmatrix}$$

本征值$-B/2$对应的本征态：

$$|-\rangle_n=\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle-\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle=\begin{bmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\-\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{bmatrix}$$

这时候自旋在沿着n轴角度为(φ,θ)时候的本征态的期望值为

$$\begin{aligned}{}_n\langle+|S_x|+\rangle_n&=\frac{1}{2}\cos\varphi\sin\theta\\{}_n\langle+|S_y|+\rangle_n&=\frac{1}{2}\sin\varphi\sin\theta\\{}_n\langle+|S_z|+\rangle_n&=\frac{1}{2}\cos\theta\end{aligned}$$

**************************** 本征态 $|+\rangle_n$ 和 $|-\rangle_n$的推导 ********************************

$$\begin{pmatrix}\cos\theta-1&\sin\theta e^{-i\varphi}\\\sin\theta e^{i\varphi}&-\cos\theta-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}a(\cos\theta-1)+\sin\theta e^{-i\varphi}b&=0\\-\sin\frac{\theta}{2}a+\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}b&=0\end{aligned}$$

$$a=\cos\frac{\theta}{2},b=\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}$$

$$|+\rangle_n=\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle+\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle=\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{bmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos\theta+1 & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta+1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{gathered}
a(\cos\theta+1)+\sin\theta e^{-i\varphi}b=0 \\
2\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}a+2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}b=0 \\
\cos\frac{\theta}{2}a+\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}b=0 \\
a=-\sin\frac{\theta}{2}, b=\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \\
|-\rangle_n=\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle-\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle=\begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix}
\end{gathered}$$

总结，任意的二能级系统的哈密顿量都可以视作磁场下自旋1/2的问题：

$$\mathbf{H}=\frac{B}{2}\sigma\cdot\mathbf{e}_n=\frac{B}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

时，其对应的本征态为：

$$\begin{gathered}
|+\rangle_n=\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle+\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle=\begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix} \\
|-\rangle_n=\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle-\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle=\begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix}
\end{gathered}$$

自旋算符在任意一组基矢下的平均值为：

$$\begin{aligned}
{}_n\langle+|S_x|+\rangle_n &= \frac{1}{2}\cos\varphi\sin\theta \\
{}_n\langle+|S_y|+\rangle_n &= \frac{1}{2}\sin\varphi\sin\theta \\
{}_n\langle+|S_z|+\rangle_n &= \frac{1}{2}\cos\theta
\end{aligned}$$

对于本征值为正的Berry联络：

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_+(\mathbf{n}) &= i\left({}_n\langle+|\nabla_\mathbf{n}|+\rangle_n\right) \\
&= i\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \end{pmatrix}\nabla_\mathbf{n}\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix} \\
&= i\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}\nabla_\mathbf{n}\theta \\ \frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\nabla_\mathbf{n}\theta+i\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\nabla_\mathbf{n}\varphi \end{pmatrix} \\
&= -\sin^2\frac{\theta}{2}\nabla_\mathbf{n}\varphi
\end{aligned}$$

对于本征值为负的Berry联络：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}_{-}(\mathbf{n}) &= i\left({}_n\langle +|\nabla_{\mathbf{n}}|+\rangle_n\right) \\
&= i\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\end{pmatrix}\nabla_{\mathbf{n}}\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix} \\
&= i\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}\nabla_{\mathbf{n}}\theta \\ \frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\nabla_{\mathbf{n}}\theta - i\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\nabla_{\mathbf{n}}\varphi\end{pmatrix} \\
&= -\cos^2\frac{\theta}{2}\nabla_{\mathbf{n}}\varphi
\end{aligned}
$$

通常考虑在$\mathbf{k}$空间的哈密顿量为

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = B_0\sigma_0 + B_x(\mathbf{k})\sigma_x + B_y(\mathbf{k})\sigma_y + B_z(\mathbf{k})\sigma_z$$

其中$n_0\sigma_0$并不会修改本征态，$n_0\sigma_0$对哈密顿量本征函数的无贡献，于是上述哈密顿量改写为：

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = n_0\sigma_0 + |\mathbf{B}(\mathbf{k})|\mathbf{e}_n\cdot\sigma$$

其中$|\mathbf{B}(\mathbf{k})| = \sqrt{B_x(\mathbf{k})^2 + B_y(\mathbf{k})^2 + B_z(\mathbf{k})^2}$，$\mathbf{e}_n$为沿着方向

$$\mathbf{e}_n = \cos\varphi\sin\theta\mathbf{e}_x + \sin\varphi\sin\theta\mathbf{e}_y + \cos\theta\mathbf{e}_z$$

的单位矢量。

$$\sigma = \sigma_x\mathbf{e}_x + \sigma_y\mathbf{e}_y + \sigma_z\mathbf{e}_z$$

则$|\mathbf{B}(\mathbf{k})|\sigma$视作赝自旋矢量，赝自旋矢量在单位矢量$\mathbf{e}_n$上的投影为$\mathbf{e}_n\cdot|\mathbf{B}(\mathbf{k})|\sigma$

$$
\begin{aligned}
B_x(\mathbf{k}) &= |\mathbf{B}(\mathbf{k})|\cos\varphi\sin\theta \\
B_y(\mathbf{k}) &= |\mathbf{B}(\mathbf{k})|\sin\varphi\sin\theta \\
B_z(\mathbf{k}) &= |\mathbf{B}(\mathbf{k})|\cos\theta
\end{aligned}
$$

得到单位矢量$\mathbf{e}_n$的方位角，极角在$\mathbf{k}$空间中与动量$\mathbf{k}$的关系，即得到$\varphi(\mathbf{k}),\theta(\mathbf{k})$满足函数关系：

$$
\begin{aligned}
\sin\theta\cos\varphi &= \frac{B_x(\mathbf{k})}{|\mathbf{n}(\mathbf{k})|} \\
\sin\theta\sin\varphi &= \frac{B_y(\mathbf{k})}{|\mathbf{n}(\mathbf{k})|} \\
\cos\theta &= \frac{B_z(\mathbf{k})}{|\mathbf{n}(\mathbf{k})|}
\end{aligned}
$$

哈密顿量可以改写为

$$
\begin{aligned}
\mathbf{H} &= B_0\sigma_0 + \mathbf{B}(\mathbf{k})\cdot\sigma \\
&= B_0\sigma_0 + |\mathbf{B}(\mathbf{k})|\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

，$\mathbf{B}(\mathbf{k})$表示沿着方向为$\mathbf{e}_n$，大小为$|\mathbf{B}(\mathbf{k})|$的矢量。

$$\mathbf{B}(\mathbf{k}) = B_x(\mathbf{k})\,\mathbf{e}_x + B_y(\mathbf{k})\,\mathbf{e}_y + B_z(\mathbf{k})\,\mathbf{e}_z$$

该矢量表示的是赝自旋在单位矢量上投影的长度形成的矢量，或者也可以等价为赝自旋矢量。

于是得到本征值为

$$E = n_0 + \lambda|\mathbf{B}|$$

$\lambda = \pm 1$对应的本征函数为：

$$|u_+(\mathbf{k})\rangle = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$
$$|u_-(\mathbf{k})\rangle = \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$

按照波函数求自旋期望值得到的赝自旋分量为：

$$\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_x|u_+(\mathbf{k})\rangle = \cos\varphi\sin\theta$$
$$\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_y|u_+(\mathbf{k})\rangle = \sin\varphi\sin\theta$$
$$\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_z|u_+(\mathbf{k})\rangle = \cos\theta$$

而该赝自旋分量等价于矢量$\mathbf{B}(\mathbf{k})$的三个方向的分量比上模长：

$$\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_x|u_+(\mathbf{k})\rangle = \frac{B_x(\mathbf{k})}{|\mathbf{B}(\mathbf{k})|}$$
$$\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_y|u_+(\mathbf{k})\rangle = \frac{B_y(\mathbf{k})}{|\mathbf{B}(\mathbf{k})|}$$
$$\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_z|u_+(\mathbf{k})\rangle = \frac{B_z(\mathbf{k})}{|\mathbf{B}(\mathbf{k})|}$$

且任何一个2×2的矩阵都可以写为上面的形式。

举例子：

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(\mathbf{k}) &= v_0k\sigma_0 + v_xk_x\sigma_x + v_yk_y\sigma_y + v_zk_z\sigma_z \\ &= v_0k\sigma_0 + |\mathbf{B}(\mathbf{k})|\mathbf{e}_n\cdot\sigma\end{aligned}$$

其中$v_{0,x,y,z}$为常数，$|B(\mathbf{k})| = \sqrt{v_x^2k_x^2 + v_y^2k_y^2 + v_z^2k_z^2}$，$\mathbf{e}_n$为沿着$\mathbf{B}$方向的单位矢量。注意$\mathbf{B}$的方向与$\mathbf{k}$的方向通常不是同一个方向。

则相应的本征值为：

$$E_\pm(\mathbf{k}) = v_0k \pm |\mathbf{B}(\mathbf{k})|$$

相应的本征态为：

$$
|u_+(\mathbf{k})\rangle = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix}
$$
$$
|u_-(\mathbf{k})\rangle = \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{bmatrix}
$$

其中角度$\theta(\mathbf{k})$，$\varphi(\mathbf{k})$与$\mathbf{k}$的关系为：

$$
\sin\theta\sin\varphi = \frac{v_y k_y}{\sqrt{v_x^2k_x^2 + v_y^2k_y^2 + v_z^2k_z^2}}
$$
$$
\sin\theta\cos\varphi = \frac{v_x k_x}{\sqrt{v_x^2k_x^2 + v_y^2k_y^2 + v_z^2k_z^2}}
$$
$$
\cos\theta = \frac{v_z k_z}{\sqrt{v_x^2k_x^2 + v_y^2k_y^2 + v_z^2k_z^2}}
$$

本征值$E_+(\mathbf{k})$对应的赝自旋分量：

$$
\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_x|u_+(\mathbf{k})\rangle = \frac{v_x k_x}{\sqrt{v_x^2k_x^2 + v_y^2k_y^2 + v_z^2k_z^2}}
$$
$$
\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_y|u_+(\mathbf{k})\rangle = \frac{v_y k_y}{\sqrt{v_x^2k_x^2 + v_y^2k_y^2 + v_z^2k_z^2}}
$$
$$
\langle u_+(\mathbf{k})|\sigma_z|u_+(\mathbf{k})\rangle = \frac{v_z k_z}{\sqrt{v_x^2k_x^2 + v_y^2k_y^2 + v_z^2k_z^2}}
$$

而对于本征值为正的Berry联络：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}_+(\mathbf{k}) &= i\langle u_+(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}}|u_+(\mathbf{k})\rangle \\
&= i\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \nabla_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix} \\
&= i\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}\nabla_{\mathbf{k}}\theta \\ \frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\nabla_{\mathbf{k}}\theta + i\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\nabla_{\mathbf{k}}\varphi \end{pmatrix} \\
&= -\sin^2\frac{\theta}{2}\nabla_{\mathbf{k}}\varphi(\mathbf{k})
\end{aligned}
$$

对于本征值为负的Berry联络：

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_-(\mathbf{k}) &= i\langle u_+(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}}|u_+(\mathbf{k})\rangle \\
&= i\left(\sin\frac{\theta}{2} \quad -\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\right)\nabla_{\mathbf{k}}\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix} \\
&= i\left(\sin\frac{\theta}{2} \quad -\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\right)\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}\nabla_{\mathbf{k}}\theta\\ \frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\nabla_{\mathbf{k}}\theta - i\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\nabla_{\mathbf{k}}\varphi\end{pmatrix} \\
&= -\cos^2\frac{\theta}{2}\nabla_{\mathbf{k}}\varphi
\end{aligned}$$

计算Berry相只需要将Berry联络沿着闭合路径做积分

$$\gamma_+ = \oint_C d\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}_+(\mathbf{k}) = -\oint_C d\mathbf{k}\cdot\sin^2(\frac{\theta(\mathbf{k})}{2})\nabla_{\mathbf{k}}\varphi(\mathbf{k})$$

对于二维系统来说的话，赝自旋在动量空间中xy平面内上的投影转动的圈数可以定义为绕数

$$W_C = \oint_C \frac{d\mathbf{k}}{2\pi}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}\varphi(\mathbf{k}) = \oint_C \frac{d\varphi(\mathbf{k})}{2\pi}$$

任何一个2×2的矩阵都可以写为上面的形式。

通常$\mathbf{e}_z\times\mathbf{k}$的意思是$\mathbf{k}$绕$z$轴逆时针转$90°$

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_z\times\mathbf{k} &= \mathbf{e}_z\times\left(k_x\mathbf{e}_x + k_y\mathbf{e}_y\right) = \left(\mathbf{e}_z\times\mathbf{e}_x k_x + \mathbf{e}_z\times k_y\mathbf{e}_y\right) \\
&= -k_y\mathbf{e}_x + k_x\mathbf{e}_y = -k\sin\theta_{\mathbf{k}}\mathbf{e}_x + k\cos\theta_{\mathbf{k}}\mathbf{e}_y
\end{aligned}$$

自旋的期望值为

$$\begin{aligned}
\langle s_x\rangle &= \frac{2kv_F E_{\mu\nu}}{\left(E_{\mu\nu}^2 + k^2v_F^2\right)}\nu\sin\theta_{\mathbf{k}} \\
\langle s_y\rangle &= -\frac{2kv_F E_{\mu\nu}}{\left(E_{\mu\nu}^2 + k^2v_F^2\right)}\nu\cos\theta_{\mathbf{k}} \\
\langle s_z\rangle &= 0
\end{aligned}$$

当$\nu = -1$时，真实自旋的方向与$\mathbf{k}$是垂直的。

单$\nu = -1$时，真实自旋方向与$-\mathbf{k}$是垂直的，满足右手螺旋定则。

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_x\rangle &= \frac{2kv_F E_{\mu\nu}}{\left(E_{\mu\nu}^2 + k^2v_F^2\right)}\cos(\theta_{\mathbf{k}}) \\
\langle \sigma_y\rangle &= -\frac{2kv_F E_{\mu\nu}}{\left(E_{\mu\nu}^2 + k^2v_F^2\right)}\sin(\theta_{\mathbf{k}}) \\
\langle \sigma_z\rangle &= 0
\end{aligned}$$

对于赝自旋的织构图，当$\mathbf{k}$逆时针转动，赝自旋是沿着镜面方向转动。

§7.2 二能级系统—外界微扰

一个二能级体系的哈密顿量$\hat{H}_0$在本征值为ε_1和ε_2对应的基态为$|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$作为基矢时的矩阵表示为：

$$\mathbf{H}_0 = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{bmatrix}$$

现在考虑对系统做一外界微扰，或是考虑内部相互作用，使得哈密顿量算符变为：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

且本征方程为

$$\hat{H}|\psi_+\rangle = E_+|\psi_+\rangle$$
$$\hat{H}|\psi_-\rangle = E_-|\psi_-\rangle$$

其中$\hat{H}_0$叫做未经过微扰的哈密顿量，$\hat{H}_1$叫做微扰或者耦合哈密顿量，这里假定不随时间变化，在未微扰的态组成的基$\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$下表示为一个厄密矩阵：

$$\mathbf{H}_1 = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix}$$

其中$h_{11}, h_{12} \in \mathbb{R}$；$h_{12} = h_{21}^*$

考虑引入微扰$\hat{H}_1$后对原系统的两个能级和定态的修正。

耦合对体系的定态的影响

所讨论的$\hat{H}_1$是指系统内部的耦合（相互作用，或是全部相互作用中次要关心的一部分，或者是一些来自外界的微扰；一般而言这种耦合或者微扰可能相比于其他作用而言较弱，从而在近似的哈密顿量当中被忽略掉，但是将会看到，若采取更高阶的近似，那么哈密顿量$\hat{H}$中这种被忽略的耦合将会产生不可忽视的修正。静态方面，主要的影响是对忽略近似下的系统能级附加一个修正，即将ε_1，ε_2修正为E_+，E_-

在未微扰的态组成的基$\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$下，系统的总哈密顿量为：

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 + h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & \varepsilon_2 + h_{22} \end{bmatrix}$$

将其对角化得到：

$$E_+ = \frac{\varepsilon_1 + h_{11} + \varepsilon_2 + h_{22}}{2} + \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 + h_{11} - \varepsilon_2 - h_{22})^2 + 4|h_{12}|^2}}{2}$$
$$E_- = \frac{\varepsilon_1 + h_{11} + \varepsilon_2 + h_{22}}{2} - \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 + h_{11} - \varepsilon_2 - h_{22})^2 + 4|h_{12}|^2}}{2}$$

$$\mathbf{H} = h_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + h_1 \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

其中

$$\begin{aligned}
h_0 &= \frac{\varepsilon_1 + h_{11} + \varepsilon_2 + h_{22}}{2} \\
h_1 &= \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 + h_{11} - \varepsilon_2 - h_{22})^2 + 4|h_{12}|^2}}{2} \\
\cos\theta &= \frac{\varepsilon_1 + h_{11} - \varepsilon_2 - h_{22}}{\sqrt{(\varepsilon_1 + h_{11} - \varepsilon_2 - h_{22})^2 + 4|h_{12}|^2}} \\
\sin\theta &= \frac{2|h_{12}|}{\sqrt{(\varepsilon_1 + h_{11} - \varepsilon_2 - h_{22})^2 + 4|h_{12}|^2}} \\
\varphi &= \arg h_{21}
\end{aligned}$$

相应的本征矢为：$|\varphi_+\rangle, |\varphi_-\rangle$

$$\begin{aligned}
|\varphi_+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\varphi_2\rangle \\
|\varphi_-\rangle &= \sin\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle - \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\varphi_2\rangle
\end{aligned}$$

哈密顿量为：

$$\begin{aligned}
\mathbf{H} = E_+ &\begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
+ E_- &\begin{pmatrix} \sin^2\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ -\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \cos^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

当$\hat{H}_1$扰动趋于0，

$$\begin{aligned}
|\varphi_+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\varphi_2\rangle \\
|\varphi_-\rangle &= \sin\frac{\theta}{2}|\varphi_1\rangle - \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\varphi_2\rangle
\end{aligned}$$

注意，耦合带来的效应来至于$\hat{H}_1$的非对角元。如果耦合为零则$\hat{H}$的本征态不会改变，只是能级变为

$$E_+ = \varepsilon_1 + h_{11}$$

$$E_- = \varepsilon_2 + h_{22}$$

假如$\hat{H}_1$仅仅包含非对角元相：

$$\begin{aligned}
E_+ &= \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4|h_{12}|^2}}{2} \\
E_- &= \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4|h_{12}|^2}}{2}
\end{aligned}$$

记作

$$\varepsilon_0 = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2}$$
$$\Delta = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2}$$

两个能级的中点为ε_0，Δ表示的能级E_+与ε_0之间的距离为Δ。

则能谱改写为：

$$E_+ = \varepsilon_0 + \sqrt{\Delta^2 + |h_{12}|^2} \tag{7.5}$$
$$E_- = \varepsilon_0 - \sqrt{\Delta^2 + |h_{12}|^2} \tag{7.6}$$

则能级修正的意思为，在原来的能级的基础上，以两个能级均值ε_0为原点，分别调节两个能级由之前偏离原点的距离Δ增加到$\sqrt{\Delta^2 + |h_{12}|^2}$。或者等价的说，以前在只有z方向磁场下的能级劈裂值，由于增加了x, y方向的磁场，于是能级劈裂的越明显。

考虑不同的微扰强度对能级的影响。

对于能级修正的公式7.5中，ε_0的作用是将能级进行平移，之前的能级间距为$|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$，而修正后的能级间距为$|E_+ - E_-|$，通常$|E_+ - E_-| = 2\sqrt{\Delta^2 + |h_{12}|^2} > |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$，因此这里得出一个在很多领域都有的结论：内部的耦合使得系统的固有频率互相远离。

根据Δ和$|h_{12}|$的相对大小，可以将系统的耦合强度分为：强耦合$\Delta << |h_{12}|$和弱耦合$\Delta >> |h_{12}|$

在弱耦合区域$\Delta >> |h_{12}|$，能级可以展开为：

$$E_+ = \varepsilon_0 + \sqrt{\Delta^2 + |h_{12}|^2} = \varepsilon_0 + \Delta\sqrt{1 + \frac{|h_{12}|^2}{\Delta^2}} = \varepsilon_0 + \Delta(1 + \frac{1}{2}\frac{|h_{12}|^2}{\Delta^2} + \cdots)$$
$$E_- = \varepsilon_0 - \sqrt{\Delta^2 + |h_{12}|^2} = \varepsilon_0 - \Delta\sqrt{1 + \frac{|h_{12}|^2}{\Delta^2}} = \varepsilon_0 - \Delta(1 + \frac{1}{2}\frac{|h_{12}|^2}{\Delta^2} + \cdots)$$

通常，在弱耦合区域，能级的耦合通常带来的是对能级的二阶修正。即耦合对能级偏离的贡献较弱。

而当处于强耦合区域时，耦合对能级的扰动达到了一阶修正。

$$E_+ = \varepsilon_0 + |h_{12}|\sqrt{\frac{\Delta^2}{|h_{12}|^2} + 1} = \varepsilon_0 + |h_{12}|$$
$$E_- = \varepsilon_0 - |h_{12}|\sqrt{\frac{\Delta^2}{|h_{12}|^2} + 1} = \varepsilon_0 - |h_{12}$$

$$E_+ = \varepsilon_0 + |h_{12}|$$
$$E_- = \varepsilon_0 - |h_{12}|$$

此外对于简并能级，当$\Delta = 0$时，耦合对能级的修正作用为零阶修正。总之，耦合对于能量相近的能级修正非常明显，然而对于能级差较大的能级，则影响不甚明显，在二阶或者更高阶的近似中才能看见。

对波函数的修正：

当处于弱耦合区域时，即哈密顿量的非对角项要小于对角项$\theta \approx 0$

$$|\varphi_+\rangle = |\varphi_1\rangle + \frac{|h_{12}|}{2\Delta} e^{i\varphi} |\varphi_2\rangle$$
$$|\varphi_-\rangle = \frac{|h_{12}|}{2\Delta} |\varphi_1\rangle - e^{i\varphi} |\varphi_2\rangle$$

当处于强耦合区域时，即哈密顿量的非对角项要大于对角项$\theta \approx \pi/2$，则波函数为：

$$|\varphi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} |\varphi_2\rangle$$
$$|\varphi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} |\varphi_2\rangle$$

其中关于弱耦合$\theta \approx 0$的波函数修正的讨论：

$$\sin\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} = \frac{2|h_{12}|}{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4|h_{12}|^2}}$$

根据$\cos\frac{\theta}{2} \approx 1 - \frac{\theta^2}{8} \approx 1$得，

$$\frac{|h_{12}|}{\sqrt{\Delta^2 + |h_{12}|^2}} = 2\sin\frac{\theta}{2}$$

又因为$\frac{|h_{12}|}{\Delta} < 1$，$(\frac{|h_{12}|}{\Delta})^2 \approx 0$

$$\frac{|h_{12}|}{2\sqrt{\Delta^2 + |h_{12}|^2}} = \frac{|h_{12}|}{2\Delta\sqrt{1 + \left(\frac{|h_{12}|}{\Delta}\right)^2}} \approx \frac{|h_{12}|}{2\Delta}$$

因此：

$$\sin\frac{\theta}{2} \approx \frac{|h_{12}|}{2\Delta}$$

于是得到

$$|\varphi_+\rangle = |\varphi_1\rangle + \frac{|h_{12}|}{2\Delta} e^{i\varphi} |\varphi_2\rangle$$
$$|\varphi_-\rangle = \frac{|h_{12}|}{2\Delta} |\varphi_1\rangle - e^{i\varphi} |\varphi_2\rangle$$

对于二能级的耦合：

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & h_{12} \\ h_{21} & 0 \end{bmatrix}$$

其中能级ε_1的波函数为$|\varphi_1\rangle$，能级ε_2的波函数为$|\varphi_2\rangle$。

如果当能级简并时即$\varepsilon_1 = \varepsilon_2$，描述能级$\varepsilon_1$，$\varepsilon_2$的波函数为$|\varphi_1\rangle$，$|\varphi_2\rangle$的线性组合

$$|\psi_1\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle$$
$$|\psi_2\rangle = c_1|\varphi_1\rangle - c_2|\varphi_2\rangle$$

此时的微扰$h_{12} = h_{21}^*$对能级的耦合非常的强，因此当能级简并的时候，耦合之后的波函数为

$$|\varphi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}|\varphi_2\rangle$$
$$|\varphi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}|\varphi_2\rangle$$

此时原始的哈密顿量为：

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h_0 & 0 \\ 0 & h_0 \end{bmatrix} + h_1 \begin{bmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{bmatrix}$$

其中

$$\begin{aligned} h_0 &= \varepsilon_1 \\ h_1 &= |h_{21}| \\ \cos\theta &= 0 \\ \sin\theta &= 1 \\ \varphi &= \arg h_{21} \end{aligned}$$

上面的二能级微扰修正可以等效的用自旋1/2在磁场中的语言来描述。

$$\mathbf{H} = B_0\sigma_0 + \frac{1}{2}\mathbf{B}_{xy}\cdot\sigma$$

$$B_0 = h_0 = \varepsilon_1$$
$$\frac{1}{2}|\mathbf{B}_{xy}| = h_1 = |h_{21}|$$

首先是在无微扰的情况下，原本存在的两个兼并能级可以理解为在z轴的磁场大小为零，自旋在磁场中的零能点恰好是h_0。当加上非对角项的微扰矩阵元h_{12}后，表示此时系统加上了xy平面内的磁场$|\mathbf{B}_{xy}|$，当然，自旋1/2在磁场下会发生能级劈裂。

$$E = B_0 \pm \frac{1}{2}|\mathbf{B}_{xy}|$$

此时能级劈裂的间隙为$|\mathbf{B}_{xy}|$，也就是说这时系统的一丁点微扰都能够使得能级劈裂。能级劈裂的大小与所加的磁场有关。

如果系统之前不是兼并的时候。当

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{12} \end{bmatrix}$$

总是可以将上面的哈密顿量改造为

$$\mathbf{H} = B_0\sigma_0 + \frac{1}{2}\mathbf{B}\cdot\sigma$$

其微扰的含义为，原本存在两个分离能级ε_1，和ε_2，当给施加一个任意方向的磁场后，两能级的能量零点为B_0。z方向施加的磁场，使得能级互相排斥，而xy平面内的磁场的作用让这个能级排斥的效果更加显著。

第八章　附录

狄拉克delta函数

1维的delta函数$\delta(x)$通过极限的定义为

$$\delta(x)=\begin{cases}0; & x\neq 0\\ \infty; & x=0\end{cases}$$

对于一个良好定义的函数$f(x)$，当一组积分限满足$a<0<b$

$$\int_a^b dx f(x)\,\delta(x)=f(0)$$

一些函数在极限形式下就可以视作δ函数。

$$\delta(x)=\begin{cases}\lim\limits_{\varepsilon\to 0^+}\frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}; & \text{Lorentzian}\\ \lim\limits_{\sigma\to 0^+}\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}; & \text{Gaussian}\\ \lim\limits_{\varepsilon\to 0^+}\frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}; & \text{Dirichlet}\\ \lim\limits_{L\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int_{-|L|}^{|L|}e^{ikx}; & \text{Fourier}\end{cases}$$

关于格林函数的Dyson展开的公式：

$$\begin{aligned}\hat{G}(z)&=\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)+\cdots\\&=\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}(\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)+\cdots)\\&=\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}(z)\end{aligned}$$

或者

$$\begin{aligned}\hat{G}(z)&=\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)+\cdots\\&=\hat{G}_0(z)+(\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)+\cdots)\hat{V}\hat{G}_0(z)\\&=\hat{G}_0(z)+\hat{G}(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\end{aligned}$$

亦或者

$$\begin{aligned}\hat{G}(z)&=\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)+\cdots\\&=\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)(\hat{V}+\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}+\cdots)\hat{G}_0(z)\\&=\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{T}(z)\,\hat{G}_0(z)\end{aligned}$$

其中$\hat{T}(z)$称之为T矩阵

$$\begin{aligned}\hat{T}(z) &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\cdots \\ &= \hat{V} + \hat{V}(\hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z) + \cdots)\hat{V} \\ &= \hat{V} + \hat{V}G(z)\hat{V}\end{aligned}$$

或者

$$\begin{aligned}\hat{T}(z) &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\cdots \\ &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)(\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V} + \cdots) \\ &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{T}(z)\end{aligned}$$

或者写为：

$$\begin{aligned}\hat{T}(z) &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V} + \cdots \\ &= \hat{V} + (\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{V} + \cdots)\hat{G}_0(z)\hat{V} \\ &= \hat{V} + \hat{T}(z)\,\hat{G}_0(z)\hat{V}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}G(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) &= \langle\mathbf{x}_1|\hat{G}(z)|\mathbf{x}_2\rangle = \langle\mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}(z)|\mathbf{x}_2\rangle \\ &= \langle\mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}_2\rangle + \langle\mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z)\hat{T}(z)\,\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}_2\rangle \\ &= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + \int\int d\mathbf{x}''d\mathbf{x}'\langle\mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\hat{T}(z)\,|\mathbf{x}''\rangle\langle\mathbf{x}''|\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}_2\rangle \\ &= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + \int\int d\mathbf{x}''d\mathbf{x}'\langle\mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}'\rangle[V\delta(\mathbf{x}')\delta\,(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'') + \cdots]\langle\mathbf{x}''|\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}_2\rangle \\ &= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{0})\,[V + VG_0(z,\mathbf{0},\mathbf{0})V + \cdots]\,G_0(z,\mathbf{0},\mathbf{x}_2) \\ &= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{0})\,[1 + VG_0(z,\mathbf{0},\mathbf{0}) + \cdots]\,VG_0(z,\mathbf{0},\mathbf{x}_2) \\ &= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{0})([1 - VG_0(z,\mathbf{0},\mathbf{0})]^{-1})VG_0(z,\mathbf{0},\mathbf{x}_2) \\ &= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{0})T(z)\,G_0(z,\mathbf{0},\mathbf{x}_2)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
G(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) &= \langle \mathbf{x}_1|\hat{G}(z)|\mathbf{x}_2\rangle = \langle \mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}(z)|\mathbf{x}_2\rangle \\
&= \langle \mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}_2\rangle + \langle \mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}(z)|\mathbf{x}_2\rangle \\
&= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + \int\int d\mathbf{x}''d\mathbf{x}'\langle \mathbf{x}_1|\hat{G}_0(z)|\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\hat{V}|\mathbf{x}''\rangle\langle \mathbf{x}''|\hat{G}(z)|\mathbf{x}_2\rangle \\
&= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + \int\int d\mathbf{x}''d\mathbf{x}'G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|\hat{V}|\mathbf{x}''\rangle G(z,\mathbf{x}'',\mathbf{x}_2) \\
&= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + \int\int d\mathbf{x}''d\mathbf{x}'G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}')V\delta(\mathbf{x}')\delta(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')G(z,\mathbf{x}'',\mathbf{x}_2) \\
&= G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2) + G_0(z,\mathbf{x}_1,\mathbf{0})VG(z,\mathbf{0},\mathbf{x}_2)
\end{aligned}
$$

*******************for spin-1/2***************

Summarize: basic operators for an electron: $\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{s}$. The Hamiltonian $H=H(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{s})$.

Composite operator: $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$, $\mathbf{v}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{s})=-i[\mathbf{r},H]$.

Time reversal $\hat{\mathcal{T}}$ is antiunitary:

(1) $\hat{\mathcal{T}}\sum_n\lambda_n|\psi_n\rangle=\sum_n\lambda_n^*\hat{\mathcal{T}}|\psi_n\rangle$;

(2) $\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle=\langle\varphi|\psi\rangle^*$

For convenience, we can define

$$\hat{\mathcal{T}}(\langle\varphi|\psi\rangle)\equiv\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle=\langle\varphi|\psi\rangle^*.$$

$\hat{\mathcal{T}}^{-1}$ is an anti-unitary operator satisfying $\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}=1\Leftrightarrow\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}=1$.

$$\hat{\mathcal{T}}^2=-1,$$

$(\hat{\mathcal{T}}^{-1})^2=-\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\mathcal{T}}^2\hat{\mathcal{T}}^{-1}=-1$.

$\hat{\mathcal{T}}$ obeys

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathcal{T}}\mathbf{r}\hat{\mathcal{T}}^{-1}&=\mathbf{r},\\
\hat{\mathcal{T}}\mathbf{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1}&=-\mathbf{p},\\
\hat{\mathcal{T}}\mathbf{s}\hat{\mathcal{T}}^{-1}&=-\mathbf{s}.
\end{aligned}
$$

Position eigenstates: $|\mathbf{x}\rangle$ is defined by

$$\mathbf{r}|\mathbf{x}\rangle=\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle$$

and form an ortho-normal complete basis in the orbital space:

$$
\begin{aligned}
\int d\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|&=1,\\
\langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle&=\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}').
\end{aligned}
$$

Momentum eigenstates: $|\mathbf{k}\rangle$ is defined by

$$\mathbf{p}|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle.$$

Box normalization $V = L^3$: $\mathbf{k} = (2\pi n_1/L)\mathbf{e}_x + (2\pi n_2/L)\mathbf{e}_y + (2\pi n_3/L)\mathbf{e}_z$, the volume of each cube is $(2\pi/L)^3 = (2\pi)^3/V$.

$$\sum_{\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi/L)^3}\int d\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}.$$

They form an ortho-normal complete basis in the orbital space:

$$\sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = 1,$$

$$\langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}.$$

The inner product:

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \Leftrightarrow \langle\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

The effect of time reversal on orbital states:

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle,$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle = |-\mathbf{k}\rangle.$$

Eigenstates of s_z: $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ are defined by

$$s_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle,$$

$$s_z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle.$$

Effect of time reversal on spin states:

$$\hat{\mathcal{T}}|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle,$$

$$\hat{\mathcal{T}}|\downarrow\rangle = -|\uparrow\rangle.$$

The eigenstatse of $s_x = \sigma_x/2$ are

$$|+\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}},$$

$$|-\rangle = \frac{|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}.$$

$$\hat{\mathcal{T}}|+\rangle = -|-\rangle,$$

$$\hat{\mathcal{T}}|-\rangle = |+\rangle.$$

The action of time reversal on $|\psi\rangle\langle\varphi|$ is

$$\hat{\mathcal{T}}(|\psi\rangle\langle\varphi|)\hat{\mathcal{T}}^{-1} = |\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|.$$

The action of time reversal on $\langle\varphi|\psi\rangle$ is

$$\hat{\mathcal{T}}(\langle\varphi|\psi\rangle) \equiv \langle\hat{\mathcal{T}}\varphi|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*.$$

In the coordinate representation, we have $\mathbf{p} = -i\partial_{\mathbf{x}}$, $\mathbf{r} = \mathbf{x}$, and under the basis $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, we have $s_\alpha = \sigma_\alpha/2$ $(\alpha = x, y, z)$. The formula

$$\hat{\mathcal{T}} = i\sigma_y K \Rightarrow \hat{\mathcal{T}}^{-1} = -i\sigma_y K.$$

where K takes the complex conjugate. Check:

$$(\hat{\mathcal{T}}\mathbf{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1})(\cdots) = (i\sigma_y)\mathbf{p}^*(i\sigma_y^*)(\cdots) = -\mathbf{p}(\cdots).$$

****

Exercise: time reversal of orbital angular momentu: $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{T}}\mathbf{L}\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \hat{\mathcal{T}}\mathbf{r} \times \mathbf{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\mathcal{T}}\mathbf{r}\hat{\mathcal{T}}^{-1} \times \hat{\mathcal{T}}\mathbf{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1} \\ &= \mathbf{r} \times (-\mathbf{p}) = -\mathbf{L}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{J} &= \mathbf{L} + \mathbf{s}, \\ \hat{\mathcal{T}}\mathbf{J}\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= -\mathbf{J}.\end{aligned}$$

Spinless particle:

$$\hat{\mathcal{T}}\psi(\mathbf{x}) = \hat{\mathcal{T}}\langle\mathbf{x}|\psi\rangle = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle^* = \langle\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle.$$

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &\to \psi(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle, \\ |\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle &\to \langle\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle = \langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle^* = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle^* = \psi^*(\mathbf{x}).\end{aligned}$$

Spin-1/2 particle:

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{x}|\psi\rangle &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}|\chi\rangle, \\ \langle\mathbf{x}, \uparrow|\psi\rangle &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\langle\uparrow|\chi\rangle,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}, \uparrow\rangle &= |\mathbf{x}, \downarrow\rangle, \\ \hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}, \downarrow\rangle &= -|\mathbf{x}, \uparrow\rangle.\end{aligned}$$

$$\psi_\uparrow(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x}, \uparrow |\psi\rangle,$$
$$\psi_\downarrow(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x}, \downarrow |\psi\rangle,$$

$$\langle \mathbf{x},\uparrow|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle = \langle \hat{\mathcal{T}}(\mathbf{x},\uparrow)|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle^* = -\langle \mathbf{x},\downarrow|\psi\rangle^* = -\psi_\downarrow^*(\mathbf{x}),$$
$$\langle \mathbf{x},\downarrow|\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle = \langle \hat{\mathcal{T}}(\mathbf{x},\downarrow)|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}\psi\rangle^* = \langle \mathbf{x},\uparrow|\psi\rangle^* = \psi_\uparrow^*(\mathbf{x}),$$

****

Graphene: $\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{R},\tau\rangle = |\mathbf{R},\tau\rangle$.

$$\sigma_x = e^{i\pi/6}|\mathbf{K},A\rangle\langle\mathbf{K},B| + |\mathbf{K},B\rangle\langle\mathbf{K},A|.$$

****

From $\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle$ and

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}\left(\int d\mathbf{x}\,|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\right) = \int d\mathbf{x}\,\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|,$$

we have

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{T}}\mathbf{r}\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \hat{\mathcal{T}}\left[\int d\mathbf{x}\,\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\right]\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \int d\mathbf{x}\,\mathbf{x}\,(\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\hat{\mathcal{T}}^{-1})\\
&= \int d\mathbf{x}\,\mathbf{x}\,|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{x}| = \mathbf{r}.\\
\hat{\mathcal{T}}\mathbf{p}\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \hat{\mathcal{T}}\left[\int d\mathbf{k}\,\mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\right]\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \int d\mathbf{k}\,\mathbf{k}\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\hat{\mathcal{T}}^{-1}\\
&= \int d\mathbf{k}\,\mathbf{k}|\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k}\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\mathbf{k}| = \int d\mathbf{k}\,\mathbf{k}|-\mathbf{k}\rangle\langle-\mathbf{k}| = -\mathbf{p}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
s_x &= \frac{1}{2}\sum_{\mu\nu=\uparrow,\downarrow}|\mu\rangle\langle\nu|(\sigma_x)_{\mu\nu} = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|,\\
s_z &= \frac{1}{2}\sum_{\mu\nu=\uparrow,\downarrow}|\mu\rangle\langle\nu|(\sigma_z)_{\mu\nu} = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|,\\
s_y &= \frac{1}{2}\sum_{\mu\nu=\uparrow,\downarrow}|\mu\rangle\langle\nu|(\sigma_y)_{\mu\nu} = \frac{-i}{2}|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{i}{2}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{T}}s_x\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \frac{1}{2}|\hat{\mathcal{T}}\uparrow\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\downarrow| + \frac{1}{2}|\hat{\mathcal{T}}\downarrow\rangle\langle\hat{\mathcal{T}}\uparrow|\\
&= -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\uparrow| - \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\downarrow| = -s_x.
\end{aligned}$$

一个任意的算符都可以表示为

$$\begin{aligned}
A &= [A]_R + i[A]_I\\
[A]_R &\equiv \frac{A + A^\dagger}{2}\\
[A]_I &\equiv \frac{A - A^\dagger}{2i}
\end{aligned}$$