чением: спектры энергии в состояниях 0^+ и 0^- могут быть различны.

Эффект Зеемана. Рассмотрим теперь атомную систему в постоянном магнитном поле $\mathscr{H}$, направленном по оси z. При отражениях в плоскости, параллельной этой оси, $\mathscr{H}$ меняет знак. С другой стороны, $\mathscr{H}$ инвариантно относительно отражения $\mathscr{P}_0$ в начале координат. Группой инвариантности внешнего поля является группа, порождаемая трансляциями, вращениями вокруг оси Oz и отражениями $\mathscr{P}_0$. Как и в случае эффекта Штарка, будем рассматривать только симметрии гамильтониана H относительных переменных. Этот оператор H инвариантен относительно вращений вокруг оси Oz и отражений в начале координат. Пусть S_0 — оператор четности, фаза которого фиксирована таким образом, что $S_0^2 = 1$. Все преобразования группы описываются как функции наблюдаемых J_z и S_0, а эти две наблюдаемые коммутируют

$$S_0 J_z S_0 = J_z.$$

Следовательно, инвариантность H при преобразованиях группы не приводит к систематическому вырождению [1]).

Операторы H, S_0 и J_z можно одновременно диагонализовать, и каждый общий собственный вектор этих трех наблюдаемых является стационарным состоянием, инвариантным относительно преобразований группы. Этот результат основывается исключительно на свойствах симметрии H и не зависит ни от деталей, ни от силы взаимодействия системы с магнитным полем.

Раздел IV. ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ И ПРИНЦИП МИКРООБРАТИМОСТИ

§ 15. Сдвиги во времени и сохранение энергии

Среди всех преобразований, затрагивающих время, простейшими являются временные сдвиги. В классической механике инвариантность уравнений движения относительно временных сдвигов приводит к хорошо известному закону сохранения энергии (это требует независимости от времени функции Гамильтона). Мы получим аналогичное свойство в квантовой механике.

Пусть $|\psi(t)\rangle$ — возможное решение уравнений движения. Инвариантность уравнений движения системы относительно временного сдвига τ эквивалентна наличию другого решения $|\psi'(t)\rangle$, описывающего в момент времени t то динамическое со-

---

[1]) Иными словами, все неприводимые представления группы обязательно одномерны.

стояние, которое в момент времени $t+\tau$ описывалось исходным решением, т. е.

$$|\psi'(t)\rangle = e^{i\alpha(t,\tau)}|\psi(t+\tau)\rangle.$$

Для того чтобы каждое решение уравнений движения обладало таким свойством, необходимо, чтобы оператор U удовлетворял равенству

$$U(t, 0) = e^{i\alpha(t,\tau)}U(t+\tau, \tau), \tag{64}$$

где $\alpha(t, \tau)$ является фазой, которая может зависеть от t и τ. Для бесконечно малого t, положив $f(\tau) = \partial\alpha/\partial t|_{t=0}$, имеем

$$1 - \frac{i}{\hbar}H(0)\,dt = (1 + if(\tau)\,dt)\left(1 - \frac{i}{\hbar}H(\tau)\,dt\right),$$

т. е.

$$H(\tau) = H(0) + \hbar f(\tau). \tag{65}$$

Если закон движения инвариантен относительно произвольных временных сдвигов, то (64) должно выполняться для всех τ. Иными словами, гамильтониан постоянен с точностью до добавления (вещественной) функции времени. В действительности, эту функцию можно положить равной нулю без изменения каких-либо физических свойств системы. Замена гамильтониана $H(t)$ его значением в момент времени $t=0$ сказывается лишь в домножении $U(t, t_0)$ на фазовый множитель $\left[i\int_0^t f(t')\,dt'\right]$ (задача 6).

Итак, мы можем предполагать независимость гамильтониана от времени при инвариантности уравнений движения относительно временных сдвигов. Это предположение будет использоваться во всех приводимых ниже рассмотрениях. В этом случае уравнение (64) сводится к инвариантности $U(t, t_0)$ при временных сдвигах

$$U(t+\tau, \tau) = U(t, 0). \tag{66}$$

§ 16. Обращение времени в классической и квантовой механиках

В оставшейся части этого раздела мы будем рассматривать только консервативные системы. Законы движения таких систем часто оказываются инвариантными не только относительно временных сдвигов, но и относительно обращения времени. Эта инвариантность встречается также и в классической механике.

Лагранжева функция $L_{cl}(\dot{q}, q)$ классической механики является полиномом второго порядка по скоростям. Для многих

систем функция Лагранжа не содержит членов первого порядка, и мы имеем

$$L_{cl}(\dot{q}, q) = L_{cl}(-\dot{q}, q).$$

Системы, состоящие из изолированных частиц, всегда обладают этим свойством симметрии. Введение статического внешнего поля не всегда приводит к нарушению свойства симметрии. Оно сохраняется, например, в чисто электрическом поле. С другой стороны, в магнитном поле взаимодействие линейно по скоростям и, следовательно, нарушает это свойство. Если же указанное свойство симметрии имеется, то импульсы p являются линейными однородными функциями скоростей, а функция Гамильтона инварианта относительно обращения времени.

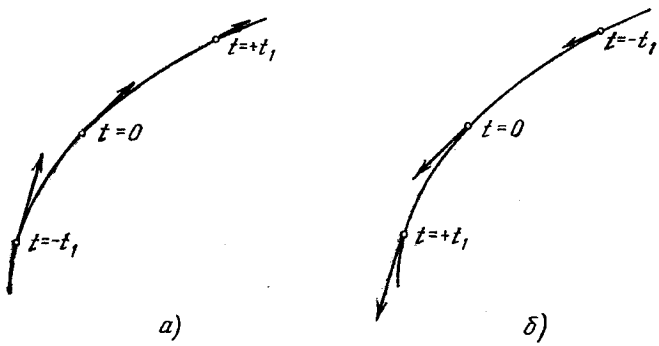

Рис. 7. Изображение двух классических траекторий (*а*) и (*б*), связанных отражением времени $\boldsymbol{r}_a(t) = \boldsymbol{r}_б(-t)$, $\dot{\boldsymbol{r}}_a(t) = -\dot{\boldsymbol{r}}_б(-t)$.

Для того чтобы обсуждение стало менее формальным, рассмотрим следствия такой симметрии на простом примере частицы в статическом потенциале. Тогда имеем

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) \equiv \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) = H(-\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}). \tag{67}$$

Отсюда следует, что все решения $\boldsymbol{r}(t)$ уравнений движения обратимы во времени: функция $\boldsymbol{r}_{\text{rev}}(t)$, которая определяется равенством

$$\boldsymbol{r}_{\text{rev}}(t) = \boldsymbol{r}(-t) \tag{68}$$

также является решением уравнений движения. Соответствие между двумя решениями представлено на рис. 7.

Положение частицы в момент времени t в одном из решений совпадает с положением частицы в момент времени $-t$ в другом; ее скорость в момент t в одном из решений противоположна

по направлению скорости в момент времени $-t$ в другом решении. Соответствие между импульсами то же, что и между скоростями

$$\boldsymbol{p}_{\text{rev}}(t) = -\boldsymbol{p}(-t). \tag{69}$$

Рассмотрим теперь аналогичную квантовую систему. Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\boldsymbol{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}, t). \tag{70}$$

Гамильтониан является вещественным оператором. Если изменить t на $-t$ и взять комплексное сопряжение от обеих частей уравнения, то получим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\boldsymbol{r}, -t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right]\psi^*(\boldsymbol{r}, -t). \tag{71}$$

Иными словами, если $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ — решение уравнения Шредингера, то функция

$$\psi_{\text{rev}}(\boldsymbol{r}, t) \equiv \psi^*(\boldsymbol{r}, -t) \tag{72}$$

также является его решением.

Соответствие между ψ и ψ_{rev} на удивление аналогично соответствию между двумя классическими решениями, рассмотренному выше (уравнения (68)—(69)). Обозначив $P(\boldsymbol{r}, t)$ и $\Pi(\boldsymbol{p}, t)$ плотности вероятности для координаты и импульса в момент времени t, имеем

$$P_{\text{rev}}(\boldsymbol{r}, t) = P(\boldsymbol{r}, -t), \tag{68'}$$

$$\Pi_{\text{rev}}(\boldsymbol{p}, t) = \Pi(-\boldsymbol{p}, -t). \tag{69'}$$

§ 17. Обращение времени. Частица нулевого спина

Как видно из приведенного примера, обратимость во времени решений уравнения Шредингера связана с инвариантностью гамильтониана $H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})$ при замене $\boldsymbol{p}$ на $-\boldsymbol{p}$. Эта инвариантность означает, что $H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})$ описывается в волновой механике вещественным дифференциальным оператором. Мы приходим, таким образом, к определению преобразования динамических переменных и динамических состояний, которое будем называть *обращением времени* и при котором $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ переходят в $\boldsymbol{r}$ и $-\boldsymbol{p}$ соответственно. Обозначим K оператор, реализующий это преобразование, а само преобразование обозначим $\mathscr{K}$. По определению

$$K\boldsymbol{r}K^{\dagger} = \boldsymbol{r}, \quad K\boldsymbol{p}K^{\dagger} = -\boldsymbol{p}. \tag{73}$$

Это преобразование меняет знак коммутационных соотношений и, следовательно, K является *антиунитарным оператором*

(см. § 6). Соотношения (73) определяют этот оператор с точностью до фазового множителя. Обозначим K_0 оператор комплексного сопряжения в представлении волновой механики (антиунитарный оператор такого типа определен в § 5). Поскольку в рассматриваемом представлении матрицы, описывающие $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$, являются вещественной и чисто мнимой соответственно, то K_0, очевидно, удовлетворяет соотношениям (73). Следовательно, мы можем взять K_0 в качестве оператора обращения времени

$$K = K_0.$$

При таком выборе фазы действие K на волновую функцию сводится к комплексному сопряжению

$$K\Phi(\boldsymbol{r}) = \Phi^*(\boldsymbol{r}).$$

Предположение об инвариантности H относительно замены $-\boldsymbol{p}$ на $\boldsymbol{p}$ эквивалентно условию

$$[K, H] = 0. \tag{74}$$

Применив (антиунитарный) оператор K к обеим частям уравнения Шредингера, получаем

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K\,|\psi(t)\rangle = HK\,|\psi(t)\rangle,$$

т.е.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(K\,|\psi(-t)\rangle) = H(K\,|\psi(-t)\rangle).$$

Итак, если $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера, то ему удовлетворяет и вектор

$$|\psi(t)\rangle_{\text{rev}} \equiv K\,|\psi(-t)\rangle. \tag{75}$$

Динамическое состояние, описываемое вектором $|\psi\rangle_{\text{rev}}$ в момент времени t, является при обращении времени образом состояния, соответствующего вектору $|\psi\rangle$ в момент времени $-t$. Это и есть именно то свойство обратимости решений уравнения Шредингера, которое было обнаружено в предыдущем параграфе.

Из определяющих соотношений (73) следует, что преобразование $\mathscr{K}$ коммутирует со всеми пространственными преобразованиями (трансляциями, вращениями и отражениями). Отметим также, что K коммутирует с операторами пространственных преобразований, определенными в разделе II [1]). В частности,

---

[1]) Если преобразование $\mathscr{K}$ коммутирует с другим преобразованием $\mathscr{T}$, то мы имеем $KT = e^{i\alpha}TK$, где фазовый множитель $e^{i\alpha}$ зависит от выбора оператора T. Легко видеть, что этот оператор определен с точностью до знака, если выполнено равенство $KT = TK$.

Это позволяет получить определенные выводы о структуре группы операторов G, сопоставляемой группе преобразований $\mathscr{G}$ в случае, когда последние

K антикоммутирует с тремя компонентами импульса и, следовательно, коммутирует с инфинитезимальными операторами трансляций. Аналогично K антикоммутирует с тремя компонентами момента импульса

$$K(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})K^{\dagger}=-(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) \tag{76}$$

и, следовательно, коммутирует с инфинитезимальными операторами вращений.

§ 18. Общее определение обращения времени

Для того чтобы расширить понятие обращения времени на самые общие системы частиц, мы должны определить обращение времени для спиновых переменных. Поскольку спин является частным случаем момента импульса, то он должен преобразовываться подобно моменту импульса (ур. (76)), т. е.

$$K\boldsymbol{s}K^{\dagger}=-\boldsymbol{s}. \tag{77}$$

Операция обращения времени обращает спин. Это определение сохраняет свойства коммутации $\mathscr{H}$ с пространственными преобразованиями и, в частности, с вращениями. Более того, согласно (76) и (77) K антикоммутирует с компонентами полного момента импульса $\boldsymbol{J}$

$$K\boldsymbol{J}K^{\dagger}=-\boldsymbol{J} \tag{78}$$

и, следовательно, коммутирует с операторами вращения (см. задачу 8), т. е. так как K антилинеен, (78) приводит к соотношению

$$Ke^{-i(\boldsymbol{Ju})\varphi/\hbar}K^{\dagger}=\exp\left[+\frac{i}{\hbar}\varphi\left(K(\boldsymbol{Ju})K^{\dagger}\right)\right]=e^{-i(\boldsymbol{Ju})\varphi/\hbar}.$$

Построим теперь оператор обращения времени для частицы спина s. Этот оператор определяется соотношениями (73) и (77). Обозначим K_0 оператор комплексного сопряжения, ассоциированный с представлением $\{\boldsymbol{r}, s_z\}$, в котором относительные фазы базисных векторов фиксированы обычным соглашением и, в частности, используются базисные векторы в спиновом пространстве, взятые в «стандартном» виде, определенном в гл. XIII. Таким образом, имеем

$$K_0\boldsymbol{r}K_0=\boldsymbol{r},\quad K_0\boldsymbol{p}K_0=-\boldsymbol{p}, \tag{79}$$

$$K_0s_xK_0=s_x,\quad K_0s_yK_0=-s_y,\quad K_0s_zK_0=s_z. \tag{80}$$

коммутируют с $\mathscr{H}$. Тогда мы можем взять за (T_i) (обозначения из § 8) пару преобразующих операторов, коммутирующих с K. В частности, (1) обозначает пару $(+1, -1)$. Множество $\{T\}$, образованное этими парами операторов (один из которых отличается от другого знаком), очевидно, образует группу и может быть взято в качестве группы G.

Положим

$$K = TK_0. \tag{81}$$

Поскольку $T = KK_0$ и $T^\dagger = K_0K^\dagger$, то (линейное) унитарное преобразование T действует по правилам

$$T\boldsymbol{r}T^\dagger = \boldsymbol{r}, \quad T\boldsymbol{p}T^\dagger = \boldsymbol{p}, \tag{82}$$

$$Ts_xT^\dagger = -s_x, \quad Ts_yT^\dagger = s_y, \quad Ts_zT^\dagger = -s_z. \tag{83}$$

Уравнения (82) и (83) порождают преобразование переменных $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{s}$, *которое соответствует повороту спина на угол* π *вокруг оси* y. Пусть $Y^{(s)}$ — оператор, осуществляющий это вращение

$$Y^{(s)} = e^{-i\pi s_y/\hbar}.$$

Величины T и $Y^{(s)}$ различаются только фазовым множителем. Поскольку фазовый множитель не имеет физического значения, то мы можем положить его равным 1, что дает

$$K = Y^{(s)}K_0 = e^{-i\pi s_y/\hbar}K_0. \tag{84}$$

Для специального случая частицы спина 1/2

$$K = -i\sigma_yK_0. \tag{85}$$

Все сказанное выше без затруднений можно распространить на системы, состоящие из N частиц. Оператор K становится тензорным произведением операторов отражения времени отдельных частиц. Если K_0 — оператор комплексного сопряжения, ассоциированный со стандартным представлением $\{\boldsymbol{r}^{(1)}s_z^{(1)} \ldots \boldsymbol{r}^{(N)}s_z^{(N)}\}$, а $Y^{(S)}$ — оператор вращения спинов на угол π вокруг оси Oy, то при указанном выше выборе фазы получаем

$$K = Y^{(S)}K_0 = e^{-i\pi S_y/\hbar}K_0. \tag{86}$$

§ 19. Обращение времени и комплексное сопряжение

Операция обращения времени $\mathcal{K}$ имеет много общего с комплексным сопряжением. Расширяя эту связь, будем называть *комплексно сопряженными* пару линейных операторов, являющихся образами друг друга при обращении времени. В частности, оператор Q называется:

(i) вещественным, если $KQK^\dagger = Q$;

(ii) чисто мнимым, если $KQK^\dagger = -Q$.

Всякая вещественная постоянная является вещественным оператором, а постоянная i — чисто мнимым оператором. Произведение i на вещественную постоянную дает чисто мнимый

оператор; сумма и произведение двух вещественных операторов являются вещественными операторами.

Не следует смешивать понятие вещественности с понятием эрмитовости. В этой связи уместно сделать следующие два замечания.

(а) В отличие от того, что имеется в случае эрмитова сопряжения, комплексно сопряженные операторы не обязаны описываться в заданном представлении комплексно сопряженными матрицами.

(б) Приведенное выше определение комплексного сопряжения не является единственно возможным. Всякое антиунитарное преобразование, квадрат которого равен $\mathcal{I}$, можно рассматривать как комплексное сопряжение.

При нашем определении комплексного сопряжения все наблюдаемые, которые являются функциями координат, вещественны, все импульсы и все спины чисто мнимы, а операторы пространственных преобразований, определенные так, как это делалось в разделе II, все вещественны (задача 8).

Понятие комплексного сопряжения можно распространить на случай векторов. Определим в качестве *вектора, комплексно сопряженного вектору* $|\rangle$, *вектор* $K|\rangle$. Повторное применение K может не давать исходный вектор кроме случая, когда $K^2 = 1$. Из равенства $\mathcal{K}^2 = \mathcal{I}$ не следует, что $K^2 = 1$, а лишь то, что K^2 коммутирует со всеми динамическими переменными, и, следовательно, является постоянной. Несложно показать (задача 9), что значение этой постоянной не зависит от выбора фазы, используемой в определении K, и что возможными значениями ее являются числа ± 1. Более того, это значение можно вычислить из выражения (86) для K. Поскольку K_0 коммутирует с $Y^{(S)}$ и $K_0^2 = 1$, то

$$K^2 = (Y^{(S)})^2 = e^{-i2\pi S_y/\hbar} \tag{87}$$

или, если обозначить n число частиц полуцелого спина в системе, то

$$K^2 = (-1)^n. \tag{88}$$

Если $K^2 = 1$ (n четно), то комплексно сопряженные векторы переходят друг в друга и можно определить вещественные векторы. Вектор $|r\rangle$ называют вещественным, если

$$K|r\rangle = |r\rangle.$$

По определению, *вещественным представлением* называют представление, все базисные векторы которого вещественны.

Для построения вещественного базиса можно поступать следующим образом. Выбирается произвольный вектор $|a\rangle$ и ли-

нейной комбинацией векторов $|a\rangle$ и $K|a\rangle$ образуют вещественный, нормированный на 1 вектор

$$|a^r\rangle = c\,|a\rangle + c^*(K\,|a\rangle).$$

Вещественность вектора $|a^r\rangle$ очевидна. Постоянная c выбирается так, чтобы норма вектора равнялась 1. Легко проверить, что такой выбор всегда возможен. Затем выбирают вектор $|b\rangle$, ортогональный к $|a^r\rangle$, и таким же образом конструируется вещественный вектор $|b^r\rangle$ нормы 1. Поскольку $K|a^r\rangle = |a^r\rangle$ и, по предположению, $\langle a^r|b\rangle = 0$, то

$$\langle a^r|(K\,|b\rangle) = (\langle a^r|K^\dagger)(K\,|b\rangle) = \langle a^r|b\rangle^* = 0,$$

и, следовательно, $|b^r\rangle$ ортогонален к $|a^r\rangle$. Затем выбирается произвольный вектор $|c\rangle$, ортогональный к $|a^r\rangle$ и $|b^r\rangle$, и строится вектор $|c^r\rangle$. Эту процедуру повторяют до тех пор, пока не будет образован полный набор базисных векторов.

Вещественные представления имеют ряд интересных свойств. Оператором обычного комплексного сопряжения в этих представлениях является оператор K. Всякий вещественный оператор описывается вещественной матрицей; два комплексно сопряженных оператора реализуются комплексно сопряженными матрицами. Унитарные матрицы, связывающие два вещественных представления, вещественны.

Если $K^2 = -1$ (n нечетно), то вещественные векторы отсутствуют. Однако так как $K = -K^\dagger$, то для любого вектора $|u\rangle$ имеем

$$\langle u|(K\,|u\rangle) = \langle u|(K^\dagger\,|u\rangle) = -\langle u|(K\,|u\rangle) = 0,$$

так что мы получили интересное свойство:

Два комплексно сопряженных вектора $|\rangle$ и $K|\rangle$ *ортогональны.*

Кроме того, если вектор $|b\rangle$ ортогонален двум комплексно сопряженным векторам $|a\rangle$ и $K|a\rangle$, то это свойство справедливо и для комплексно сопряженного вектора $K|b\rangle$. Из этого легко проверяемого свойства можно получить, используя те же рассуждения, что и в случае $K^2 = 1$, что существует базис, целиком построенный из комплексно сопряженных векторов.

§ 20. Принцип микрообратимости

Точно так же как ранее постулировалась инвариантность уравнения движения заданной системы относительно некоторых пространственных преобразований (§ 13), мы можем постулировать его обратимость по отношению ко времени, т. е. если

$|\psi(t)\rangle = U(t, 0)|\psi\rangle$ описывает возможное состояние системы, то вектор

$$|\psi(t)\rangle_{\text{rev}} = KU(-t, 0)|\psi\rangle$$

также представляет возможное состояние системы и, следовательно, с точностью до фазового множителя этот вектор совпадает с $U(t, 0)K|\psi\rangle$. Предполагая, что это свойство справедливо для всех $|\psi\rangle$, постулат обратимости по отношению к времени можно записать в виде

$$U(t, 0)K = e^{i\alpha(t)}KU(-t, 0).$$

Этот постулат применим только к консервативным системам. Если H — гамильтониан системы, то

$$U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}, \quad U(-t, 0) = e^{+iHt/\hbar} = U^{+}(t, 0),$$

откуда имеем

$$U(t, 0) = e^{i\alpha}(KU^{+}(t, 0)K^{+}). \tag{89}$$

Домножив обе части этого равенства на K слева и на K^{+} справа и учитывая, что $K^2 = K^{+2} = (-1)^n$, находим, что

$$U^{+}(t, 0) = e^{i\alpha}(KU(t, 0)K^{+}).$$

Сравнив это соотношение с равенством, получаемым при эрмитовом сопряжении соотношения (89),

$$U^{+}(t, 0) = e^{-i\alpha}(KU(t, 0)K^{+}),$$

получаем, что $e^{i\alpha}$ может принимать только значения ± 1, но поскольку $e^{i\alpha}$ — непрерывная функция t, равная 1 при $t = 0$, то мы имеем $e^{i\alpha} = 1$. Применяя (89) к инфинитезимальному оператору

$$U(dt, 0) = 1 - \frac{i}{\hbar}H\,dt,$$

получаем

$$1 - \frac{i}{\hbar}H\,dt = K\left[1 + \frac{i}{\hbar}H\,dt\right]K^{+},$$

т. е.

$$KHK^{+} = H. \tag{90}$$

Итак, *если уравнение движения консервативной системы обратимо во времени, то гамильтониан вещественен и наоборот* (обратное доказано в § 17).

Постулат обратимости под названием *принцип микрообратимости* обычно формулируется несколько отличным от выше приведенного способом. Эта формулировка такова.

Пусть w — вероятность обнаружить консервативную систему в некотором состоянии $|\chi\rangle$ в момент времени t, если она в момент времени t_0 находилась в состоянии $|\varphi\rangle$. Пусть w_{rev} — вероятность обнаружить систему в состоянии $K|\varphi\rangle$ в момент времени t, если она в момент времени t_0 находилась в состоянии $K|\chi\rangle$. Тогда принцип микрообратимости утверждает, что

$$w_{\text{rev}} = w \tag{91}$$

для любых $|\varphi\rangle$, $|\chi\rangle$, t_0 и t.

Условие (91) может быть записано в виде

$$|(\langle\varphi|K^+)(U(t, t_0)K|\chi\rangle)|^2 = |\langle\chi|U(t, t_0)|\varphi\rangle|^2.$$

Это соотношение можно сравнить с соотношением (58). Поскольку

$$(\langle\varphi|K^+)(UK|\chi\rangle) = \langle\varphi|(K^+UK)|\chi\rangle^* = \langle\chi|(K^+U^+K)|\varphi\rangle,$$

то его можно переписать в виде

$$|\langle\chi|(K^+U^+K)|\varphi\rangle| = |\langle\chi|U|\varphi\rangle|.$$

Так как последнее равенство выполняется при всех $|\varphi\rangle$ и $|\chi\rangle$, то U и K^+U^+K совпадают с точностью до фазового множителя (теорема II). Аргументация, подобная той, которая применялась выше к множителю $e^{i\alpha}$, показывает, что и этот фазовый множитель равен единице. Таким образом, принцип микрообратимости требует выполнения равенства

$$U(t, t_0) = K^+U^+(t, t_0)K, \tag{92}$$

которое в случае инфинитезимального оператора U как раз является условием инвариантности гамильтониана (90)[1].

Обычно предполагается, что любая квантовая система, не взаимодействующая с внешними полями, удовлетворяет принципу микрообратимости. Вплоть до настоящего времени эта гипотеза не противоречит данным эксперимента. В присутствии внешнего поля принцип микрообратимости выполняется или нет в зависимости от того, является ли поле инвариантным или нет по отношению к обращению времени. Электростатическое поле обладает этим свойством инвариантности. Это легко понять, так как источниками этого поля являются фиксированные электрические заряды, а распределение статического заряда не меняется при обращении времени. С другой стороны, источниками статического магнитного поля являются фиксированные

---

[1]) Поскольку $U^+(t_2, t_1) = U(t_1, t_2)$, то уравнение (92) можно записать также в виде

$$U(t_2, t_1) = K^+U(t_1, t_2)K.$$

электрические токи: обращение времени обращает токи, а значит, и поля. Следовательно, принцип микрообратимости нарушается в присутствии магнитного поля даже в том случае, когда оно не зависит от времени.

§ 21. Следствие: вырождение Крамерса

Вещественность гамильтониана H, как и любая другая симметрия, отражается в наличии специальных свойств в задаче на собственные значения.

Если $|u\rangle$ — собственный вектор оператора H

$$H|u\rangle = E|u\rangle,$$

то комплексно сопряженный вектор $K|u\rangle$ также является собственным для H и соответствует тому же собственному значению, т. е. по предположению

$$HK = KH,$$

и так как E — вещественное число, то

$$H(K|u\rangle) = K(H|u\rangle) = (KE|u\rangle) = E(K|u\rangle).$$

Следовательно, подпространство $\mathscr{E}_E$, соответствующее собственному значению E, инвариантно относительно действия антиунитарного преобразования K, и можно применить результаты § 19. Следует рассмотреть два случая в соответствии с $K^2 = \pm 1$.

1-й случай. $K^2 = +1$ (четное число спинов 1/2).

В каждом из подпространств $\mathscr{E}_E$ можно выбрать ортонормированный базис, все векторы которого вещественны. Таким образом, H имеет (по крайней мере) один базис, все векторы которого вещественны.

2-й случай. $K^2 = -1$ (нечетное число спинов 1/2).

В каждом из подпространств $\mathscr{E}_E$ можно выбрать ортонормированный базис, состоящий из пар комплексно сопряженных векторов. Итак, каждое из подпространств $\mathscr{E}_E$ имеет четную размерность: *каждое собственное значение гамильтониана H по крайней мере двукратно вырождено и его вырождение обязательно имеет четную кратность.* Вырождение такого типа называют *вырождением Крамерса.*

Некоторые системы не имеют симметрий, отличных от инвариантности относительно обращения времени. Пример этому дает система атомов в асимметрической кристаллической решетке. Такой атом можно рассматривать как систему, находящуюся в чисто электростатическом внешнем поле. Гамильтониан такого атома веществен. Если он содержит нечетное

число электронов, то все энергетические уровни двукратно вырождены. Это вырождение можно устранить введением магнитного поля.

§ 22. Вещественный гамильтониан, инвариантный относительно вращений

Если гамильтониан H обладает другими свойствами симметрии помимо обращения времени, то результаты предыдущего пункта остаются справедливыми, хотя в значительной степени теряют свой интерес. Вигнер [1]) систематически изучал свойства H в случае, когда:

(i) H веществен: $[K, H] = 0$;

(ii) H инвариантен относительно преобразований группы линейных преобразований: $[T_i, H] = 0$;

(iii) преобразования T_i коммутируют с обращением времени: $[K, T_i] = 0$.

Мы рассмотрим здесь только случай, когда группой инвариантности является группа вращений [2]).

Пусть Y — оператор вращения на угол π вокруг оси y (не следует смешивать этот оператор с введенным выше оператором $Y^{(S)}$ вращения одних только спинов). Положим

$$K_y \equiv Y^{\dagger} K \equiv e^{i\pi J_y/\hbar} K. \tag{93}$$

Операторы $Y^{\dagger}$ и K коммутируют с $\boldsymbol{J}^2$ и антикоммутируют с J_z.

---

[1]) *E. P. Wigner*, Göttinger Nachrichten 31, 546 (1932) (см. *Е. Вигнер.* Теория групп. М., ИЛ., 1961, гл. 26. *Прим. перев.*)

[2]) Для заданной группы G вещественность H сказывается либо на удвоении G-вырождения, либо в возможности диагонализации оператора H в представлении, базисные векторы которого удовлетворяют некоторому условию вещественности. Детальная формулировка результата состоит в следующем (см. работу Вигнера, цитированную выше).

Пусть $\boldsymbol{G}^{(j)}$ — неприводимое представление G, а $\boldsymbol{G}^{(j)*}$ — сопряженное представление. Оператор K, действуя на вектор одного из этих представлений, дает вектор из другого. Тогда $\boldsymbol{G}^{(j)}$ и $\boldsymbol{G}^{(j)*}$ либо эквивалентны, либо неэквивалентны. В первом случае матрица S, позволяющая перейти от одного представления к другому $(\boldsymbol{G}^{(j)*} = S\boldsymbol{G}^{(j)}S^{\dagger})$, имеет следующее свойство: $SS^* = \pm 1$. Обозначим $\boldsymbol{G}$ представление группы G в подпространстве, соответствующем заданному собственному значению гамильтониана H. Следует рассмотреть три случая:

(а) если $\boldsymbol{G}^{(j)*}$ не эквивалентно $\boldsymbol{G}^{(j)}$, то оба представления одинаковое число раз встречаются в разложении на неприводимые компоненты (двукратное вырождение);

(б) если $\boldsymbol{G}^{(j)*} \approx \boldsymbol{G}^{(j)}$ и $SS^*K^2 = -1$, то $\boldsymbol{G}^{(j)}$ встречается четное число раз в разложении $\boldsymbol{G}$ (двукратное вырождение);

(в) если $\boldsymbol{G}^{(j)*} \approx \boldsymbol{G}^{(j)}$ и $SS^*K^2 = +1$, то все базисные векторы каждой компоненты $\boldsymbol{G}^{(j)}$ представления $\boldsymbol{G}$ можно выбрать удовлетворяющими условию «вещественности»: $KS|u\rangle = |u\rangle$.

Все представления группы вращений соответствуют случаю (в).

Следовательно, K_y коммутирует с $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. Этот оператор коммутирует также с J_+ и J_-

$$Y^\dagger K(J_x \pm iJ_y) = Y^\dagger(-J_x \pm iJ_y)K = (J_x \pm iJ_y)Y^\dagger K.$$

Более того, поскольку $[Y, K] = 0$ и $Y^2 = K^2 = (-1)^n$ (ср. соотношение (88)), то

$$K_y^2 = 1. \tag{94}$$

Антиунитарное преобразование K_y можно рассматривать как комплексное сопряжение, точно так же как рассматривалось K в § 19. Для того чтобы различать K_y и K, мы будем использовать кавычки для нового типа сопряжения. Таким образом, «вещественный» (линейный) оператор — оператор, коммутирующий с K_y. Вектором, «комплексно сопряженным» к вектору $|\rangle$, будет, по определению, вектор $K_y|\rangle$. Поскольку $K_y^2 = 1$, то «вещественные» векторы и «вещественные» представления существуют. Действие «вещественного» оператора на «вещественный» вектор дает «вещественный» вектор. В «вещественном» представлении «вещественный» оператор описывается вещественными матрицами.

Поскольку $\boldsymbol{J}^2$ и J_z — «вещественные» операторы, мы можем построить базис в пространстве момента импульса (jj), все векторы которого «вещественны». Поскольку J_+ и J_- также «вещественны», то и векторы стандартного базиса, который может быть построен из этих векторов методом, развитым в § XIII. 6, также все «вещественны».

Пусть $|\tau j\mu\rangle$ — векторы «вещественного» стандартного базиса. Если H инвариантен относительно вращений и отражения времени, то он коммутирует с $\boldsymbol{J}$ и K_y и описывается в представлении $\{\tau j\mu\}$ вещественной матрицей вида (52), т. е.

$$\langle \tau j\mu \mid H \mid \tau' j'\mu'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}H^{(j)}_{\tau\tau'}$$

с вещественными $H^{(j)}_{\tau\tau'}$. Отсюда следует *наличие вращательного вырождения и существование у H по крайней мере одной ортонормированной системы собственных векторов, образующих «вещественный» базис.*

«Вещественный» базис в $\mathscr{E}$ можно построить, взяв тензорные произведения базисных векторов в более простых пространствах. Предположим, что мы имеем

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2 \otimes \ldots$$

и что в каждом пространстве $\mathscr{E}_i$ определены операторы вращений и обращения времени. С каждым $\mathscr{E}_i$ связан оператор «комплексного сопряжения» $K_y^{(i)} = Y^{(i)\dagger}K^{(i)}$, а оператор K_y для всего

пространства является тензорным произведением этих операторов

$$K_y = K_y^{(1)} K_y^{(2)} \ldots .$$

Тензорное произведение «вещественных» векторов определяет «вещественный» вектор. В частности, мы можем образовать множество «вещественных» базисных векторов в $\mathscr{E}$, взяв тензорные произведения векторов, образующих «вещественный» стандартный базис момента импульса в каждом из пространств сомножителей. Исходя из этого базиса в $\mathscr{E}$, мы можем образовать стандартный базис полного момента импульса в этом пространстве путем сложения моментов импульса. Поскольку все коэффициенты Клебша — Гордана вещественны, все векторы построенного таким образом стандартного базиса также «вещественны».

Мы закончим эту главу замечанием о «вещественности» сферических функций.

Пусть $\omega = (\theta, \varphi)$ — угловые координаты вектора $\boldsymbol{r}$ частицы, а $Y_l^m(\omega)$ — сферические функции, описывающие состояние момента импульса (lm). В этом частном случае ($\hbar = 1$)

$$K_y = e^{-i\pi l_y} K_0,$$

так что (уравнения (Б.92) и (В.62))

$$K_y Y_l^m(\omega) = e^{-i\pi l_y} Y_l^{m*}(\omega) = e^{-i\pi l_y} (-1)^m Y_l^{-m}(\omega) = (-1)^l Y_l^m(\omega).$$

Итак, сферическая функция Y_l^m «вещественна» при четном l и «чисто мнима» при нечетном l. С другой стороны, функции

$$\mathscr{Y}_l^m(\omega) \equiv i^l Y_l^m(\omega)$$

образуют «вещественный» стандартный базис для орбитального момента импульса.

Пусть $\omega_p = (\theta_p, \varphi_p)$ — угловые координаты импульса $\boldsymbol{p}$, а $Y_l^m(\omega_p)$ — сферическая гармоника, описывающая состояние момента импульса (lm) в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$. Можно показать (задача 10), что

$$K_0 = S_0 K_p,$$

где S_0 — оператор четности (ур. (45)), а K_p — оператор комплексного сопряжения в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$. Тогда

$$K_y Y_l^m(\omega_p) = Y_l^m(\omega_p).$$

Следовательно, $Y_l^m(\omega_p)$ образуют «вещественный» стандартный

базис для орбитального момента импульса. Эти рассмотрения «вещественности» без труда можно распространить на общий случай неприводимых тензорных операторов (см. задачу 12).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Предположим, что пространство $\mathscr{E}$ векторов состояния системы представляет собой прямую сумму $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 + \ldots$ некоторого числа подпространств, инвариантных по отношению к множеству физических наблюдаемых системы. Показать, что проекторы P_1, P_2, ... на эти подпространства коммутируют с каждой физической наблюдаемой и что не все векторы из $\mathscr{E}$ являются одновременными собственными векторами полного набора коммутирующих физических наблюдаемых.

2. Показать, что оператор S_0, определенный равенством (45), удовлетворяет соотношениям (43) и (44) и, в частности, соотношению $S_0 \boldsymbol{p} S_0^\dagger = -\boldsymbol{p}$.

3. Оператор отражения в плоскости, перпендикулярной вектору $\boldsymbol{u}$, в случае частиц спина $1/2$ является произведением оператора, действующего только на орбитальные переменные, и оператора, действующего только на спиновые переменные. Показать, что при специальном выборе фазового множителя последний из упомянутых операторов равен $(\boldsymbol{\sigma u})$. Показать, что произведение $(\boldsymbol{\sigma v})(\boldsymbol{\sigma u})$, которое описывает два последовательных отражения в плоскостях, перпендикулярных векторам $\boldsymbol{u}$ и $\boldsymbol{v}$, равно оператору, соответствующему вращению спина на угол $2(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ вокруг оси $(\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v})/|\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v}|$.

4. Поток частиц спина s рассеивается на потенциале, зависящем от спина. Пусть $\boldsymbol{p}_i$ — начальный импульс. Частицы, рассеянные в заданном направлении, выделяются диафрагмой. Пусть $\boldsymbol{p}_f$ — импульс этих частиц, а D — плоскость рассеяния, т. е. плоскость, в которой лежат векторы $\boldsymbol{p}_i$ и $\boldsymbol{p}_f$. Мы предполагаем, что налетающие частицы не поляризованы, так что их спиновое состояние описывается оператором плотности $\rho_i = 1/(2s+1)$. Показать, что если потенциал взаимодействия *инвариантен относительно вращений и отражения в начале координат*, то оператор плотности ρ_f, описывающий спиновое состояние рассеянных частиц, симметричен относительно отражения в плоскости D.

5. Показать, что оператор плотности, описывающий спиновое состояние частицы спина $1/2$, может быть представлен в виде

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{P\sigma}),$$

где $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — удвоенный вектор спина частицы, а $\boldsymbol{P}$ — вектор, длина которого лежит между 0 и 1 и который полностью определяет состояние поляризации частицы.

Возвращаясь к задаче 4 и предполагая, что $s = 1/2$, показать, что вектор $\boldsymbol{P}_f$, определяющий поляризацию рассеянных частиц, *перпендикулярен плоскости рассеяния*.

6. Показать, что при добавлении к гамильтониану системы произвольной вещественной функции времени оператор эволюции $U(t, t_0)$ домножается только на фазовый множитель.

7. При галилеевском преобразовании системы координат переменные $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{s}$ частицы переходят в $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t$, $\boldsymbol{p}-m\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{s}$ соответственно. Показать, что такое преобразование задается оператором

$$G(\boldsymbol{v}, t) = \exp[i\boldsymbol{v}(m\boldsymbol{r} - \boldsymbol{p}t)/\hbar].$$

Галилеевское преобразование системы N частиц описывается оператором $G(\boldsymbol{v}, t) = \exp[i\boldsymbol{v}(M\boldsymbol{R} - \boldsymbol{P}t)/\hbar]$, где M, $\boldsymbol{R}$ и $\boldsymbol{P}$ — масса, оператор координаты и оператор импульса центра масс.

(*N. B.* Для заданного значения t галилеевские преобразования образуют группу. При принятом соглашении о фазе операторы преобразований также образуют группу.)

Уравнение движения инвариантно относительно этого преобразования, если

$$G^{+}(\boldsymbol{v}, t)\, U(t, t_0)\, G(\boldsymbol{v}, t_0) = U(t, t_0) \times \text{фазовый множитель}.$$

Показать, что это условие эквивалентно «условию галилеевской инвариантности уравнения Шредингера»

$$G^{+}(\boldsymbol{v}, t)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right] G(\boldsymbol{v}, t) = \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right] + f,$$

где f — произвольная вещественная функция времени, и что это условие действительно выполняется для шредингеровского гамильтониана (при этом $f = 0$).

8. Показать, что операторы трансляций и вращений и оператор отражений S_0 (определение (45)) коммутируют с оператором обращения времени K и что это свойство не зависит от выбора произвольной фазы, имеющейся в определении K.

9. Показать, что если квадрат антиунитарного оператора равен постоянной, то она равна либо $+1$, либо -1.

10. Пусть K_p — оператор комплексного сопряжения в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$, K_0 — оператор комплексного сопряжения в представлении $\{\boldsymbol{r}\}$, S_0 — оператор отражения (определение (45)). Показать, что $K_0 = S_0 K_p$. Вывести, что при обращении времени волновая функция $\Phi(\boldsymbol{p})$ переходит в

$$K\Phi(\boldsymbol{p}) = \Phi^{*}(-\boldsymbol{p}).$$

11. Пусть имеется система, инвариантная относительно обращения времени. Пусть B — чисто мнимая (см. § 19) наблюдаемая системы (импульс, спин, орбитальный момент импульса и т. п.). Показать, что:

(i) если стационарное состояние не вырождено, то среднее значение наблюдаемой B в этом состоянии равно нулю;

(ii) след проекции наблюдаемой B на подпространство, соответствующее любому собственному значению энергии, равен нулю.

12. Обозначим $T_q^{(k)}$ $(q = -k, -k+1, \ldots, +k)$ стандартные компоненты неприводимого тензорного оператора $\boldsymbol{T}^{(k)}$. По определению, комплексно сопряженным к оператору $\boldsymbol{T}^{(k)}$ является тензорный оператор, компонента $q = 0$ ко-

торого есть образ при обращении времени компоненты $T_0^{(k)}$ (при таком определении декартовы компоненты вещественных векторных операторов инвариантны относительно обращения времени, а компоненты чисто мнимых векторных операторов меняют знак). Показать, что стандартные компоненты оператора, комплексно сопряженного к $\boldsymbol{T}^{(k)}$, являются «комплексно сопряженными» (в смысле § 22) соответствующим компонентам оператора $(-1)^k\boldsymbol{T}^{(k)}$ и что, в частности, в «вещественном» стандартном представлении матричный элемент $\left\langle \tau j \mu \middle| T_q^{(k)} \middle| \tau' j' \mu' \right\rangle$ вещественен, если $i^k\boldsymbol{T}^{(k)}$ вещественен, и чисто мнимый, если $i^k\boldsymbol{T}^{(k)}$ — таковой.

(*N. B.* Это свойство имеет непосредственное приложение в задачах об угловых корреляциях, ибо оно дает, с точностью до знака, относительные фазы вкладов различных мультиполей.)