QM 10th week_2

proper time reversed state: ψ^*.

$$\psi(x,t) = \psi^*(x,-t)$$

Time reversal과 complex conjugate를 같이하는 연산자를 생각해 보자.

모든 symmetry operation은 둘 중 하나의 케이스

unitary & linear 이거나, anti-unitary & anti-linear

어떤 operator 가 $|\alpha\rangle \longrightarrow |\tilde{\alpha}\rangle$, $|\beta\rangle \longrightarrow |\tilde{\beta}\rangle$ 이렇게 변환할 때,

이것이 symmetry operator 라면 내적이 보존되어야 한다고 보통 생각한다.

$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$

이런 점에서, symmetry operator는 무조건 unitary operator 여야 한다고 생각해 왔다.

왜냐면 $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$

그러나, 양자역학에서는 이 엄격한 내적 보존 조건을 완화 할 수 있다.

$|\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle| = \langle\beta|\alpha\rangle$

이 경우, $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$ 여도 조건을 만족하며,

이를 만족하는 연산자는 antiunitary operator 이다.

Definition) The transformation $|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle = \theta|\beta\rangle$

is said antilinear if

$$\theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle$$

θ is said antiunitary if

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$$

이런 연산자 θ는 $\theta = UK$ 이렇게 생겼다.

질문: $\theta^{-1}\theta = ?$ U와 K, 교환 가능

K는 complex conjugate operator

K는 coefficient 에 적용해서 complex conjugation을 일으키지만,

basis ket은 변화시키지 않는다.

$$K\,c|\alpha\rangle = c^* K|\alpha\rangle$$

$$K(c_\alpha|\alpha\rangle) = c_\alpha^* K|\alpha\rangle = c_\alpha^* K\left(\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle\right) = c_\alpha^* \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* |a'\rangle$$

$$\theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = UK(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^* UK|\alpha\rangle + c_2^* UK|\beta\rangle$$

anti-linear operator는 항상 ket side에 적용되도록 주의

$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle$를 구해보자. $|\tilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle = UK|\alpha\rangle$

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* U|a'\rangle \quad , \quad |\tilde{\beta}\rangle = \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle^* U|a'\rangle \quad , \quad \langle\tilde{\beta}| = \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle\langle a'|U^\dagger$$

$$\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'}\sum_{a''} \langle a'|\alpha\rangle^* \langle a''|\beta\rangle \langle a''|U^\dagger U|a'\rangle$$
$$= \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* \langle a'|\beta\rangle = \sum_{a'} \langle\alpha|a'\rangle\langle a'|\beta\rangle$$
$$= \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$$

Time reversal operator to be Θ

properties of Time Reversal Operator

from an original state $|\alpha\rangle$ at $t=0$

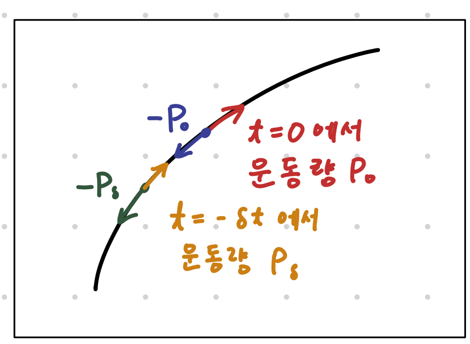
t가 δt 만큼 변할 때, $|\alpha, \delta t\rangle = \left(1 - \frac{i\mathcal{H}\delta t}{\hbar}\right)|\alpha\rangle$

$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle$을 어떻게 이해해야 하는가? $\Theta|\alpha\rangle$는 "움직임"이 역전된 상태다.

위치는 그대로 이지만, 운동량은 뒤집어진 상태인 것이다.

① $t=0$에서 Θ을 적용, δt 만큼 time-evolve 한다. $|\tilde{\alpha}\rangle_i = \left(1 - \frac{i\mathcal{H}\delta t}{\hbar}\right)\Theta|\alpha\rangle$

② $t=0$에서 $-\delta t$ 만큼 시간을 뒤로 되돌린 뒤 Θ을 적용. $|\tilde{\alpha}\rangle_{ii} = \Theta\left(1 - \frac{i\mathcal{H}(-\delta t)}{\hbar}\right)|\alpha\rangle$



왜 둘이 똑같지?

왼 쪽의 그림을 볼때,

운동이 time reversal 하다면, ① 연산과 ② 연산의 결과 모두

초록색 벡터가 되어야 한다는 걸 알 수 있다.

$\therefore |\tilde{\alpha}\rangle_i = |\tilde{\alpha}\rangle_{ii} \quad \left(1 - \frac{i\mathcal{H}\delta t}{\hbar}\right)\Theta|\alpha\rangle = \Theta\left(1 + \frac{i\mathcal{H}\delta t}{\hbar}\right)|\alpha\rangle$

$$\boxed{-i\mathcal{H}\Theta = \Theta i\mathcal{H}}$$

$\boxed{\text{가정 A}}$ Θ가 unitary 라면? $|n\rangle$이 energy eigenstate, $\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

$\Theta i = i\Theta$가 되어 $-\mathcal{H}\Theta = \Theta\mathcal{H}$, $\quad \mathcal{H}(\Theta|n\rangle) = -\Theta\mathcal{H}|n\rangle = -E_n|n\rangle$ time reversal 하면 energy가 음수가 된다?

$\boxed{\text{가정 B}}$ Θ가 antiunitary 하다면, $\Theta i = -i\Theta$

$-i\mathcal{H}\Theta = \Theta i\mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}\Theta = \Theta\mathcal{H}$ $\quad \Theta i = \Theta\Theta^{-1}\Theta$

$\mathcal{H}(\Theta|n\rangle) = \Theta\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ 이렇게 $\Theta|n\rangle$ 또한 $|n\rangle$ 와 eigenvalue가 같다.

질문) 하이젠베르크 방식의 basis ket 에 complex conjugate operator 를 취하면?

$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle$, $|\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\beta\rangle$

$\langle\beta|X|\alpha\rangle$, $\langle\tilde{\beta}|X|\tilde{\alpha}\rangle = ?$ Time reversal 했을 때 이 값은 어떻게 바뀌나?

$\langle\gamma| = \langle\beta|X$, $|\gamma\rangle = X^{\dagger}|\beta\rangle$

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\gamma|\alpha\rangle \overset{\Theta}{=} \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\gamma}\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta|\gamma\rangle$$
$$= \langle\tilde{\alpha}|\Theta X^{\dagger}\Theta^{-1}\Theta|\beta\rangle$$
$$= \langle\tilde{\alpha}|\Theta X^{\dagger}\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$$

X 가 observable 인 A 라면, A는 hermitian operator, $A = A^{\dagger}$

$\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$

$\langle\alpha|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A\Theta^{-1}|\tilde{\alpha}\rangle$

$\Theta A\Theta^{-1} = \begin{cases} -A & \text{이라면 } A\text{는 time-reversal odd operator} \\ A & \text{이라면 } A\text{는 time-reversal even operator} \end{cases}$

If A is a time-reversal odd operator, $\langle\alpha|A|\alpha\rangle = -\langle\tilde{\alpha}|A|\tilde{\alpha}\rangle$
TR 에 expactation value 부호가 바뀜. 예시) momentum, angular momentum.

If A is a time-reversal even operator, $\langle\alpha|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|A|\tilde{\alpha}\rangle$
TR 해도 expactation value가 그대로. 예시) position,

$[x_i, p_j]|\rangle = i\hbar\delta_{ij}|\rangle$ $\rightarrow$ $|\rangle$는 임의의 ket. 식의 양변에 Θ를 취하자.

$\Theta[x_i, p_j]\Theta^{-1}\Theta|\rangle = \Theta i\hbar\delta_{ij}|\rangle = -i\hbar\delta_{ij}\Theta|\rangle$

$$\Theta[x_i, p_j]\Theta^{-1} = \Theta x_i p_j\Theta^{-1} - \Theta x_i p_j\Theta^{-1}$$
$$= \Theta x_i\Theta^{-1}\Theta p_j\Theta^{-1} - \Theta x_i\Theta^{-1}\Theta p_j\Theta^{-1}$$
$$= [\Theta x_i\Theta^{-1}, \Theta p_j\Theta^{-1}]$$
$$= [x_i, -p_j]$$

결국은, $[x_i, -p_j]\Theta|\rangle = -i\hbar\delta_{ij}\Theta|\rangle$ $\quad$ Θ가 antisymmetry 하기 때문에 commutation relation 이 보존 된다.

각운동량의 commutation relation도 TR에 보존되나?

$$[L_i, L_j]|\rangle = i\hbar \varepsilon_{ijk} |\rangle$$

$$\Theta [L_i, L_j]\Theta^{-1}\Theta|\rangle = \Theta\, i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k |\rangle$$

$$[\Theta L_i \Theta^{-1}, \Theta L_j \Theta^{-1}] = -i\hbar \varepsilon_{ijk}\, \Theta L_k \Theta^{-1} \Theta|\rangle$$

$$[-L_i, -L_j]\Theta|\rangle = -i\hbar \varepsilon_{ijk}(-L_k)\Theta|\rangle$$

$$[L_i, L_j]\Theta|\rangle = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \Theta|\rangle$$

역시 commutation relation이 보존된다.

4.4.3. wave function.

$$|\alpha\rangle = \int dx\, \langle x|\alpha\rangle |x\rangle$$

$$\Theta|\alpha\rangle = \int dx\, \langle x|\alpha\rangle^* (\Theta|x\rangle)$$

$$= \int dx\, \langle x|\alpha\rangle^* |x\rangle$$

$$= \int dx\, \psi^*(x) |x\rangle$$

$$\Theta x \Theta^{-1} = x$$

$$\Theta x = x \Theta$$

$$\Theta x|x'\rangle = x\,\Theta|x'\rangle$$

$$\Theta x'|x'\rangle = x'\,\Theta|x'\rangle = x\,\Theta|x'\rangle$$

$$\therefore \Theta|x'\rangle = |x'\rangle$$

따라서, TR에 의해 wave function은 $\psi(x) \xrightarrow{\Theta} \psi^*(x)$
이렇게 변환된다. 슈뢰딩거 방정식에서 예상한 결과와 같다.

Momentum wave function은 어떨까? $\Theta|p'\rangle = |-p'\rangle$ 인 점을 이용.

$$|\alpha\rangle = \int dp\, \langle p'|\alpha\rangle |p'\rangle$$

$$\Theta|\alpha\rangle = \int dp\, \langle p'|\alpha\rangle^* \Theta|p'\rangle = \int dp\, \langle p'|\alpha\rangle^* |-p'\rangle = \int dp\, \langle -p'|\alpha\rangle^* |p'\rangle$$

$\langle p'|\alpha\rangle = \phi(p')$ 일 때,

TR에 의해 $\phi(p') \xrightarrow{\Theta} \phi^*(-p')$ 이렇게 변환된다.

probability current density : $\mathbb{J} = \left(\frac{\hbar}{m}\right) Im[\psi^* \nabla \psi]$

여기에 time reversal을 적용

$$\mathbb{J} \rightarrow \left(\frac{\hbar}{m}\right) Im[\psi \nabla \psi^*] = \left(\frac{\hbar}{m}\right) Im[(\psi^* \nabla \psi)^*] = -\left(\frac{\hbar}{m}\right) Im[\psi^* \nabla \psi] = -\mathbb{J}$$

$\mathbb{J} \xrightarrow{T \cdot R} -\mathbb{J}$ 시간 역전이라는 건 곧 확률의 흐름이 반대가 되는 것

$\psi_\alpha(x,t) \xrightarrow{T \cdot R} \psi^*_\alpha(x,-t)$

Time reversal invariant 의 결과

$[\mathcal{H}, \Theta] = 0$, $\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ 이므로,

$$\Theta \mathcal{H}|n\rangle = \underline{\mathcal{H}\Theta|n\rangle} = \Theta E_n|n\rangle = \underline{E_n \Theta|n\rangle}$$

$\Theta|n\rangle$는 $|n\rangle$과 똑같은 기능을 한다.

$$|n\rangle = \int dx' \langle x'|n\rangle |x'\rangle$$

$$\Theta|n\rangle = \int dx' \langle x'|n\rangle^* |x'\rangle$$

$$\langle x'|n\rangle = \langle x'|n\rangle^*$$

$$\therefore \langle x'|n\rangle \in \mathbb{R}$$

energy eigen state의 wave function은 무조건 실수값이다. ⟶ 물리적 의미는 뭔가?

예시) spherical harmonics

$$Y_l^m(\theta,\phi) \xrightarrow{\Theta} Y_l^{*m}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\phi)$$

$$Y_l^m(\theta,\phi) \xrightarrow{\Theta^2} (-1)^{2m} Y_l^m(\theta,\phi) = Y_l^m(\theta,\phi)$$