4.8 (a) 假定哈密顿量在时间反演下不变，证明对于一个无自旋非简并系统在任意给定时刻的波函数总可以选择为实的.

(b) 对于 $t=0$ 时刻的一个平面波，其波函数由一个复函数 $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$ 给出. 为什么这不破坏时间反演不变性.

(a) 由于 H 在时间反演下不变，即 $[H,\Theta]=0$

$\therefore H\Theta|n\rangle=\Theta H|n\rangle=E_n\Theta|n\rangle$.

而对于无自旋非简并系统 $\Theta|n\rangle=|n\rangle$

$\varphi_n(x)=\langle x|n\rangle \qquad \langle x|\Theta|n\rangle=\langle x|n\rangle^*=\varphi_n^*(x)$.

$\therefore \varphi_n(x)=\varphi_n^*(x)$

$\therefore$ 波函数为实函数.

对任意态 $|\alpha,t\rangle$ 的波函数有

$\langle x|\alpha,t\rangle=\langle x|\sum_n e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}|n\rangle\langle n|\alpha\rangle=\sum_n e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}c_n\varphi_n(x)$.

$\therefore \langle x|\Theta|\alpha,t\rangle=\langle x|\sum_n e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}\Theta|n\rangle\langle n|\alpha\rangle^*=\sum_n e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}c_n^*\varphi_n^*(x)=\sum_n e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}c_n^*\varphi_n(x)$

$\langle x|\alpha,t\rangle$ 与 $\langle x|\Theta|\alpha,t\rangle$ 均满足薛定谔方程，$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_\alpha(x,t)=H\varphi_\alpha(x,t)$

$\therefore$ 对任意波函数 $\langle x|\alpha,t\rangle$，可构造波函数

$$\varphi_\alpha(x,t)=\sum_n\left(\frac{c_n+c_n^*}{2}\right)e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}\varphi_n(x).$$ 且 $\varphi_\alpha(x,t)$ 也满足薛定谔方程.

(b) 对于 $\langle x|p\rangle=e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ 有 $\langle x|\Theta|p\rangle=\langle x|p\rangle^*=e^{-\frac{ipx}{\hbar}}=\langle x|-p\rangle$

又∵ $|p\rangle$ 与 $|-p\rangle$ 为具有相同能量的简并态，所以平面波不违反时间反演不变性.

4.10 （译者注：按勘误表的要求，该题被重新改写了，修改后的形式如下所示.）

(a) 用 (4.4.53) 式证明 $\Theta|j,m\rangle$ 等于 $|j,-m\rangle$，至多差一个包含有因子 $(-1)^m$ 的相因子. 这就是说，证明 $\Theta|j,m\rangle=e^{i\delta}(-1)^m|j,-m\rangle$，其中的 δ 不依赖于 m.

(b) 利用同样的相位约定求相应于 $\mathscr{D}(R)|j,m\rangle$ 的时间反演态. 先用无穷小形式 $\mathscr{D}(\hat{\mathbf{n}},d\phi)$ 处理，然后推广到有限转动.

(c) 从这些结果出发证明，不依赖于 δ，有

$$\mathscr{D}^{(j)*}_{m'm}(R)=(-1)^{m-m'}\mathscr{D}^{(j)}_{-m',-m}(R).$$

(d) 可以得出如下结论：可以自由地选取 $\delta=0$，以及 $\Theta|j,m\rangle=(-1)^m|j,-m\rangle=i^{2m}|j,-m\rangle$.

(a) $\Theta J\Theta^{-1}=-J \qquad \therefore \Theta J=-J\Theta$

$J_z\Theta|j,m\rangle=-\Theta J_z|j,m\rangle=-m\hbar\Theta|j,m\rangle$

$\because J_z|j,-m\rangle=(-m\hbar)|j,-m\rangle$ ∵ j 与 m 已区分所有简并态

$\therefore \Theta|j,m\rangle$ 与 $|j,-m\rangle$ 表示同一态，至多差一个相位因子.

$J_x\Theta=-\Theta J_x \qquad iJ_y\Theta=i\Theta J_y=\Theta(iJ_y)$

$\therefore J_+\Theta=(J_x+iJ_y)\Theta=-\Theta J_-$

$J_-\Theta=(J_x-iJ_y)\Theta=-\Theta J_+$

$\therefore J_\pm\Theta|j,m\rangle=-\Theta J_\mp|j,m\rangle=-\Theta C_\mp^{(j,m)}\hbar|j,m\mp1\rangle$

$=-C_\mp^{(j,m)}\hbar\Theta|j,m\mp1\rangle$

其中 $C_\pm^{jm}$ 为C-G系数，按约定为非负实数.

∵ $\Theta|j,m\rangle$ 相邻 m 的项之间会差 (-1) 倍的系数以保约定成立，考虑到 $J_{\pm}\Theta|j,m\rangle = -\hbar C_{\mp}^{(j,m)}\Theta|j,m\mp1\rangle$ 为正系数，可取

$$\Theta|j,m\rangle \propto (-1)^m|j,m\rangle$$

∴ $\Theta|j,m\rangle$ 与 $|j,-m\rangle$ 至多差一个包含 $(-1)^m$ 因子的相应因子.

可取为 $\Theta|j,m\rangle = e^{i\delta}(-1)^m|j,-m\rangle$，$\delta$ 不依赖于 m.

(b). $D(\hat{n},d\phi) = 1 - i\frac{d\phi}{\hbar}\hat{J}\cdot\hat{n}$

时反演　反之正，前系数共轭

$$\Theta D(\hat{n},d\phi)\Theta^{-1} = \Theta\left(1 - i\frac{\hat{J}\cdot\hat{n}}{\hbar}d\phi\right)\Theta^{-1} = \underline{1 + i\frac{\Theta\hat{J}\Theta^{-1}\hat{n}}{\hbar}}d\phi = 1 - i\frac{\hat{J}\cdot\hat{n}}{\hbar}d\phi$$

$$\therefore \Theta D(\hat{n},d\phi)|j,m\rangle = \Theta\left(1 - i\frac{d\phi}{\hbar}\hat{J}\cdot\hat{n}\right)|j,m\rangle$$

$$= \left(1 - i\frac{d\phi}{\hbar}\hat{J}\hat{n}\right)\Theta|j,m\rangle$$

$$= D(\hat{n},d\phi)\Theta|j,m\rangle$$

一般转动下，先考虑：$\Theta\exp[-\frac{i}{\hbar}J_y\phi]\Theta^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty}C_n\Theta(-\frac{i}{\hbar}J_y\phi)^n\Theta^{-1}$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}C_n\left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^n\Theta J_y^n\Theta^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty}C_n\left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^n(\Theta J_y\Theta^{-1})^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}C_n\left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^n(-J_y)^n = \sum_{n=0}^{\infty}C_n\left(-\frac{iJ_y\phi}{\hbar}\right)^n = \exp(-\frac{i}{\hbar}J_y\phi).$$

$$\therefore \Theta D(\hat{n},\phi)\Theta^{-1} = D(\hat{n},\phi)$$

$$\therefore \Theta D(\hat{n},\phi)|j,m\rangle = \Theta D(\hat{n},\phi)\Theta^{-1}\Theta|j,m\rangle = D(\hat{n},\phi)\Theta|j,m\rangle.$$

(c). ∵ $\Theta^2|j,m\rangle = \Theta\cdot e^{i\delta}(-1)^m|j,-m\rangle = e^{-i\delta}(-1)^m e^{i\delta}(-1)^{-m}|j,m\rangle = |j,m\rangle$

∴ $\Theta^2 = 1$ 即 $\Theta^{-1} = \Theta$ 则.

$D^{(j)}_{m'm}(R)$

$= \langle j,m'|\exp(\frac{-iJ\cdot\hat{n}\phi}{\hbar})|j,m\rangle$

$$D^{(j)}_{m'm}(R) = \langle j,m'|D(R)|j,m\rangle$$

$$= \langle j,m'|\Theta D(R)\Theta^{-1}|j,m\rangle$$

$$= \langle j,m'|\Theta D(R)e^{i\delta}(-1)^m|j,-m\rangle$$

$$= e^{-i\delta}(-1)^m\langle j,m'|\Theta\sum_{m''}|j,-m''\rangle\underline{\langle j,-m''|D(R)|j,-m\rangle}$$

$$= e^{-i\delta}(-1)^m\langle j,m'|\quad e^{i\delta}(-1)^{-m''}|j,m''\rangle D^{(j)*}_{-m'',-m}(R)$$

$$= e^{-i\delta}(-1)^m e^{i\delta}(-1)^{-m'}D^{(j)*}_{-m',-m}(R)$$

$$= (-1)^{m-m'}D^{(j)*}_{-m',-m}(R).$$

(d). 关于转动的性质都满足了，所以可自由地选取 $\delta=0$，

以及 $\Theta|j,m\rangle = (-1)^m|j,-m\rangle = i^{2m}|j,-m\rangle$

$$\Delta_n = E_n - E_n^{(0)}$$
$$= \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k\neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \cdots$$
$$V_{nk} = \langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle$$

谐振子：

$$\Delta_0 = V_{00} + \sum_{k\neq 0} \frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \cdots$$

$$\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}\, \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1}\, \delta_{n', n+1})$$

$$E_0^{(0)} - E_1^{(0)} = \hbar\omega$$

5.1 一个（一维）简谐振子受到一个微扰

$$\lambda H_1 = bx,$$

其中 b 是一个实常数.

(a) 计算基态的能移到最低的非零级.

(b) 严格求解这个问题，并与 (a) 中得到的结果比较. 可以不加证明地假定

$$\langle u_{n'} | x | u_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1}\, \delta_{n', n+1} + \sqrt{n}\, \delta_{n', n-1}).$$

(a) 基态二阶能量修正为：

$$\Delta_0 = E_0 - E_0^{(0)} = V_{00} + \sum_{k\neq 0} \frac{|V_{0k}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} = \langle 0^{(0)} | V | 0^{(0)} \rangle + \sum_{k\neq 0} \frac{|\langle 0^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$= 0 + \sum_{k\neq 0} \frac{|\langle 0^{(0)} | bx | k^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} = 0 + \frac{|\langle 0^{(0)} | bx | 1^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

$$= b^2 \frac{|\langle 0^{(0)} | x | 1^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}} = b^2 \frac{\cancel{\hbar}}{2m\omega} \cdot \frac{1}{\cancel{\hbar}\omega} = \frac{b^2}{2m\omega^2}$$

(b) $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \qquad \lambda H_1 = bx$

$$\therefore H = H_0 + \lambda H_1 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + bx = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x^2 + \frac{b}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{b^2}{2m\omega^2}$$

$$\therefore \quad E = E^{(0)} - \frac{b^2}{2m\omega^2}$$

$$\therefore \Delta = E - E^{(0)} = -\frac{b^2}{2m\omega^2}.$$ 即(a)结果是一致的

5.2 在非简并的时间无关的微扰论中，在微扰能量本征态（$|k\rangle$）中找到相应的无微扰本征态（$|k^{(0)}\rangle$）的概率是什么？求解这个问题至 g^2 级.

$$\because |k\rangle = |k^{(0)}\rangle + g \sum_{k\neq n} |n^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} + \cdots$$

$$\therefore \langle k^{(0)} | k \rangle = 1$$

$$\langle k | k \rangle = \left[\langle k^{(0)} | + g \sum_{k\neq n} \frac{V_{kn}^*}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \langle n^{(0)} | \right] \left[|k^{(0)}\rangle + g \sum_{k\neq n} |n^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} + \cdots \right]$$

$$= 1 + g^2 \sum_{k\neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} + O(g^3)$$

$$\therefore P = \frac{\langle k^{(0)} | k \rangle}{\langle k | k \rangle} = \left[1 + g^2 \sum_{k\neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} + O(g^3) \right]^{-1}$$

$$\approx 1 - g^2 \sum_{k\neq} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2}.$$

5.5 对（5.1.50）式给出的一维谐振子和一个额外的微扰 $V=\frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2 x^2$ 建立（5.1.54）式．证明其他所有的矩阵元 V_{k0} 为零．

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2.\qquad \text{微扰 } V=\frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2x^2.$$

$$|0\rangle=|0^{(0)}\rangle+\sum_{k\neq 0}|k^{(0)}\rangle\frac{V_{k0}}{E_0^{(0)}-E_k^{(0)}}+\cdots$$

$$\Delta_0=V_{00}+\sum_{k\neq 0}\frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)}-E_k^{(0)}}+\cdots$$

$$V_{k0}=\frac{\varepsilon m\omega^2}{2}\langle k|x^2|0\rangle=\frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2\frac{\hbar}{2m\omega}[\delta_{0k}+\sqrt{2}\delta_{2,k}]=\frac{\varepsilon}{4}\hbar\omega[\delta_{0k}+\sqrt{2}\delta_{2,k}]$$

相关矩阵元 $V_{00}=(\frac{\varepsilon m\omega^2}{2})\langle 0^{(0)}|x^2|0^{(0)}\rangle=\frac{\varepsilon\hbar\omega}{4}$

$$V_{20}=\left(\frac{\varepsilon m\omega^2}{2}\right)\langle 2^{(0)}|x^2|0^{(0)}\rangle=\frac{\varepsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}}$$

$$V_{k0}=0\quad(k\neq 0,2).$$