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 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}$ 给出。这为什么不破坏时间反演不变性？

解: (a) 哈密顿量在时间反演下不变即

$$\Theta H \Theta^{-1} = H \tag{1}$$

这代表 H 与 Θ 对易。因此对于一个能量本征态 $|E\rangle$ 有

$$H\Theta|E\rangle = \Theta H|E\rangle = E\Theta|E\rangle \tag{2}$$

这表明 $\Theta|E\rangle$ 也是 H 的一个本征值为 E 的本征态。由于系统是非简并的，$|E\rangle$ 与 $\Theta|E\rangle$ 代表了同一个态，至多差一个相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$。相应地，波函数 $\langle x'|E\rangle$ 与 $\langle \boldsymbol{x}'|\Theta|E\rangle$ 也至多相差一个相因子

$$\langle \boldsymbol{x}'|\Theta|E\rangle = \langle \boldsymbol{x}'|E\rangle^* = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\langle \boldsymbol{x}'|E\rangle \tag{3}$$

选取波函数

$$\psi_E(\boldsymbol{x}') = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\delta}{2}}\langle \boldsymbol{x}'|E\rangle \tag{4}$$

由于 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$ 是与 $\boldsymbol{x}'$ 无关的全局相因子，因此 $\psi_E(\boldsymbol{x}')$ 与 $\langle \boldsymbol{x}'|E\rangle$ 均是代表态 $|E\rangle$ 的波函数。波函数 $\psi_E(\boldsymbol{x}')$ 满足

$$\psi_E^*(\boldsymbol{x}') = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\delta}{2}}\langle \boldsymbol{x}'|E\rangle^* = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\delta}{2}}\langle \boldsymbol{x}'|E\rangle = \psi —— E(\boldsymbol{x}') \tag{5}$$

这说明 $\psi_E(\boldsymbol{x}')$ 是实的。

(b) 对于平面波的情形，其哈密顿量

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{6}$$

的具有非 0 本征值 $\boldsymbol{p}'$ 的本征波函数 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}$ 是简并的。因此时间反演不变性并不要求波函数总为实的。

4.10 (a) 用(4.4.53)式

$$\Theta \boldsymbol{J} \Theta^{-1} = -\boldsymbol{J} \tag{4.4.53}$$

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 $\Theta|j,m\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}(-1)^m|j,-m\rangle$，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 $\mathscr{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\mathrm{d}\varphi)$ 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 $\Theta|j,m\rangle = (-1)^m|j,-m\rangle = \mathrm{i}^{2m}|j,-m\rangle$.

解: (a) 由(4.4.53)式可知

$$\Theta J_z \Theta^{-1} = -J_z \tag{7a}$$

$$\Theta \boldsymbol{J}^2 \Theta^{-1} = (\Theta\boldsymbol{J}\Theta^{-1})\cdot(\Theta\boldsymbol{J}\Theta^{-1}) = \boldsymbol{J}^2 \tag{7b}$$

因此有对易/反对易关系

$$\Theta J_z = -J_z\Theta \tag{8a}$$
$$\Theta \boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{J}^2\Theta \tag{8b}$$

在式(8)右侧乘 $|j,m\rangle$ 可以得到

$$J_z\Theta|j,m\rangle = -m\hbar\Theta|j,m\rangle \tag{9a}$$
$$\boldsymbol{J}^2\Theta|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\Theta|j,m\rangle \tag{9b}$$

式(9)表明经时间演化算符作用后的态 $\Theta|j,m\rangle$ 是算符 $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 的共同本征态，本征值分别为 $j(j+1)\hbar^2$ 与 $-m\hbar$。这表明 $\Theta|j,m\rangle$ 与 $|j,-m\rangle$ 代表同一个态，仅相差一个与 j,m 有关的相因子

$$\Theta|j,m\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(j,m)}|j,-m\rangle \tag{10}$$

为了进一步确定 $\delta(j,m)$ 的具体形式，使用 $J_\pm$ 左乘式(10)

$$J_\pm\Theta|j,m\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(j,m)}J_\pm|j,-m\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(j,m)}\sqrt{j(j+1)-m(m\mp 1)}\hbar|j,-(m\mp 1)\rangle \tag{10$'$}$$

由式(4.4.53)自然可以得到

$$\Theta J_\pm = -J_\mp\Theta \tag{11}$$

故可以计算出式(10′)左侧

$$\begin{aligned}
J_\pm\Theta|j,m\rangle &= -\Theta J_\mp|j,m\rangle \\
&= -\sqrt{j(j+1)-m(m\mp 1)}\hbar\Theta|j,m\pm 1\rangle \\
&= -\sqrt{j(j+1)-m(m\mp 1)}\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(j,m\mp 1)}|j,-(m\mp 1)\rangle
\end{aligned} \tag{12}$$

对比(10′)与(12)可以得到

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(j,m)} = -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(j,m\mp 1)} \tag{13}$$

这说明

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta(j,m)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_j}(-1)^m \tag{14}$$

其中 δ_j 是一个不依赖于 m 的实相位。

(b) 在无穷小转动下 $\mathscr{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\mathrm{d}\varphi)$ 可以写为

$$\mathscr{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\mathrm{d}\varphi) = 1 - \mathrm{i}\frac{\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}}{\hbar}\mathrm{d}\varphi \tag{15}$$

在时间反演变换下

$$\begin{aligned}
\Theta\mathscr{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\mathrm{d}\varphi)\Theta^{-1} &= 1 - \Theta\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}}{\hbar}\mathrm{d}\varphi\Theta^{-1} \\
&= 1 + \mathrm{i}\frac{\Theta\boldsymbol{J}\Theta^{-1}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}}{\hbar}\mathrm{d}\varphi \\
&= 1 - \mathrm{i}\frac{\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}}{\hbar}\mathrm{d}\varphi = \mathscr{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\mathrm{d}\varphi)
\end{aligned} \tag{16}$$

(16)式可以推广到一般的转动算符 $\mathscr{D}(R)$，这代表转动算符 $\mathscr{D}(R)$ 与时间演化算符 Θ 是对易的

$$\mathscr{D}(R)\Theta = \Theta\mathscr{D}(R) \tag{17}$$

因此，在时间反演变换下

$$\Theta\mathscr{D}(R)|j,m\rangle = \mathscr{D}(R)\Theta|j,m\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_j}(-1)^m\mathscr{D}(R)|j,-m\rangle \tag{18}$$

(c) 教材(4.4.36)式给出性质

$$\langle\beta|O|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta O^\dagger\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle \tag{4.4.36}$$

取算符 O 为 $\mathscr{D}(R)^\dagger$，可以得到

$$\begin{aligned}\mathscr{D}^{(j)*}_{m',m}(R) &:= \langle j,m'|\mathscr{D}(R)|j,m\rangle^* = \langle j,m|\mathscr{D}(R)^\dagger|j,m'\rangle \\ &= \langle j,-m'|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_j}(-1)^{-m'}\Theta\mathscr{D}(R)\Theta^{-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_j}(-1)^m|j,-m\rangle \\ &= (-1)^{m-m'}\langle j,-m'|\mathscr{D}(R)|j,-m\rangle \\ &= (-1)^{m-m'}\mathscr{D}^{(j)}_{-m',-m}(R)\end{aligned} \tag{19}$$

其中用到了 (b) 中的结论(17)

$$\Theta\mathscr{D}(R)\Theta^{-1} = \mathscr{D}(R) \tag{17$'$}$$

(d) 升降算符 $J_\pm$ 将 $|j,m\rangle$ 与 $|j,m\pm1\rangle$ 之间相互联系起来，在考虑

$$J_\pm|j,m\rangle = c_\pm|j,m\pm1\rangle \tag{20}$$

中系数 $c_\pm$ 的相位时由于选取了 $c_\pm$ 为实数的约定，因此 j 相同的所有态 $\{|j,m'\rangle\}_{-j\leqslant m'\leqslant j}$ 均具备共同的相位。因此只需要考虑 $\Theta|j,m\rangle$ 与 $|j,m\rangle$ 间的相位差异即可。教材(4.4.56)式给出在时间反演变换下态 $|\psi\rangle$ 的波函数 $\psi(\boldsymbol{x}')$ 按如下规则变换

$$\psi(\boldsymbol{x}') \to \psi^*(\boldsymbol{x}') \tag{4.4.56}$$

因此，对于 $|j,m\rangle$ 态在时间反演下的波函数应有

$$\langle\boldsymbol{x}'|\Theta|j,m\rangle = \langle\boldsymbol{x}'|j,m\rangle^* = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_j}(-1)^m\langle\boldsymbol{x}'|j,-m\rangle \tag{21}$$

对于 $j=l$ 为整数的情况，波函数 $\langle\boldsymbol{x}'|l,m\rangle$ 即为球谐函数 $Y_l^m(\boldsymbol{x}')$。在符号约定中球谐函数满足

$$Y_l^{m*} = (-1)^m Y_l^m \tag{22}$$

这提示我们可以选取相位 $\delta_j \equiv 0$，这样就有

$$\Theta|j,m\rangle = (-1)^m|j,-m\rangle = \mathrm{i}^{2m}|j,-m\rangle \tag{23}$$

5.1 一个 (一维) 简谐振子受到一个微扰

$$H_1 = bx,$$

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

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

解: (a) 一维简谐振子的哈密顿量可以写为

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{24}$$

其能级由

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{25}$$

给出。在受到微扰作用 H_1 时，对应能级 E_n 的能移 Δ_n 由教材(5.1.42)式

$$\Delta_n = \langle n^0|H_1|n^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq n}\frac{\left|\langle k^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} + \cdots \tag{5.1.42}$$

给出。其中

$$\Delta_n^{(1)} := \langle n^0|H_1|n^{(0)}\rangle = b\,\langle n^0|x|n^{(0)}\rangle = 0 \tag{26a}$$

$$\begin{aligned}\Delta_n^{(2)} &:= \sum_{k\neq n}\frac{\left|\langle k^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} = b^2\sum_{k\neq n}\frac{\left|\langle k^{(0)}|x|n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\\ &= b^2\left(\frac{1}{E_n^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}}\times\frac{\hbar}{2m\omega}(n+1)+\frac{1}{E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}}\times\frac{\hbar}{2m\omega}n\right)\\ &= -\frac{b^2}{2m\omega}\end{aligned} \tag{26b}$$

分别为一级能移和二级能移。式(26)表明最低的非零级能移为 $\Delta_n^{(2)}$，因此能移

$$\Delta_n = -\frac{b^2}{2m\omega^2} \tag{27}$$

基态的能移由(27)式中 n 取 0 给出。

(b) 简谐振子的哈密顿量由

$$H' = H_0 + H_1 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + bx \tag{28}$$

给出。令

$$X = x + \frac{b}{m\omega^2}\,,\, x = X - \frac{b}{m\omega^2} \tag{29}$$

代入(28)中，可以将哈密顿量写为

$$H' = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2 - \frac{b^2}{2m\omega^2} \tag{28$'$}$$

并且可以验证哈密顿量(28′)中的算符 X 与 p 满足正则对易关系

$$[X,p] = [x,p] = \mathrm{i}\hbar \tag{30}$$

因此可以利用谐振子的升降算符方法解出哈密顿量(28′)对应的能谱

$$H'\,|n'\rangle = E_{n'}\,|n'\rangle\,,\, E_{n'} = \hbar\omega\left(n'+\frac{1}{2}\right) - \frac{b^2}{2m\omega^2} \tag{31}$$

其中 $n' = 0,1,2\ldots$ 为正整数。可以看到相较于一维谐振子，加入 H_1 的作用使得所有能级均下降了 $\Delta_n = -b/m\omega^2$。这与 (a) 中得到的结果(27)保持一致。

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。

解: 在教材(5.1.34)

$$|k\rangle = |k^{(0)}\rangle + \frac{\phi_k}{E_k^{(0)} - H_0} (\lambda V - \Delta_k) |k\rangle \tag{5.1.34}$$

中，算符

$$\frac{\phi_k}{E_k^{(0)} - H_0} = \sum_{n \neq k} |n^{(0)}\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle n^{(0)}| \tag{32}$$

将态矢映射到与 $|k^{(0)}\rangle$ 正交的子空间中，即

$$\langle k^{(0)}| \frac{\phi_k}{E_k^{(0)} - H_0} |\psi\rangle = \sum_{n \neq k} \langle k^{(0)}|n^{(0)}\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle n^{(0)}|\psi\rangle \equiv 0 \tag{33}$$

故

$$\langle k^{(0)}|k\rangle = \langle k^{(0)}|k^{(0)}\rangle = 1 \tag{34}$$

然而在(5.1.34)式中选取的 $|k\rangle$ 并没有归一化。为了计算相应的概率首先需要进行归一化处理。将 $|k\rangle$ 按 λ 的不同阶展开为教材(5.1.44)式

$$\begin{aligned}
|k\rangle &= |k^{(0)}\rangle + \lambda |k^{(1)}\rangle + \lambda^2 |k^{(2)}\rangle + O(\lambda^3) \\
&= |k^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{n \neq k} |n^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \\
&\quad + \lambda^2 \left(\sum_{n,l \neq k} |n^{(0)}\rangle \frac{V_{nl} V_{lk}}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})(E_k^{(0)} - E_l^{(0)})} - \sum_{n \neq k} |n^{(0)}\rangle \frac{V_{kk} V_{nk}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right) + O(\lambda^3)
\end{aligned} \tag{5.1.44}$$

其中

$$\langle k^{(0)}|k^{(1)}\rangle = \langle k^{(0)}|k^{(2)}\rangle = 0 \tag{35}$$

因此

$$\begin{aligned}
\langle k|k\rangle &= \langle k^{(0)}|k^{(0)}\rangle + \lambda \left(\langle k^{(0)}|k^{(1)}\rangle + \langle k^{(1)}|k^{(0)}\rangle \right) \\
&\quad + \lambda^2 \left(\langle k^{(0)}|k^{(2)}\rangle + \langle k^{(1)}|k^{(1)}\rangle + \langle k^{(2)}|k^{(0)}\rangle \right) + O(\lambda^3) \\
&= 1 + \lambda^2 \langle k^{(1)}|k^{(1)}\rangle + O(\lambda^3) \\
&= 1 + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} + O(\lambda^3)
\end{aligned} \tag{36}$$

因此待求概率为

$$P := \frac{\left|\langle k^{(0)}|k\rangle\right|^2}{\left|\langle k|k\rangle\right|^2} = 1 - 2\lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} + O(\lambda^3) \tag{37}$$

式(37)表明在微扰能量本征态 ($|k\rangle$) 中找到相应的无微扰本征态 ($|k^{(0)}\rangle$) 的概率会随着 λ 的增大以 λ^2 的速度减小。

5.5 对(5.1.50)式

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{5.1.50}$$

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

$$\begin{aligned} V_{00} &= \left(\frac{\varepsilon m\omega^2}{2}\right)\left\langle 0^{(0)}\left|x^2\right|0^{(0)}\right\rangle = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{4} \\ V_{20} &= \left(\frac{\varepsilon m\omega^2}{2}\right)\left\langle 2^{(0)}\left|x^2\right|0^{(0)}\right\rangle = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}} \end{aligned} \tag{5.1.54}$$

证明其他所有的矩阵元 V_{k0} 为零。

解: 在(5.1.50)式中无微扰本征态 $|n^{(0)}\rangle$ 就是一维谐振子的本征态。这里需要计算的是矩阵元

$$V_{k0} := \frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2 \langle k^{(0)}|x^2|0^{(0)}\rangle$$

在习题 2.14 中我们得到了

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a\right) \tag{38}$$

以及

$$\langle m^{(0)}|x^2|n^{(0)}\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} + n\delta_{m,n} + (n+1)\delta_{m,n}\right) \tag{39}$$

因此只有当 $m = n, n\pm 2$ 时 $\langle m^{(0)}|x^2|n^{(0)}\rangle$ 可能不为 0。这代表矩阵元 V_{k0} 只可能在 $k = 0$ 或 2 时取非零值，其中

$$V_{00} = \frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2 \times \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{4} \tag{40a}$$

$$V_{20} = \frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2 \times \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{2} = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}} \tag{40b}$$

这就是(5.1.54)式。