实用量子力学

上册

[德] S. 福里格 著

宋孝同 高琴 梁仙翠 译

人民教育出版社

实用量子力学

上　册

〔德〕S. 福里格　著

宋孝同　高琴　梁仙翠　译

理科阅览室

北京师范大学 1157101 图书馆 1082

内 容 简 介

本书根据福里格 (S. Flügge) 所著《Practical Quantum Mechanics》1974 年英文本译出. 原书分两卷 (合订为一册) 出版. 中译本分上、下两册出版. 上册即原书第一卷. 上册内容包括两部分: I. 一般概念, II. 无自旋的单体问题, 共 128 个问题. 下册即原书第二卷, 包括五部分: III. 具有自旋的粒子, IV. 多体问题, V. 非定态问题, VI. 相对论狄拉克方程, VII. 辐射理论, 共 91 个问题. 全部问题都作了详细解答.

本书可供我国高等学校物理专业高年级学生、研究生以及其他有关专业的教师和科研工作者参考.

S. Flügge

Practical Quantum Mechanics

Spinger-Verlag 1974

实 用 量 子 力 学

上 册

〔德〕S. 福里格 著

宋孝同 高琴 梁仙翠 译

人 民 教 育 出 版 社 出 版

新华书店北京发行所发行

西 安 新 华 印 刷 厂 印 装

开本 850×1168 1/32 印张 11 字数 265,000

1981 年 12 月第 1 版 1983 年 10 月第 1 次印刷

印数 00,001—10,000

书号 13012·0708 定价 1.45 元

序　言

本书在1947年以书名“量子理论的计算方法”用德文首次出版. 当时为了达到双重目的：帮助初学量子力学的学生以及从未用量子力学作为工具的实验科学家，掌握将普遍理论运用于原子物理学实际问题的方法. 从那时以来，已经写出了许多介绍普遍理论的杰出的书，这对于较为深入的理解是必不可少的. 然而在比较实用的方面，看来多少有些被忽视了，当然，对于大量的就专门问题进行详细讨论的专著不在此列. 换句话说，到目前为止似乎还没有一本书对量子力学的实际应用作过全面的介绍. 而这样一本书可能仍然是有用的.

正是为了填补这一空白，作者同意出版者的愿望，新版用英文写，这样，同先前的德文版相比，新版就能做到既反映最新的成就，又更便于供世界各国的科学家和学习科学的学生使用.

毫无疑问，本书从一开始就必须大加扩充. 新的近似方法和其他(特别是散射)方面的进展必须加进去. 看来有必要包括相对论量子力学，对于辐射理论至少也要作为波场量子化的一个例子加以简单介绍. 早先对问题的选择多少有些随便，而现在必须重新仔细考虑.

问题的数目差不多是原先德文版的两倍. 没有一个原来的问题是简单照搬过来的. 大约不超过50个问题是仅按早先的原文加以修改而成的. 大部分问题则是首次出现在本版中. 尽管如此，本版总的特点仍与原版相同，不过稍微倾向于在每一问题的末尾得出更为实用的结果和数值.

比较基础的问题，如方阱势，并未略去，而是稍加压缩. 德文

版中综述基础方程及其意义的引言部分(约 20 多页)已经删去，因为任何利用本书的学生对这些材料必定是很熟悉的. 另一方面，由于本书广泛运用特殊函数，因而有必要增加一个数学附录，其中收集并部分地推导了在问题中用到的那些数学公式. 书末索引中的数字是指所讨论的问题的号数而不是页数.

作　　者

1971 年 3 月

平装本序言

自从本书以两卷布面精装本出版以来，三年多过去了，本书受到许多国家科学家的欢迎，并且对学习物理学的学生非常有用，作者和出版者对此感到极为欣慰。但是由于精装本价格昂贵，使得将本书作为教科书的正式补充教材受到限制。因此作者愉快地接受了出版者的建议：发行价格低得多的一卷的斯普林格学生版。

作者和出版者非常希望本书将因此而得到更广泛的发行并将特别满足学生的需要。

作　　者

1974年9月

第 I 卷 目 录

I. 一般概念

1. 几率守恒定律 ……1
2. 薛定谔变分原理 ……2
3. 空间平均值的经典力学方程 ……5
4. 角运动(转动)的经典定律 ……6
5. 能量守恒定律 ……7
6. 厄密共轭 ……8
7. 厄密算符的构成 ……10
8. 算符的微商 ……12
9. 期待值的时间变化率 ……13
10. 薛定谔表象和海森伯表象 ……14
11. 与时间有关的哈密顿量 ……17
12. 重复测量 ……18
13. 曲线坐标 ……20
14. 动量空间波函数 ……21
15. 动量空间：周期和非周期波函数 ……23

II. 无自旋的单体问题

A. 一维问题 ……26
16. 力等于零的情况：基本解 ……26
17. 力等于零的情况：波包 ……29
18. 驻波 ……33
19. 被不透明壁分隔开的无限深势阱 ……36
20. 用狄拉克 δ 函数描述的不透明壁 ……40
21. 在狄拉克 δ 函数势壁上的散射 ……41
22. 在对称势垒上的散射 ……43

23. 在直角势垒上的散射 ……45
24. 反射的反演 ……48
25. 直角势阱 ……50
26. 处在两个壁之间的直角势阱 ……54
27. 虚能级 ……59
28. 周期势 ……64
29. 狄拉克梳状势 ……67
30. 谐振子 ……70
31. 希耳伯空间中的谐振子 ……74
32. 利用希耳伯空间算符构成谐振子本征函数 ……77
33. 谐振子的矩阵表示 ……79
34. 谐振子的动量空间波函数 ……82
35. 非谐振子 ……83
36. 近似波函数 ……87
37. 势阶 ……89
38. 普薛耳-特勒 (Pöschl-Teller) 势阱 ……93
39. 修正普薛耳-特勒势阱 ……97
40. 地球表面上空的自由落体 ……104
41. 加速电场 ……108
B. 不具有球对称性的两个或三个自由度的问题 ……110
42. 圆振子 ……110
43. 二维转子的斯塔克效应 ……113
44. 离化氢分子 ……115
45. 平面波的斜入射 ……120
46. 对称陀螺 ……123
C. 角动量 ……127
47. 无穷小转动 ……127
48. 在球极坐标中角动量分量的表示式 ……129
49. 角动量算符和拉普拉斯算符 ……131
50. 希耳伯空间的变换 ……133
51. 薛定谔表象中的对易子 ……134
52. 自旋为 1 的粒子 ……135

53. 角动量算符与张量算符的对易关系 ……137
54. 四极张量·球谐函数 ……139
55. 球谐函数的变换 ……142
56. 角动量分量的希耳伯空间的构成 ……144
57. 球谐函数的正交性 ……146
D. 球对称势 ……147
a) **束缚态** ……147
58. 角动量的期待值 ……149
59. 径向动量算符的构成 ……152
60. 邻近本征函数的解 ……155
61. 四极矩 ……157
62. 关闭在球内的粒子 ……159
63. 有限深方势阱 ……163
64. 伍德-萨克松(Wood-Saxon)势 ……165
65. 球谐振子 ……170
66. 球谐振子的简并度 ……172
67. 开普勒问题 ……175
68. 胡尔森(Hulthén)势 ……179
69. 克拉策尔(Kratzer)分子势 ……183
70. 莫尔斯(Morse)势 ……187
71. 莫尔斯公式的转动修正 ……191
72. 汤川势阱 ……194
73. X射线的同位素移动 ……196
74. μ 子原子的基态 ……198
75. 氘核的有心力模型 ……201
76. 有心力势的动量空间波函数 ……206
77. 有心力势的动量空间积分方程 ……208
78. 氢原子的动量空间波函数 ……210
79. 三维转子的斯塔克效应 ……211
b) **弹性散射问题** ……214
80. 入射波和散射波的干涉 ……214
81. 平面波的分波展开 ……216

82. 散射振幅的分波展开……219
83. 低能散射……222
84. 在恒定排斥势上的散射……224
85. 反常散射……229
86. 散射共振……231
87. 高角动量的贡献……236
88. 形状无关近似……238
89. 直角势阱: 低能散射……242
90. 低能散射和束缚态……245
91. 有硬心和没有硬心的氘核势……247
92. 有硬心和没有硬心的低能散射截面……249
93. 在修正普薛耳-特勒势阱上的低能散射……250
94. 径向积分方程……254
95. 许温格(Schwinger)变分原理……258
96. 对于分波相移的逐级近似……260
97. 卡洛盖罗 (Calogero) 方程……264
98. 卡洛盖罗方程的线性化……266
99. 负幂势的散射长度……267
100. 卡洛盖罗方程的二级近似……270
101. 方阱势: 散射长度……272
102. 汤川势的散射长度……275
103. 球谐函数级数收敛性的改进……278
104. 碰撞参数积分……279
105. 玻恩散射: 逐级近似步骤……282
106. 在汤川势上的散射……284
107. 在指数势上的散射……288
108. 在球对称电荷分布上的玻恩散射……292
109. 硬球: 高能散射……295
110. 卢瑟福散射公式……297
111. 库仑散射的分波展开……300
112. 反常散射……305
113. 索末菲-瓦特孙(Sommerfeld-Watson)变换……306

114. 雷杰(Regge)极点……308
E. 温侧-克喇末-布里渊 (WKB) 近似……311
115. 程函展开……311
116. 径向 WKB 解……313
117. 朗格(Langer)的 WKB 边界条件……315
118. 用 WKB 近似方法解谐振子问题……319
119. 均匀场的 WKB 本征值……321
120. WKB 近似法中的开普勒问题……323
121. 没有力场时的 WKB 相角……325
122. WKB 相角的计算……326
123. 用 WKB 方法计算库仑场的相角……327
124. 准势……330
F. 磁场……331
125. 磁场的引入……331
126. 有磁场存在时的流……334
127. 正常塞曼效应……336
128. 无自旋时顺磁和抗磁的磁化率……338

I. 一 般 概 念

问题1 几率守恒定律

如果归一化关系

$$\int d^3x\psi^*\psi=1 \tag{1.1}$$

是用几率理论解释的，则 $d^3x\psi^*\psi$ 是在体积元 d^3x 内找到所考虑的粒子的几率．这样必定存在一个守恒定律，试导出此定律，并作出经典解释．

解 所求的守恒定律必定具有如下的连续性方程的形式：

$$\operatorname{div} s+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0, \tag{1.2}$$

其中

$$\rho=\psi^*\psi \tag{1.3}$$

是几率密度，s 是几率流密度．由于 ρ 是 ψ 及其复共轭 ψ^* 的双线性形式，方程(1.2)只能由如下的两个薛定谔方程构成

$$H\psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t};\quad H\psi^*=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \tag{1.4}$$

它们具有相同的哈密顿算符

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r) \tag{1.5}$$

由(1.3)及(1.4)得到

$$\psi^*H\psi-\psi H\psi^*=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\rho}{\partial t}.$$

按照(1.2)，上式左边应当可以写成散度的形式．利用(1.5)，的确可以得到

$$\psi^*H\psi-\psi H\psi^*=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

因此只要规定

$$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*), \tag{1.6}$$

就得到所求的守恒定律.

经典解释如下: 如果对 ρ 和 $\boldsymbol{s}$ 都乘以粒子的质量 m, 则得到质量密度 ρ_m 和动量密度 $\boldsymbol{g}$:

$$\rho_m = m\rho;\ \boldsymbol{g} = m\boldsymbol{s}, \tag{1.7}$$

这样一来, 连续性方程可以解释为质量守恒定律. 同样, 如果乘以粒子的电荷 e, 则得到电荷密度 ρ_e 和电流密度 $\boldsymbol{j}$:

$$\rho_e = e\rho;\ \boldsymbol{j} = e\boldsymbol{s}, \tag{1.8}$$

这时(1.2)式就变成电荷守恒定律.

值得注意的是, 质量守恒定律和电荷守恒定律本质上是相同的, 这是因为两者都是由同一个粒子的流动所引起的.

由(1.6)和(1.7)可得出薛定谔场的总动量表示式为:

$$\boldsymbol{p} = \int d^3x\boldsymbol{g} = \frac{\hbar}{2i}\int d^3x(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*),$$

对上式第二项分部积分后, 可化为

$$\boldsymbol{p} = \int d^3x\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi \tag{1.9}$$

这表明, $\boldsymbol{p}$ 是动量算符 $\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)$ 在量子态 ψ 中的期待值 (参见问题3).

问题 2　薛定谔变分原理

试用对能量的变分原理代替薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi = E\psi. \tag{2.1}$$

解　微分方程(2.1)的任何解 ψ 均满足约束条件

$$\int d^3x\,\psi^*\psi=1, \tag{2.2}$$

因此用 ψ^* 乘(2.1)式，并对整个空间积分后就得到能量表示式

$$E=\int d^3x\psi^*\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\boldsymbol{r})\psi\right\}. \tag{2.3}$$

上式第一项分部积分后，再利用格林(Green)定理，则得

$$\int d^3x\psi^*\nabla^2\psi=\oint df\psi^*\nabla\psi-\int d^3x\nabla\psi^*\nabla\psi. \tag{2.4}$$

由于归一化积分 (2.2) 只有在 ψ 满足下述条件时才存在：即在 $r\to\infty$ 时，解 ψ 至少具有如下的渐近行为

$$\psi\propto r^{-\frac{3}{2}-\varepsilon};\quad \varepsilon>0,$$

然而，在这个条件下，当积分遍及一个无穷大的球体时，(2.4)式中的面积分为零，于是(2.3)式可以写为

$$E=\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V(\boldsymbol{r})\psi\right\}. \tag{2.5}$$

(2.5)式和归一化条件(2.2)式一样，对于函数 ψ 和 ψ^* 是完全对称的，因此同样可以由(2.1)式的复共轭式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*+V(\boldsymbol{r})\psi^*=E\psi^* \tag{2.1*}$$

导出(2.5)式.

不难证明，(2.1)式和(2.1*)式是在约束条件(2.2)下，对积分(2.5)取极值这一变分问题的欧勒方程. 然而，我们将不采用变分原理这一工具，而代之以直接的证明.

设 ψ_λ 是(2.1)式的属于本征值 E_λ 的解. 代入积分(2.5)，则给出的值是 E_λ. 现在我们用邻近函数 $\psi_\lambda+\delta\psi$ 代替 ψ_λ，其中 $|\delta\psi|$ 是小的，但却是任意的，唯一的限制是要求 $\psi_\lambda+\delta\psi$ 象 ψ_λ 一样满足(2.2)式，即

$$\int d^3x(\psi_\lambda^*+\delta\psi^*)(\psi_\lambda+\delta\psi)=1,$$

由此可得

$$\int d^3x(\psi_\lambda\delta\psi^*+\psi_\lambda^*\delta\psi)+\int d^3x\delta\psi^*\delta\psi=0. \tag{2.6}$$

将 $\psi_\lambda+\delta\psi$ 代入(2.5)式,则能量变为 $E_\lambda+\delta E_\lambda$. 而

$$\delta E_\lambda=\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\psi_\lambda^*\cdot\nabla\delta\psi+\nabla\psi_\lambda\cdot\nabla\delta\psi^*)+V(\psi_\lambda\delta\psi^*+\psi_\lambda^*\delta\psi)\right\}$$
$$+\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\delta\psi^*\cdot\nabla\delta\psi+V\delta\psi^*\delta\psi\right\}. \tag{2.7}$$

其中第一行是一级变化量，第二行是二级变化量. 利用分部积分法对第一行进行和前面[见(2.4)式]方向相反的运算,就可以回到 $\delta\psi\nabla^2\psi_\lambda^*$ 和 $\delta\psi^*\nabla^2\psi_\lambda$,再用(2.1)式和(2.1*)式消去含微商的项. 例如,我们得到

$$\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi_\lambda^*\cdot\nabla\delta\psi+V\psi_\lambda^*\delta\psi\right\}=E_\lambda\int d^3x\delta\psi\psi_\lambda^*,$$

利用(2.6)式,(2.7)式第一行可化为只含有二级变化量的贡献,最后得到:

$$\delta E_\lambda=\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\delta\psi|^2+(V-E_\lambda)|\delta\psi|^2\right\}. \tag{2.8}$$

由于在上式中没有 $\delta\psi$ 或 $\delta\psi^*$ 的一次项，因此对于 $\delta\psi=0$(也就是说,当 ψ_λ 是薛定谔方程的解时),E_λ 显然是一个极大值或极小值. 至于是极大值还是极小值,将取决于(2.8)式的符号.

为了对上述问题有较深入的理解，我们用 (2.1) 式的一组解 $\{\psi_m\}$构成一个完备的正交函数系,

$$\int d^3x\psi_\mu^*\psi_\nu=\delta_{\mu\nu}. \tag{2.9}$$

然后用它将 $\delta\psi$ 展开:

$$\delta\psi=\sum_\nu C_\nu\psi_\nu. \tag{2.10}$$

代入(2.8)式,则得

$$\delta E_\lambda=\sum_\mu\sum_\nu C_\mu^*C_\nu\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi_\mu^*\cdot\nabla\psi_\nu+(V-E_\lambda)\psi_\mu^*\psi_\nu\right\}$$
$$=\sum_\mu\sum_\nu C_\mu^*C_\nu\int d^3x\psi_\mu^*\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_\nu+(V-E_\lambda)\psi_\nu\right\}$$

利用(2.1)式和(2.9)式,则上式化为:

$$\delta E_\lambda = \sum_\mu |C_\mu|^2 (E_\mu - E_\lambda). \tag{2.11}$$

如果 E_λ 是基态能量，则对于所有的态 μ，均有 $E_\mu \gg E_\lambda$，因而(2.11)式的总和是正的. 因此变分原理给出的 E_λ 就是一个极小值. 对于激发态，不能建立这样的一般规则，因为这时(2.11)式的求和项中有正有负.

问题 3　空间平均值的经典力学方程

证明经典力学中牛顿的基本方程(其中 $\boldsymbol{p}$ 是粒子的动量，$\boldsymbol{F}$ 是作用于粒子上的力)，

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{F}, \tag{3.1}$$

在量子力学中对于相应算符的空间平均值(期待值)仍然成立.

解　如果力 $\boldsymbol{F}$ 是由势导出的，$\boldsymbol{F} = -\nabla V$，而动量用算符 $\frac{\hbar}{i}\nabla$ 代替，则(3.1)式中两个空间平均值定义如下

$$\boldsymbol{p} = \frac{\hbar}{i}\int d^3x\, \psi^* \nabla \psi; \tag{3.2}$$

$$\boldsymbol{F} = -\int d^3x \psi^* (\nabla V)\psi. \tag{3.3}$$

现在的问题在于证明：如果 ψ 和 ψ^* 满足薛定谔方程

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi; \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*, \end{aligned}\right\} \tag{3.4}$$

则积分(3.2)和(3.3)满足(3.1)式.

首先将(3.2)式对时间求微商：

$$\dot{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\int d^3x (\dot{\psi}^* \nabla\psi + \psi^* \nabla\dot{\psi}) = \frac{\hbar}{i}\int d^3x (\dot{\psi}^*\nabla\psi - \dot{\psi}\nabla\psi^*)$$

上式中第二项分部积分后给出的面积分趋于零，因此已略去. 将(3.4)的 $\dot{\psi}$ 与 $\dot{\psi}^*$ 代入上式后可得

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x(\nabla^2\psi^*\nabla\psi+\nabla^2\psi\nabla\psi^*)$$

$$+\int d^3x(\psi^*V\nabla\psi+V\psi\nabla\psi^*)\ . \tag{3.5}$$

利用分部积分

$$\int d^3x\nabla^2\psi^*\nabla\psi = -\int d^3x\nabla\psi^*\nabla^2\psi$$

可见(3.5)式第一个积分中的两项相互抵消，对第二个积分的第二项作一次分部积分后，则得

$$\dot{\boldsymbol{p}} = \int d^3x\psi^*\{V\nabla\psi-\nabla(V\psi)\}.$$

利用等式

$$\nabla(V\psi) = V\nabla\psi+\psi\nabla V,$$

最后得到

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\int d^3x\psi^*(\nabla V)\psi = \boldsymbol{F},$$

即得所证.

问题 4　角运动(转动)的经典定律

证明角动量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 与力矩 $\boldsymbol{T}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}$(其中 $\boldsymbol{p}$ 代表线动量，$\boldsymbol{F}$ 代表力)所满足的经典关系式

$$\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = \boldsymbol{T}, \tag{4.1}$$

在量子力学中对于空间平均值仍然成立.

解　与问题 3 的做法相同，先定义两个空间平均值

$$\boldsymbol{L} = \frac{\hbar}{i}\int d^3x\psi^*(\boldsymbol{r}\times\nabla)\psi \tag{4.2}$$

和

$$\boldsymbol{T} = -\int d^3x\psi^*(\boldsymbol{r}\times\nabla V)\psi. \tag{4.3}$$

并假设波函数 ψ 和 ψ^* 满足薛定谔方程(3.4)式.

将(4.2)式对时间求微商：

$$\dot{\boldsymbol{L}}=\frac{\hbar}{i}\int d^3x\,\{\dot{\psi}^*(\boldsymbol{r}\times\nabla\psi)+\psi^*(\boldsymbol{r}\times\nabla\dot{\psi})\}.$$

对第二项，利用恒等式

$$\psi^*\nabla\dot{\psi}=\nabla(\psi^*\dot{\psi})-\dot{\psi}\nabla\psi^*,$$

然后对上式中的第一项，利用一般的矢量公式

$$\int d^3x\boldsymbol{r}\times\nabla f=0 \tag{4.4}$$

以及 $f=\psi^*\dot{\psi}$，就可得到

$$\dot{\boldsymbol{L}}=\frac{\hbar}{i}\int d^3x\,\boldsymbol{r}\times(\dot{\psi}^*\nabla\psi-\dot{\psi}\nabla\psi^*)$$

再将(3.4)式的 $\dot{\psi}$ 与 $\dot{\psi}^*$ 代入上式：

$$\dot{\boldsymbol{L}}=-\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\,\boldsymbol{r}\times(\nabla^2\psi^*\nabla\psi+\nabla^2\psi\nabla\psi^*)$$

$$+\int d^3x V\boldsymbol{r}\times(\psi^*\nabla\psi+\psi\nabla\psi^*). \tag{4.5}$$

在第一个积分中，括号内

$$\nabla^2\psi^*\nabla\psi+\nabla^2\psi\nabla\psi^*=\nabla(\nabla\psi^*\nabla\psi)$$

是标量函数 $f=\nabla\psi^*\nabla\psi$ 的梯度，因而由 (4.4) 知此积分为零．在(4.5)式的第二个积分中，括号内等于 $\nabla(\psi^*\psi)$，再利用恒等式

$$V\nabla(\psi^*\psi)=\nabla(V\psi^*\psi)-\psi^*\psi(\nabla V)$$

然后对 $f=V\psi^*\psi$ 再利用矢量公式(4.4)，最后积分变为

$$\int d^3x\,\boldsymbol{r}\times[V\nabla(\psi^*\psi)]=-\int d^3x\,\boldsymbol{r}\times(\psi^*\psi\nabla V),$$

上式右边就是力矩的平均值(4.3)，即得所证。

问题 5　能量守恒定律

如果薛定谔波场的能量用问题 2 的空间积分(2.5)来表示，则能量守恒定律应取如下形式

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\operatorname{div}\boldsymbol{S}=0\,. \tag{5.1}$$

其中 W 是能量密度，S 是能流矢量．试导出此定律并确定能流矢量 S.

解 (2.5)式可写为

$$E=\int d^3x\,W \tag{5.2}$$

其中

$$W=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V\psi, \tag{5.3}$$

这里第一项是动能密度，第二项是势能密度．按(5.1)式，我们需要求出W对 t 的微商，由(5.3)得

$$\dot{W}=\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\dot{\psi}^*\nabla\psi+\nabla\psi^*\nabla\dot{\psi})+V(\dot{\psi}^*\psi+\psi^*\dot{\psi}). \tag{5.4}$$

利用

$$\begin{cases}\nabla\dot{\psi}^*\nabla\psi=\nabla(\dot{\psi}^*\nabla\psi)-\dot{\psi}^*\nabla^2\psi\\ \nabla\psi^*\nabla\dot{\psi}=\nabla(\dot{\psi}\nabla\psi^*)-\dot{\psi}\nabla^2\psi^*\end{cases}$$

我们可以将(5.4)的动能部分改写成三项，得到

$$\dot{W}=\nabla\left\{\frac{\hbar^2}{2m}(\dot{\psi}^*\nabla\psi+\dot{\psi}\nabla\psi^*)\right\}-\frac{\hbar^2}{2m}\dot{\psi}^*\nabla^2\psi$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\dot{\psi}\nabla^2\psi^*+\dot{\psi}^*V\psi+\dot{\psi}V\psi^*. \tag{5.5}$$

利用薛定谔方程(3.4)，可将上式后面四项中的空间微商和势能用时间微商来代替，结果得到

$$\dot{\psi}^*\left(-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}\right)+\dot{\psi}\left(\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}^*\right)=0$$

正好相互抵消．因此只要规定

$$S=-\frac{\hbar^2}{2m}(\dot{\psi}^*\nabla\psi+\dot{\psi}\nabla\psi^*)$$

是能通量矢量，则(5.5)的确具有(5.1)的形式．

问题6 厄密共轭

一个算符 Ω 的厄密共轭算符 $\Omega^\dagger$ 定义如下

$$\int d\tau(\Omega\psi)^*\varphi=\int d\tau\psi^*\Omega^\dagger\varphi \tag{6.1a}$$

或者,用希耳伯空间记号

$$\langle\Omega\psi|\varphi\rangle=\langle\psi|\Omega^\dagger\varphi\rangle \tag{6.1b}$$

其中 ψ 和 φ 是两个满足下面归一化条件的任意函数

$$\langle\psi|\psi\rangle=1;\ \langle\varphi|\varphi\rangle=1. \tag{6.2}$$

试将这一定义用矩阵关系式表示出来. 对于由 $\Omega=\Omega^\dagger$ 定义的厄密算符,其本征值有何特点?

解 一个算符的矩阵是对于一个完备的正交归一化函数系 $\{u_\nu\}$来定义的:

$$\langle u_\nu|u_\mu\rangle=\delta_{\mu\nu}. \tag{6.3}$$

任意的归一化函数 ψ 和 φ 可以展开为

$$\psi=\sum_\nu a_\nu u_\nu,\quad \varphi=\sum_\mu b_\mu u_\mu. \tag{6.4}$$

将(6.4)代入(6.1),则得

$$\sum_\mu\sum_\nu a_\nu^* b_\mu\langle\Omega u_\nu|u_\mu\rangle=\sum_\mu\sum_\nu a_\nu^* b_\mu\langle u_\nu|\Omega^\dagger u_\mu\rangle$$

由于假设上式对任意一对 ψ、φ 都成立,因此对每一项必定分别地成立

$$\langle\Omega u_\nu|u_\mu\rangle=\langle u_\nu|\Omega^\dagger u_\mu\rangle. \tag{6.5}$$

现在我们用函数系 $\{u_\nu\}$来定义矩阵,将(6.5)式右边写为

$$\langle u_\nu|\Omega^\dagger|u_\mu\rangle=(\Omega^\dagger)_{\mu\nu}.$$

左边可以改写为

$$\langle\Omega u_\nu|u_\mu\rangle=\int d\tau(\Omega u_\nu)^* u_\mu=\left\{\int d\tau\, u_\mu^*(\Omega u_\nu)\right\}^*$$

$$=\langle u_\mu|\Omega u_\nu\rangle^*=\Omega_{\nu\mu}^*$$

因此,由(6.5),对于 Ω 和 $\Omega^\dagger$ 的矩阵元得到

$$(\Omega^\dagger)_{\mu\nu}=\Omega_{\nu\mu}^*, \tag{6.6}$$

即厄密共轭(或伴随)矩阵 $\Omega^\dagger$ 的元素是由矩阵 Ω 的元素取转置($\mu\rightleftarrows\nu$)后,再取复共轭得到的.

由(6.6)立即可得 $\Omega^{\dagger\dagger}=\Omega$.

对于一个由 $\Omega^{\dagger}=\Omega$ 定义的厄密(或自伴)矩阵 Ω, 按照(6.6), 有

$$\Omega_{\mu\nu}=\Omega^{*}_{\nu\mu}. \tag{6.7}$$

当 $\mu=\nu$ 时, 上式表明对角元素是实的. 这一结论对于任意正交归一化函数系(即对于希耳伯空间的任意坐标系)都适用, 因此如果我们选取$\{u_\nu\}$使

$$\Omega_{\mu\nu}=\omega_\mu\delta_{\mu\nu}, \tag{6.8}$$

即 Ω 是一个本征值为 ω_μ 的对角矩阵, 上述结论仍然成立. 这表明厄密矩阵的本征值是实数.

注 上述结果表明所有相应于物理量(可观察量)的算符都是厄密算符.

问题7 厄密算符的构成

试将经典量 xp_x 转变为量子力学的算符.

解 a) 算符 x 和 p_x 并不对易, 它们满足对易关系

$$p_x x-xp_x=\frac{\hbar}{i}, \tag{7.1}$$

由于在薛定谔表象中

$$p_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \tag{7.2}$$

因此(7.1)式是显而易见的.

我们期望每一个如下的算符

$$\Omega=(1-\alpha)xp_x+\alpha p_x x \tag{7.3}$$

都相应于经典量 xp_x. 先假设 α 是实数. α 的值必须这样来确定, 即在用波函数 ψ 描述的任意量子态中, Ω 的期待值是实数:

$$\langle\Omega\rangle=\int d^3x\,\psi^*\Omega\psi=\text{实数}. \tag{7.4}$$

将(7.3)代入上式, 利用(7.2), 则得

$$\langle\Omega\rangle=\frac{\hbar}{i}\int d^3x\psi^*\left\{(1-\alpha)\,x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\alpha\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int d^3x \psi^* \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha \psi \right).$$

将 ψ 分成实部和虚部

$$\psi = f + ig$$

代入后，则得

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\hbar}{i} \int d^3x \left\{ x \left(f \frac{\partial f}{\partial x} + g \frac{\partial g}{\partial x} \right) + 2(f^2 + g^2) \right\}$$
$$+ \hbar \int d^3x \, x \left(f \frac{\partial g}{\partial x} - g \frac{\partial f}{\partial x} \right).$$

第二个积分是实的．第一个积分是纯虚数，按照(7.4)，它必须是零．因为

$$\int d^3x (f^2 + g^2) = 1$$

由第一个积分等于零得出

$$\frac{1}{2} \int d^3x \, x \frac{\partial}{\partial x} (f^2 + g^2) = -\alpha$$

分部积分后得

$$\alpha = \frac{1}{2} \tag{7.5}$$

因此对称化组合

$$\Omega = \frac{1}{2} (x p_x + p_x x) \tag{7.6}$$

是正确的算符，因为它是厄密的．

如果我们允许 α 是复数，则任何带有实 β 的

$$\alpha = \frac{1}{2} + i\beta \tag{7.7}$$

都是可用的，因为

$$\Omega = \frac{1}{2} (x p_x + p_x x) + i\beta (p_x x - x p_x) \tag{7.8}$$

其中第一项，上面已证明过其期待值是实数，第二项由于对易关系(7.1)，变为和特定量子态无关的实常数 $\beta\hbar$．因此第二项在物理上无关紧要，可以略去．

b) 一个算符的厄密性可以同样好地用下式来定义

$$\langle u|\Omega v\rangle=\langle \Omega u|v\rangle \tag{7.9a}$$

或更详细地写为

$$\int d^3x u^*\Omega v=\int d^3x(\Omega u)^*v \tag{7.9b}$$

其中 u, v 是两个任意复函数，唯一的限制是上述积分存在. 用(7.3)的算符 Ω 代入上式，并设 α 是实数，则有

$$\frac{\hbar}{i}\int d^3x\,u^*\left[(1-\alpha)x\frac{\partial v}{\partial x}+\alpha\frac{\partial(xv)}{\partial x}\right]$$

$$=-\frac{\hbar}{i}\int d^3x\left[(1-\alpha)x\frac{\partial u^*}{\partial x}+\alpha\frac{\partial(xu^*)}{\partial x}\right]v$$

或

$$\int d^3x\,u^*\left[x\frac{\partial v}{\partial x}+\alpha v\right]=-\int d^3x\left[x\frac{\partial u^*}{\partial x}+\alpha u^*\right]v.$$

移项合并后给出

$$\int d^3x\,x\frac{\partial}{\partial x}(u^*v)=-2\alpha\int d^3x\,u^*v$$

左边分部积分后，上式化为

$$-\int d^3x\,u^*v=-2\alpha\int d^3x\,u^*v$$

由此再次得到 $\alpha=\frac{1}{2}$.

问题 8　算符的微商

设 $f(p,x)$ 是算符 p_k, x_k 的整函数，试由对易规则导出一般的关系式

$$\frac{\partial f}{\partial x_k}=-[f,p_k] \tag{8.1}$$

和

$$\frac{\partial f}{\partial p_k}=[f,x_k], \tag{8.2}$$

其中缩写记号是

$$[f,g]=\frac{i}{\hbar}(fg-gf).$$

解 对易规则是

$$[p_k, p_l]=0;\quad [x_k, x_l]=0;\quad [p_k, x_l]=\delta_{kl}. \tag{8.3}$$

现在我们利用这些规则通过下面的四个步骤证明 (8.1) 和 (8.2) 式:

1. 设 $f=p_l$, 则 $\partial f/\partial x_k=0$, $\partial f/\partial p_k=\delta_{kl}$. 因此(8.1)和(8.2)式变为$[p_k, p_l]=0$和$[p_l, x_k]=\delta_{kl}$, 即按照(8.3), (8.1), (8.2)都是成立的. 同样, 对于 $f=x_l$, $\partial f/\partial x_k=\delta_{kl}$, $\partial f/\partial p_k=0$, 它们显然也是成立的.

2. 设(8.1)和(8.2)对两个函数 f 和 g 成立, 则它们对 f 和 g 的任意线性组合 C_1f+C_2g 也成立(其中 C_1, C_2 是任意复数), 这是由于(8.1)和(8.2)对于 f 或 g 是线性的.

3. 如果(8.1)和(8.2)对 f 和 g 成立, 则对于乘积 fg 也成立. 例如, 不难用直接计算验证(8.1):

$$\frac{\partial}{\partial x_k}(fg)=f\frac{\partial g}{\partial x_k}+\frac{\partial f}{\partial x_k}g=-\{f[g, p_k]+[f, p_k]g\}$$

$$=-\frac{i}{\hbar}\{fgp_k-fp_kg+fp_kg-p_kfg\}=-[fg, p_k]$$

中间两项互相消去. 用类似的计算不难证明(8.2)式.

4. 因此对于任意个 p_k 和 x_k 乘积的任意线性组合, 即对于 p_k, x_k 的任意整函数, (8.1)和(8.2)式成立. 即得所证.

问题 9 期待值的时间变化率

设$\langle A\rangle$是一个不显含时间的算符在和时间有关的态 ψ 中的期待值. 问$\langle A\rangle$如何随时间变化? $\langle x_k\rangle$和$\langle p_k\rangle$又如何?

解 期待值

$$\langle A\rangle=\langle\psi|A|\psi\rangle=\int d\tau\psi^*(t)A\psi(t) \tag{9.1}$$

的时间变化率是

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\int d\tau\{\dot{\psi}^*A\psi+\psi^*A\dot{\psi}\}. \tag{9.2}$$

ψ 和 ψ^* 对时间的微商满足薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}=H\psi;\ \frac{\hbar}{i}\dot{\psi}^*=H^\dagger\psi^* \tag{9.3}$$

其中哈密顿算符 H 是厄密的：$H=H^\dagger$. 将(9.3)代入(9.2)，得

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\frac{i}{\hbar}\int d\tau\{(H^\dagger\psi^*)A\psi-\psi^*AH\psi\}$$

或用希耳伯空间的记号，

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\frac{i}{\hbar}\{\langle H\psi|A\psi\rangle-\langle\psi|AH\psi\rangle\}. \tag{9.4}$$

对上式第一项，利用恒等式(参见(6.1b)式)

$$\langle\Omega\psi|\varphi\rangle=\langle\psi|\Omega^\dagger\varphi\rangle$$

或

$$\langle H\psi|A\psi\rangle=\langle\psi|H^\dagger A\psi\rangle=\langle\psi|HA\psi\rangle.$$

则(9.4)式化为

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle\psi|HA-AH|\psi\rangle \tag{9.5}$$

或简单地写为

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\langle[H,\ A]\rangle. \tag{9.6}$$

将(9.6)式应用于特殊的算符 $A=x_k$ 和 $A=p_k$，并利用(8.1)和(8.2)式，则得

$$\frac{d}{dt}\langle x_k\rangle=\left\langle\frac{\partial H}{\partial p_k}\right\rangle;\ \frac{d}{dt}\langle p_k\rangle=-\left\langle\frac{\partial H}{\partial x_k}\right\rangle \tag{9.7}$$

这表明经典力学的正则方程对于期待值是适用的.

问题 10　薛定谔表象和海森伯表象

在希耳伯空间坐标系中以如下方式选择所谓薛定谔表象：算符 p_k, q_k 与时间无关，而态矢量 ψ 与时间有关并满足薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}=H\psi \tag{10.1}$$

其中 $H(p_k, q_k)$ 是体系的哈密顿量. 如果 H 不明显地与时间有关,试证明：经过一个幺正变换 $U(t)$ 可以得到一个"转动"的希耳伯坐标系,在这个系统中态矢量与时间无关(海森伯表象),而算符 p_k, q_k 随时间的变化满足下列正则方程

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}; \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p_k} \tag{10.2}$$

解 设所有与时间无关的算符用上角标 $^\circ$ 表示，并规定由于海森伯参考系"转动"使坐标系开始变化的时刻为 $t=0$. 则任一海森伯算符 $\Omega(t)$ 在 $t=0$ 时和它的薛定谔形式一致, $\Omega(0)=\Omega^\circ$.

因此，薛定谔系统中的态矢量 $\psi(t)$ 和海森伯系统中的 ψ° 有如下关系

$$\psi(t) = U(t)\psi^\circ. \tag{10.3}$$

必须指出,在归一化的范围内,$\psi(0)=\psi^\circ$ 的选择仍然是自由的. 归一化条件是

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \text{ 和 } \langle\psi^\circ|\psi^\circ\rangle = 1 \tag{10.4}$$

这使得 U 必须是一个满足

$$U^\dagger U = I \tag{10.5}$$

的幺正算符. 因为当且仅当上式成立时，

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle U\psi^\circ|U\psi^\circ\rangle = \langle\psi^\circ|U^\dagger U|\psi^\circ\rangle$$

才能等于 $\langle\psi^\circ|\psi^\circ\rangle$.

将(10.3)代入(10.1),则可以决定算符 U,

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{U} = H^\circ U \tag{10.6}$$

这里我们已经谨慎地用 H° 代替了 H，因为在薛定谔系统中,(10.1)中所用的算符与时间无关，微分方程(10.6)满足初始条件 $U(0)=1$ 的解是

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H^\circ t} \tag{10.7}$$

其中指数函数应理解为它的幂级数展开.

薛定谔表象中的算符 $\Omega(t)$ 和海森伯表象中的算符 Ω° 必须有如下关系

$$\langle\psi(t)|\Omega^\circ|\psi(t)\rangle=\langle\psi^\circ|\Omega(t)|\psi^\circ\rangle \tag{10.8}$$

即算符的期待值应与所取的表象系统无关. 由于

$$\langle\psi|\Omega^\circ|\psi\rangle=\langle U\psi^\circ|\Omega^\circ|U\psi^\circ\rangle=\langle\psi^\circ|U^\dagger\Omega^\circ U|\psi^\circ\rangle,$$

可见,当且仅当

$$\Omega(t)=U^\dagger(t)\Omega^\circ U(t) \tag{10.9}$$

时,(10.8)式才成立.

必须指出,按照(10.7),算符 H° 与 U 对易,因此

$$H(t)=U^\dagger H^\circ U=U^\dagger U H^\circ=H^\circ$$

即 H 在上述变换下不变. 因此没有必要用两个不同的符号, H° 和 H,这表明(10.1)的写法是正确的.

现在,为了证明正则方程(10.2),我们将(10.9)对时间求微商,

$$\dot\Omega=\dot U^\dagger\Omega^\circ U+U^\dagger\Omega^\circ\dot U. \tag{10.10}$$

由(10.1)的厄密共轭方程

$$+\frac{\hbar}{i}\dot\psi^\dagger=H\psi^\dagger \tag{10.1a}$$

(因为 $H=H^\dagger$ 是厄密算符),类似于(10.6),我们得到

$$+\frac{\hbar}{i}\dot U^\dagger=HU^\dagger \tag{10.6a}$$

因此将(10.6)与(10.6a)代入(10.10)后得到:

$$\dot\Omega=\frac{i}{\hbar}\{HU^\dagger\Omega^\circ U-U^\dagger\Omega^\circ HU\}=\frac{i}{\hbar}(H\Omega-\Omega H), \tag{10.11}$$

这是一个重要的定律:一个不明显与时间有关的算符 Ω 的时间微商是它和哈密顿算符的对易子:

$$\left.\begin{aligned}&[H,\ \Omega]=\frac{i}{\hbar}(H\Omega-\Omega H);\\&\dot\Omega=[H,\ \Omega].\end{aligned}\right\} \tag{10.12}$$

将上述定律用于算符 p_k 和 q_k 时，直接得到

$$\dot{p}_k=[H,\ p_k];\quad \dot{q}_k=[H,\ q_k] \tag{10.13}$$

利用问题 8 中导出的关系式(8.1)和(8.2)，可得

$$[H,\ p_k]=-\frac{\partial H}{\partial q_k};\quad [H,\ q_k]=\frac{\partial H}{\partial p_k}, \tag{10.14}$$

将上式代入(10.13)，即得正则方程(10.2)。

注 上面已经假设，在薛定谔系统中，不但算符 Ω 而且哈密顿量 H 也与时间无关. 如果 H 与时间有关，将出现对时间的偏微商，全部公式将变得较为复杂. 例如 $U(t)$将不再是一个简单的指数函数，因为在幂展开式中 H 将在不同的时刻出现.

问题 11　与时间有关的哈密顿量

设在问题 10 中的 H 明显地与时间有关（例如在交变电场的作用下)、试确定在这种比较普遍情况下的幺正算符 $U(t)$.

解　即使对于哈密顿量 $H(p_k,\ q_k;\ t)$，我们仍然有薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}=H(t)\psi(t) \tag{11.1}$$

这时，变换到海森伯坐标是通过如下幺正算符 $U(t)$ 来完成的，

$$\psi(t)=U(t)\psi^{\circ} \tag{11.2}$$

而 $U(t)$满足微分方程

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{U}=H(t)U(t) \tag{11.3}$$

和初始条件

$$U(0)=1. \tag{11.4}$$

为简单起见，令

$$-\frac{i}{\hbar}=\varkappa \tag{11.5}$$

则

$$\dot{U}=\varkappa HU$$

上式满足初始条件(11.4)的解是一个无穷级数

$$U(t)=1+\varkappa\int_0^t dt'H(t')+\varkappa^2\int_0^t dt'H(t')\int_0^{t'}dt''H(t'')$$
$$+\varkappa^3\int_0^t dt'H(t')\int_0^{t'}dt''H(t'')\int_0^{t''}dt'''H(t''')+\cdots \quad (11.6)$$

要验证这一点并不困难，只要将上式对时间求微商即可：

$$\dot{U}(t)=\varkappa H(t)+\varkappa^2 H(t)\int_0^t dt''H(t'')$$
$$+\varkappa^3 H(t)\int_0^t dt''H(t'')\int_0^{t''}dt'''H(t''')\cdots$$
$$=\varkappa H(t)\Big\{1+\varkappa\int_0^t dt''H(t'')$$
$$+\varkappa^2\int_0^t dt''H(t'')\int_0^{t''}dt'''H(t''')+\cdots\Big\}$$
$$=\varkappa H(t)U(t).$$

必须指出，在积分中 $t>t'>t''>t'''>\cdots>0$，因此不同时刻 t 的 H 因子构成一个时序乘积，其中较迟的因子总是写在较早的因子的前面.

问题 12 重复测量

一体系的哈密顿量 H 与时间无关，而 H 具有属于非简并本征值 $\hbar\omega_\nu$ 的本征矢 $|\nu\rangle$：

$$H|\nu\rangle=\hbar\omega_\nu|\nu\rangle. \quad (12.1)$$

设可观察量 A 在同一个希耳伯空间中同样地由非简并本征值问题

$$A|n\rangle=a_n|n\rangle \quad (12.2)$$

来定义. 设开始时体系处于状态 $|\nu\rangle$，这时对此体系的可观察量 A 进行测量. 问 A 的期待值是多少？ 又这一测量给出 A 的值为 a_m 的几率多大？ ——如果测量给出值 a_m，并且在经过时间间隔 t 以后再重复测量，问再次测得 a_m 的几率是多少？

解 在初态中 A 的期待值是 $\langle\nu|A|\nu\rangle$. 利用展开式

$$|\nu\rangle=\sum_n|n\rangle\langle n|\nu\rangle;\quad \langle\nu|=\sum_{n'}\langle\nu|n'\rangle\langle n'|$$

则得

$$\langle\nu|A|\nu\rangle=\sum_{nn'}\langle\nu|n'\rangle\langle n'|A|n\rangle\langle n|\nu\rangle.$$

由于

$$\langle n'|A|n\rangle=a_n\delta_{nn'},$$

于是有

$$\langle\nu|A|\nu\rangle=\sum_n a_n|\langle\nu|n\rangle|^2. \tag{12.3}$$

因此第一次测量的结果，找到 A 的值为 a_m 的几率显然是

$$P_m=|\langle\nu|m\rangle|^2. \tag{12.4}$$

后来，体系不再处于初态$|\nu\rangle$，而是处于态$|m\rangle$。它们的进一步变化由薛定谔方程给出

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle=H|t\rangle, \tag{12.5}$$

$|t\rangle$表示在 t 时刻的态矢量，初始条件是

$$|0\rangle=|m\rangle.$$

由于 H 与时间无关，(12.5)的解是

$$|t\rangle=e^{-\frac{it}{\hbar}H}|m\rangle \tag{12.6}$$

或者，将$|m\rangle$用 H 的本征函数展开：

$$|m\rangle=\sum_\mu|\mu\rangle\langle\mu|m\rangle,$$

并利用

$$e^{-\frac{it}{\hbar}H}|\mu\rangle=e^{-i\omega_\mu t}|\mu\rangle,$$

则得

$$|t\rangle=\sum_\mu e^{-i\omega_\mu t}|\mu\rangle\langle\mu|m\rangle. \tag{12.7}$$

与得到(12.4)的考虑相同，我们求得在时刻 t 再次测得 a_m 的几率是

$$P'_n=|\langle m|t\rangle|^2 \tag{12.8}$$

其中

$$\langle m|t\rangle=\sum_\mu e^{-i\omega_\mu t}|\langle m|\mu\rangle|^2. \tag{12.9}$$

问题 13　曲 线 坐 标

试将点质量体系的薛定谔方程推广到一般曲线坐标系.

解　主要问题在于变换动能算符

$$T=-\frac{1}{2}\hbar^2\sum_{\mu}\frac{1}{m_\mu}\frac{\partial^2}{\partial x_\mu^2}, \tag{13.1}$$

其中 m_μ 对属于同一个粒子的三个坐标偏微商项具有同样的值. 量子理论中的表示式(13.1)是和下面的经典表示式相对应的:

$$T_{经典}=\frac{1}{2}\sum_{\mu}m_\mu\dot{x}_\mu^2. \tag{13.2}$$

用坐标

$$\xi_\mu=\sqrt{m_\mu}\,x_\mu, \tag{13.3}$$

代替 x_μ, 则

$$T_{经典}=\frac{1}{2}\sum_{\mu}\dot{\xi}_\mu^2. \tag{13.4}$$

现在我们在具有线元

$$ds^2=\sum_{\mu}d\xi_\mu^2 \tag{13.5}$$

的 ξ 空间中, 用广义坐标 q^k 代替 ξ_μ, 则线元变为

$$ds^2=\sum_{i}\sum_{k}g_{ik}dq^i dq^k, \tag{13.6}$$

于是得到

$$T_{经典}=\frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{k}g_{ik}\dot{q}^i\dot{q}^k. \tag{13.7}$$

过渡到量子理论, (13.1)式等价于

$$T=-\frac{1}{2}\hbar^2\sum_{\mu}\frac{\partial^2}{\partial\xi_\mu^2}=-\frac{1}{2}\hbar^2\nabla^2. \tag{13.8}$$

在微分几何中, 已经证明了, 当用 q^i 代替 ξ_μ 时, 拉普拉斯算符变为

$$\nabla^2=\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i}\sum_{k}\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}\,g^{ik}\frac{\partial}{\partial q^k}\right) \tag{13.9}$$

其中 g 是度规张量 g_{ik} 的行列式. g^{ik} 是 g_{ik} 的逆变分量，可由下式求得

$$g^{ik}=\frac{G_{ik}}{g} \tag{13.10}$$

其中 G_{ik} 是行列式 g 中 g_{ik} 的余式. (13.9)式给出我们问题的解，与经典表示式(13.7)相对应的动能算符变为

$$T=-\frac{1}{2}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_i\sum_k\frac{\partial}{\partial q^i}\left(\sqrt{g}\ g^{ik}\frac{\partial}{\partial q^k}\right). \tag{13.11}$$

势能的表示式，是显而易见的.

注　这种方法甚至可应用到质点直角坐标不存在的情况，本问题的方法就是将经典表示式(13.7)与算符(13.11)简单地联系起来. 然而这种联系决不是显然的，参见问题 46 关于对称陀螺的注 2.

问题 14　动量空间波函数

波函数的 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的傅里叶变换 $f(\boldsymbol{k})$ 描述一个量子态中的动量分布，试导出 $f(\boldsymbol{k})$ 所满足的积分方程，其中势的傅里叶变换就是积分方程的核.

解　在 $\psi(\boldsymbol{r})$ 和 $f(\boldsymbol{k})$ 之间存在着两个互逆的关系①

$$\psi(\boldsymbol{r})=(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\int d^3k e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}f(\boldsymbol{k}); \tag{14.1}$$

$$f(\boldsymbol{k})=(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\int d^3x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r}). \tag{14.2}$$

我们进一步将势写成

$$V(\boldsymbol{r})=\int d^3k e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}W(\boldsymbol{k}); \tag{14.3}$$

---

① 如果用(14.1)定义 $f(\boldsymbol{k})$，将 $\int d^3x e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ 作用到(14.1)上，利用三维 δ 函数的定义

$$\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3x e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}$$

容易得到反变换式(14.2). 在后面导出(14.8)式时也要用到上式.

则它的傅里叶变换是

$$W(\boldsymbol{k})=(2\pi)^{-3}\int d^3x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r}). \tag{14.4}$$

假设空间波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 满足薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\boldsymbol{r})\psi=E\psi. \tag{14.5}$$

将(14.1)和(14.3)代入上式，则得

$$\begin{aligned}(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\Big\{&\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3k e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}k^2 f(\boldsymbol{k})\\&+\int d^3k\int d^3k' e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}W(\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k}')\\&-E\int d^3k e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}f(\boldsymbol{k})\Big\}=0.\end{aligned}$$

在双重积分中用 $\boldsymbol{k}''=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'$ 代替 $\boldsymbol{k}$ 作为新的积分变量（然后再将 $\boldsymbol{k}''$ 换写为 $\boldsymbol{k}$）。对任意的 $\boldsymbol{r}$ 值积分为零，这只有被积函数为零才行，因此我们得到

$$\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right)f(\boldsymbol{k})=-\int d^3k' W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')f(\boldsymbol{k}'). \tag{14.6}$$

这就是所求的积分方程，它的核是 $W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$。

当然，只有在势的傅里叶变换(14.4)存在时，才有可能建立积分方程(14.6)，亦即要求 $V(\boldsymbol{r})$ 在 $r\to\infty$ 时至少如同 $r^{-1-\varepsilon}$ 一样快地趋于零，其中 ε 是一个无穷小的正数($\varepsilon>0$)。

必须指出，从归一化条件

$$\int d^3x|\psi(\boldsymbol{r})|^2=1 \tag{14.7}$$

可以得到

$$\int d^3k|f(\boldsymbol{k})|^2=1. \tag{14.8}$$

只要将(14.1)代入(14.7)：

$$\int d^3x|\psi(\boldsymbol{r})|^2=(2\pi)^{-3}\int d^3x\int d^3k\int d^3k' e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}f(\boldsymbol{k})f^*(\boldsymbol{k}').$$

然后先对空间坐标积分①，利用本题附注 1 的 δ 函数表示式，立即得到(14.8)式.

问题 15　动量空间：周期和非周期波函数

试从普通空间的周期性波函数出发，导出在连续谱情况下动量空间波函数的几率解释. 并研究对无限大周期性立方体的极限情况.

解　设三个空间方向 x, y, z 的周期均为 L, 则傅里叶级数

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t)=L^{-\frac{3}{2}}\sum_{k}c_k(t)e^{i(k\cdot r-\omega t)};\ \omega=\frac{\hbar k^2}{2m} \tag{15.1}$$

只包含每个矢量 $\boldsymbol{k}$ 的分量满足条件

$$k_i=\frac{2\pi}{L}n_i;\ n_i=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \tag{15.2}$$

的那些项. 这表明在 $\boldsymbol{k}$ 空间中，对于大的 L, 体积元 d^3k 中包含

$$d^3k\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \tag{15.3}$$

个不同 $\boldsymbol{k}$ 的态.

适当选择系数 c_k, 仍然可以使级数(15.1)归一化. 取(15.1)的模平方，对周期性立方体积分，则得

$$\int_{(L^3)}d^3x|\psi|^2=L^{-3}\sum_{k}\sum_{k'}c_k^*c_{k'}e^{i(\omega-\omega')t}\int d^3x\,e^{i(k'-k)\cdot r}$$

后面这个积分，当 $\boldsymbol{k}'\neq\boldsymbol{k}$ 时，为零；当 $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}$ 时，等于 L^3, 因此

$$\int_{(L^3)}d^3x|\psi|^2=\sum_{k}|c_k|^2. \tag{15.4}$$

现在设 P_L 是在周期性立方体 L^3 中找到粒子的几率，则 $|c_k|^2P_L$ 是找到动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$ 的粒子的几率，而 $|c_k|^2$ 是找到粒子在 L^3 中，动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$ 的几率.

---

① 关于积分次序的交换，参见下题的注.

现在讨论 $L\to\infty$ 的情形. 这时可以用对 $\boldsymbol{k}$ 空间的傅里叶积分代替求和(15.1),按照(15.2)和(15.3),利用规则

$$\sum_{k}\to\left(\frac{L}{2\pi}\right)^{3}d^{3}k, \tag{15.5}$$

就可做到这一点. 这时(15.1)变成

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t)=\frac{L^{\frac{3}{2}}}{(2\pi)^{3}}\int d^{3}k c(\boldsymbol{k},\ t)e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}. \tag{15.6}$$

当,且仅当

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}}c(\boldsymbol{k})=f(\boldsymbol{k}) \tag{15.7}$$

在 $L\to\infty$ 为有限值时,上述傅里叶积分才能描述一个与 L 无关的具有有限值的波函数. 波函数

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t)=(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\int d^{3}k f(\boldsymbol{k},\ t)e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{15.8}$$

可以按下式归一化

$$\int d^{3}x|\psi|^{2}=(2\pi)^{-3}\int d^{3}k\int d^{3}k' f^{*}(\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k}')e^{i(\omega-\omega')t}$$

$$\times\int d^{3}x e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}} \tag{15.9}$$

其中最后一个积分遍及无限空间,并等于

$$\int d^{3}x\, e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}=(2\pi)^{3}\delta(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}), \tag{15.10}$$

于是(15.9)化为:

$$\int d^{3}x|\psi|^{2}=\int d^{3}k|f(\boldsymbol{k},\ t)|^{2} \tag{15.11}$$

顺便指出,上式等于按规则(15.5),并运用(15.7)式,简单地将(15.4)的求和转变为积分. 因此,在任何地方发现一个粒子的动量 $\boldsymbol{k}$ 在 $d^{3}k$ 之内的几率变成

$$dP_{k}=d^{3}k|f(\boldsymbol{k},\ t)|^{2}. \tag{15.12}$$

注意 如果$f(\boldsymbol{k})$不是$\boldsymbol{k}$的连续函数，则对于积分次序的交换必须小心。例如$f(\boldsymbol{k})$是

$$f(\boldsymbol{k})=(2\pi)^{\frac{3}{2}}\delta(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}). \tag{15.13}$$

按照(15.8)式，我们有

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t)=e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}. \tag{15.14}$$

这时交换积分次序后的积分(15.9)和(15.11)式中将出现δ函数的平方，而这是毫无意义的。但是如果在(15.9)式中对普通空间的积分放到最后进行，则(15.9)式给出

$$\int d^3x|\psi|^2=\int d^3x.$$

这是和波函数(15.14)一致的。

II. 无自旋的单体问题

A. 一 维 问 题

一维问题，虽然在某种意义上过于简单化，但可以有效地用于理解量子力学的基本特征. 它们可以从三维波动方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(x,\ t)\psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{A.1}$$

导出，如果势只与直角坐标 x 有关，利用分离变量法，令

$$\psi=e^{i(k_2y+k_3z)}\varphi(x,\ t). \tag{A.2}$$

因此 $\varphi(x,\ t)$ 满足微分方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\hbar^2}{2m}(k_2^2+k_3^2)\varphi+V(x,\ t)\varphi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\varphi}{\partial t}$$

它还可以进一步化简，令

$$\varphi(x,\ t)=e^{-i\omega_0 t}u(x,\ t);\quad \hbar\omega_0=\frac{\hbar^2}{2m}(k_2^2+k_3^2). \tag{A.3}$$

则得一维波动方程，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+V(x,\ t)u=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial u}{\partial t}. \tag{A.4}$$

(A.2)和(A.3)中的指数函数只描述垂直于 x 轴方向的平面波，而并不影响在 x 方向上波函数的行为.

问题 16　力等于零的情况；基本解

试求 $V=0$ 时，一维波动方程的解，并讨论其物理意义.

解①　波动方程

① 下面我们把满足(A.4)的波函数的一维部分写成 ψ，而用 u 来表示它的空间部分.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{16.1}$$

可以分离变量，因为将

$$\psi(x,\ t)=u(x)g(t), \tag{16.2}$$

代入(16.1)，可得

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{u''}{u}=-\frac{\hbar}{i}\frac{\dot{g}}{g}=\hbar\omega, \tag{16.3}$$

其中 $\hbar\omega$ 代表分离变量的参数，将(16.3)分成两个方程，得到

$$\dot{g}=-i\omega g,\quad \text{即}\quad g(t)=e^{-i\omega t} \tag{16.4}$$

和

$$u''+\frac{2m\omega}{\hbar}u=0, \tag{16.5}$$

对于实的 ω，波函数是时间的周期函数，因而 $|\psi|^2$ 和时间无关(定态)；对于正的 ω，常数

$$\frac{2m\omega}{\hbar}=k^2 \tag{16.6}$$

也是正的，因此(16.5)的解对于坐标 x 也是周期函数.

对时间的依赖关系表现为(16.4)的复数形式，是量子力学的基本特征；实函数 $\sin\omega t$ 和 $\cos\omega t$ 不是微分方程(16.4)的解. 这种与经典力学不同的行为是薛定谔方程只包含对时间的一阶微商的结果.

参数 ω 的物理意义可以进一步加以说明，考虑到(16.1)式左边的算符是哈密顿算符，在本问题中就是动能算符，因此 $E=\hbar\omega$ 是粒子的动能，它必定是正实数，于是，所求的解是哈密顿算符的本征态.

因为 k^2 是正常数，(16.5)式或

$$u''+k^2u=0 \tag{16.7}$$

的复数解是

$$u(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \tag{16.8a}$$

一维波函数是

$$\psi(x,\ t)=Ae^{i(kx-\omega t)}+Be^{-i(kx+\omega t)} \tag{16.8b}$$

它由传播方向相反的两个波组成，二者的相速度都是 $v_{相}=\frac{\omega}{k}$.

为了看清楚空间部分(16.8a)的物理意义，我们来求密度

$$\rho=\psi^*\psi \tag{16.9}$$

和通量

$$s=\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right) \tag{16.10}$$

用(16.8b)代入上二式，即得

$$\rho=|A|^2+|B|^2+(AB^*e^{2ikx}+A^*Be^{-2ikx});$$

$$s=\frac{\hbar k}{m}(|A|^2-|B|^2).$$

振幅等于 A 和 B 的两个波明显地相应于两个方向相反的流，流的强度与各自的归一化常数有关，并与 k 成正比. ρ 的式于表明，由于两个(相干)波的干涉引起了密度的空间周期性.

只要没有特殊的原因(如边界条件)引起相干性，可以合理地只取其中一个波：令 $B=0$，则得 $s>0$；或令 $A=0$，则得 $s<0$. 它们分别相应于粒于沿 x 正方向或负方向的直线运动. 容许 k 取正负值，则可将最后结果概括如下：

$$\left.\begin{aligned}&\psi(x,\ t)=Ce^{i(kx-\omega t)};\\&E=\hbar\omega;\quad k^2=\frac{2m\omega}{\hbar};\\&\rho=|C|^2;\ s=\frac{\hbar k}{m}|C|^2.\end{aligned}\right\} \tag{16.11}$$

消去 ω，则得

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}, \tag{16.12}$$

所以粒子的动量是

$$p=\hbar k, \tag{16.13}$$

因而粒子的经典速度是

$$v=\frac{\hbar k}{m}. \tag{16.14}$$

它和波的相速度

$$v_{\text{相}}=\frac{\omega}{k}=\frac{E}{p}=\frac{1}{2}v$$

绝不相同；但是和波的群速度

$$v_{\text{群}}=\frac{d\omega}{dk}=\frac{dE}{dp}=v$$

完全一样.

注　基本微分方程(16.1)可以解释为带有虚扩散常数 D 的扩散方程：

$$D\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{\partial\psi}{\partial t};\ D=i\frac{\hbar}{2m}.$$

而分离变量法在扩散问题中不及在量子理论中来得重要，(实)扩散理论的典型的源类型解

$$\psi(x,\ t)=\frac{1}{\sqrt{t}}\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi\, f(\xi)e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(x-\xi)^2}{t}}$$

在量子理论中是不重要的.

在(16.1)式中时间反转使 ψ 变为 ψ^*.

问题 17　力等于零的情况：波包

试建立一个波包并研究它随时间的变化.

解　我们从波动方程的特解(16.11)出发：

$$\psi(k;x,\ t)=C(k)e^{i(kx-\omega t)} \tag{17.1}$$

其中

$$\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}, \tag{17.2}$$

$C(k)$是一个任意的振幅常数. 在此，k 仍然是一个自由参数，因此波动方程的完全解可表示为(17.1)式对 k 的任意一个收敛积分：

$$\psi(x,\ t)=\int_{-\infty}^{+\infty}dk\psi(k;x,\ t). \tag{17.3}$$

(17.3)式是一维波包的最一般的表示式．为了使积分收敛，振幅函数 $C(k)$，当 $|k|\to\infty$ 时，必须至少和 $1/k$ 一样快地趋于零．每选择一个适当的 $C(k)$ 相应给出一个特解．

现在我们来建立一个波包，使得在初始时刻 $t=0$ 找到由此波包描述的粒子的几率只在 $x=0$ 附近很小的区域内才显著地不为零，并要求 $t=0$ 时粒子的动量是 $p_0=\hbar k_0$．如果我们选择

$$\psi(x,\ 0)=A\exp\left[-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x\right], \tag{17.4}$$

就可以做到这一点，因为由这个 ψ 可以给出几率密度

$$\rho(x,\ 0)=|\psi(x,\ 0)\ |^2=|A|^2\exp\left[-\frac{x^2}{a^2}\right]$$

即粒子被局限在 $|x|\leqslant a$ 的区域内，并且通量(16.10)成为

$$s(x,\ 0)=\frac{\hbar}{2m_i}2ik_0|A|^2\exp\left[-\frac{x^2}{a^2}\right]=\rho\frac{\hbar}{m}k_0$$

因此粒子的速度是 $v_0=\frac{\hbar}{m}k_0$，并且 $p_0=mv_0=\hbar k_0$ 是波包的动量．

因为波函数表示的是一个粒子，所以归一化条件是

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\rho=1,$$

由此可得

$$|A|^2=\frac{1}{a\sqrt{\pi}}. \tag{17.5}$$

利用(17.3)和(17.1)，(17.4)式可以分解为平面波：

$$\psi(x,\ 0)=\int_{-\infty}^{+\infty}dkC(k)e^{ikx}. \tag{17.6}$$

这是一个傅里叶积分，其逆变换是

$$\begin{aligned}C(k)&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\psi(x,\ 0)e^{-ikx}\\&=\frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\exp\left[-\frac{x^2}{2a^2}+i(k_0-k)x\right].\end{aligned}$$

利用熟知的公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2} = \sqrt{\pi}. \tag{17.7}$$

可算得

$$C(k) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}a^2(k-k_0)^2\right]; \tag{17.8}$$

利用海森伯测不准关系不难理解这一结果：在初态中，粒子坐标的不确定性，按(17.4)式，其数量级是 $\Delta x = a$；正如(17.8)式所示，这个波函数提供了一个波数在 $k = k_0$(或动量在 $p = p_0$)附近、宽度为 $\Delta k = \frac{1}{a}\left(\text{或 } \Delta p = \frac{\hbar}{a}\right)$的谱．因此，与 a 的选择无关，下列关系式总成立

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar, \tag{17.9}$$

实际上，这就是海森伯的测不准原理．

由 $t=0$ 时的初态确定了 $C(k)$ 后，现在来计算在任何时刻的完整积分(17.3)，即积分

$$\psi(x, t) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp\left[-\frac{1}{2}a^2(k-k_0)^2 + ikx - i\frac{\hbar t}{2m}k^2\right].$$

上式中的指数是 k 的二次式，因此仍可把它化为完全的误差积分(17.7)式，结果是[*]

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\left(1+\frac{i\hbar t}{ma^2}\right)^{\frac{1}{2}}} \exp\left[-\frac{x^2 - 2ia^2k_0x + i\frac{\hbar t}{m}k_0^2a^2}{2a^2\left(1+i\frac{\hbar t}{ma^2}\right)}\right]. \tag{17.10}$$

为了更好地理解上式的意义，我们还是来讨论密度 ρ 和通量 s，不过现在 t 是任意时刻．密度 ρ 的表示式是[由]

---

* 原书(17.10)及(17.11)式有误，已改正．——译者注

$$\rho(x,\ t)=|\psi(x,\ t)|^2$$

$$=\frac{|A|^2}{\left[1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]}\exp\left[-\frac{\left(x-\frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^2\left[1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]}\right].$$

(17.11)

作为 x 的函数，$\rho(x,\ t)$ 仍是一钟形曲线，但这时最大值已由 $x=0$ 处移到 $x=\frac{\hbar k_0}{m}t$ 处，因此，由(17.10)式表示的“波群”的最大值以速度 $v_0=\frac{\hbar k_0}{m}$（“群速度”＝粒子速度）传播．(17.11)中指数中的分母表明，在时刻 t，波包的宽度已由原来 $t=0$ 时的宽度 a 扩展为

$$a'=a\left[1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}\simeq\frac{\hbar}{ma}t$$

这一效应不难从谱函数(17.8)得到解释：由于波数的谱有一个宽度 $\Delta k=1/a$，因此分波的速度分布在宽度为 $\Delta v=\frac{\hbar}{m}\Delta k=\frac{\hbar}{ma}$ 的区域内，因此波包扩展为 $\Delta x=t\Delta v=\frac{\hbar}{ma}t$，这就是上面得到的结果．

由(17.10)，有

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=ik_0\frac{1+i\frac{x}{a^2k_0}}{1+i\frac{\hbar t}{ma^2}}\psi;$$

代入(16.10)，并利用(17.11)，立即得到通量

$$s(x,\ t)=\rho(x,\ t)v_0\frac{1+\frac{\hbar tx}{ma^4k_0}}{1+\frac{(\hbar t)^2}{ma^2}}.\qquad(17.12)$$

由此可见，除 $t=0$ 外，对其他任何时刻 $s=\rho v_0$ 不能成立．这又是

速度谱具有一有限宽度的结果：在波包最大值处，$x_0=v_0t$，(17.12)式化为基本关系式 $s=\rho v_0$；对于 $x\gtrless x_0$，则有 $s\lessgtr\rho v_0$；这一结论是合理的，因为在时刻 t 到达 $x<x_0(x>x_0)$ 的那一部分波包的速度小于(大于)v_0.

最后可以指出，对所有时刻，归一化条件 $\int dx\,\rho=1$ 成立，这反映了物质守恒.

问题 18　驻　　波

如果一个粒子处在两个不可穿透的势壁 ($x=-a$ 和 $x=+a$) 之间(壁可以想象为，当粒子趋近这些边界时，受到强烈的排斥)，试决定粒子运动的本征态并讨论之.

解　对于定态，有

$$\psi(x,\ t)=u(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{18.1}$$

空间波函数 $u(x)$ 满足薛定谔方程

$$u''+k^2u=0 \tag{18.2}$$

其中

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}; \tag{18.3}$$

(18.2)的最一般的解是

$$u(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}. \tag{18.4}$$

由势壁给出的边界条件

$$u(a)=0;\ \ u(-a)=0 \tag{18.5}$$

加上归一化条件

$$\int_{-a}^{+a}dx\,|u(x)|^2=1, \tag{18.6}$$

可以完全决定本征函数，但允许相差一个常数相因子，在量子力学中这个相因子是任意的.

将(18.5)代入(18.4)，得到对于 A 和 B 的两个齐次线性方程

$$Ae^{ika}+Be^{-ika}=0,$$

$$Ae^{-ika}+Be^{ika}=0,$$

上列方程组有非零解的条件是下面的行列式为零：

$$\begin{vmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ e^{-ika} & e^{ika} \end{vmatrix}=0 \text{ 或 } \sin 2ka=0. \tag{18.7}$$

要满足这个本征值条件，k 只能取如下的本征值，

$$k_n=\frac{\pi}{2a}n, \quad n=\pm1,\ \pm2,\ \pm3,\ \cdots \tag{18.8}$$

虽然 $k=0$ 也满足(18.7)，但由于和归一化条件(18.6)矛盾，因此不必考虑。由(18.3)和(18.8)，可得能量本征值：

$$E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2. \tag{18.9}$$

由(18.8)，有

$$e^{ik_na}=e^{i\frac{\pi}{2}n}=i^n$$

因此

$$B=(-1)^{n+1}A.$$

如果 n 是奇整数，则 $B=A$，归一化本征函数是

$$u_n^+(x)=a^{-\frac{1}{2}}\cos k_nx=a^{-\frac{1}{2}}\cos\frac{\pi nx}{2a}, \quad n=\pm1,\ \pm3,\ \cdots \tag{18.10a}$$

如果 n 是偶整数，则 $B=-A$，归一化本征函数是

$$u_n^-(x)=a^{-\frac{1}{2}}\sin k_nx=a^{-\frac{1}{2}}\sin\frac{\pi nx}{2a},\ n=\pm2;\ \pm4\cdots \tag{18.10b}$$

在(18.10a)中，n 取正值和 n 取负值，结果一样，而在(18.10b)中，n 取负值和 n 取正值只相差一个无关紧要的负号，因此我们可以不考虑 n 取负值的情形。于是四个最低的本征态是

$$\left.\begin{aligned}
&n=1,\ E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2},\quad u_1^+=a^{-\frac{1}{2}}\cos\frac{\pi x}{2a},\\
&n=2,\ E_2=4E_1,\qquad u_2^-=a^{-\frac{1}{2}}\sin\frac{\pi x}{a},\\
&n=3,\ E_3=9E_1,\qquad u_3^+=a^{-\frac{1}{2}}\cos\frac{3\pi x}{2a},\\
&n=4,\ E_4=16E_1,\qquad u_4^-=a^{-\frac{1}{2}}\sin\frac{2\pi x}{a}.
\end{aligned}\right\}\qquad (18.11)$$

必须指出，上述本征函数是交替对于原点反射为对称(n=奇数)和反对称(n=偶数)．这种对于原点反射的对称性质称为态的宇称；在对称的情况下，我们称态的宇称为正，反之，则称态的宇称为负．u_n 右上角的正负号(u_n^+, u_n^-)就是用来表示态的宇称的．

前四个本征函数的图形画在图 1 中

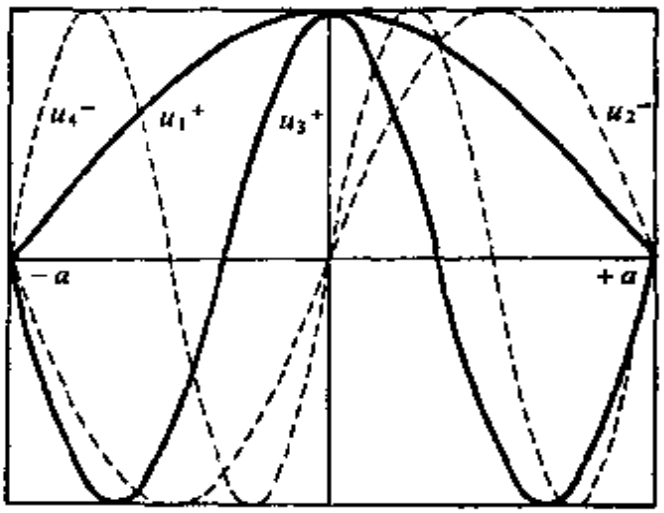


图 1　一维无限深势阱的前四个本征函数

由于本征函数的空间部分是实数，因此在这些态中总通量均为零[参见(16.10)式]，另外，由问题 16 的讨论可知，由于(18.4)中$|A|=|B|$，(18.4)中的 A 波和 B 波具有大小相等方向相反的动量和通量，因而总通量等于零．由于哈密顿算符的本征函数具有确定的能量本征值，因此它不是动量算符

$$p=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

的本征函数. 的确，当对函数(18.10a, b)求微商时不能给出它们本身，而是正弦解和余弦解互相交换. 但是，动量的期待值可按下式计算:

$$\langle n|p|n\rangle=\frac{\hbar}{i}\int_{-a}^{+a}dx\ u_n(x)\frac{\partial}{\partial x}u_n(x).$$

由于被积函数是 x 的奇函数，所以这个积分对所有的态均为零: $\langle n|p|n\rangle=0$，这是和通量等于零一致的.

注　本问题在数学方面几乎和经典弦振动一样. 唯一的差别是，这里是能量本征值服从平方律(18.9)，对于经典弦振动，则是频率服从平方律(18.9). 然而在量子力学中没有与经典振动能量类似的量，因为经典振动能量是在弦振动可以激发到任意振幅这一前提下导出的，而现在波函数的振幅不能是任意的，它被归一化条件(18.6)，亦即被粒子数等于 1 这一事实所限定.

问题 19　被不透明壁分隔开的无限深势阱

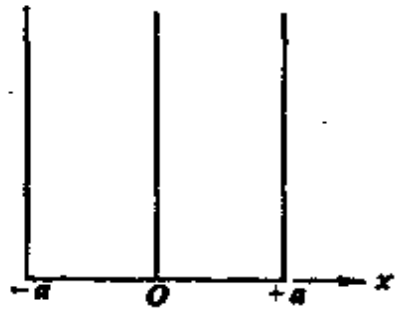


图 2　被不透明壁隔开的无限深势阱

试在前题的无限深势阱中央 $x=0$ 处引入一个宽度无限小而高度无限大的不透明壁，并研究它对本征态的影响.

解　将整个势阱分为两个相等部分的不透明壁可以看成是一个宽度为 2ε (在 $x=-\varepsilon$ 和 $x=+\varepsilon$ 之间)，高度为 V_0 的势垒的极限情形. 令

$$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2;\quad \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)=\varkappa^2, \tag{19.1}$$

这样，除 $u(\pm a)=0$ 这两个边界条件外，在势垒两边有四个边界条件，即 $u(x)$ 和 $u'(x)$ 在 $x=\pm\varepsilon$ 处的连续性. 满足 $u(\pm a)=0$ 的实数形式的解是

$$u=\begin{cases} A_1\sin k(x+a) & -a\leqslant x\leqslant -\varepsilon,\\ Be^{-\varkappa x}+Ce^{\varkappa x} & -\varepsilon\leqslant x\leqslant +\varepsilon,\\ A_2\sin k(x-a) & +\varepsilon\leqslant x\leqslant +a. \end{cases} \tag{19.2}$$

在 $x=\pm\varepsilon$ 处的连续性条件给出

$$u(-\varepsilon)=A_1\sin k(a-\varepsilon)=Be^{\varkappa\varepsilon}+Ce^{-\varkappa\varepsilon}, \tag{19.3a}$$

$$u'(-\varepsilon)=kA_1\cos k(a-\varepsilon)=\varkappa(-Be^{\varkappa\varepsilon}+Ce^{-\varkappa\varepsilon}), \tag{19.3b}$$

$$u(+\varepsilon)=A_2\sin k(\varepsilon-a)=Be^{-\varkappa\varepsilon}+Ce^{\varkappa\varepsilon}, \tag{19.3c}$$

$$u'(+\varepsilon)=kA_2\cos k(\varepsilon-a)=\varkappa(-Be^{-\varkappa\varepsilon}+Ce^{\varkappa\varepsilon}). \tag{19.3d}$$

由(19.3a, b)消去 A_1, 并由(19.3c, d)消去 A_2 后，得到两个关系式:

$$\left.\begin{aligned} k\cot k(a-\varepsilon)&=\varkappa\frac{-Be^{2\varkappa\varepsilon}+C}{Be^{2\varkappa\varepsilon}+C};\\ k\cot k(a-\varepsilon)&=\varkappa\frac{B-Ce^{2\varkappa\varepsilon}}{B+Ce^{2\varkappa\varepsilon}}. \end{aligned}\right\} \tag{19.4}$$

上二式左边相同，因此右边必定相等. 这当，且仅当 $B=\pm C$ 时成立. 如果 $B=+C$, 则由(19.3a, c)得到 $A_1=-A_2$, 这样得到的解是偶宇称的; 如果 $B=-C$, 则 $A_1=A_2$, 解是奇宇称的，因此和前题一样，本征态也是分为宇称不同的两类.

现在取极限 $\varepsilon\to0$, $\varkappa\to\infty$, 使得 $\varkappa\varepsilon=0$, 但

$$\varkappa^2\varepsilon=\Omega \tag{19.5}$$

保持有限. 我们称 Ω 为壁的不透明度，因为 Ω 愈大，壁愈不透明，对于偶宇称($B=C$)，(19.4)式的右边作幂级数展开后得到

$$k\cot ka=-\Omega \tag{19.6$^+$}$$

对于奇宇称($B=-C$)，类似地得到

$$k\cot ka=-\infty \tag{19.6$^-$}$$

第二种情况是最简单的，在壁的位置上本征函数为零. 解化为

$$\left.\begin{aligned} &u_n^-(x)=\begin{cases}A\sin k_n^-(x+a), & -a\leqslant x<0,\\ A\sin k_n^-(x-a), & 0<x\leqslant+a,\end{cases}\\ &k_n^-a=n\pi;\quad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots;\\ &u_n^-(-x)=-u_n^-(x);\qquad |A|^2=\frac{1}{a}. \end{aligned}\right\} \tag{19.7$^-$}$$

另一方面，由本征值条件(19.6$^+$)，只能用数值计算法求解本

征值 k_n^+，但是下述二种极限情况除外：一种情况是完全不透明的壁($\Omega\to\infty$)，这时本征值和(19.6⁻)相同，即 $k_n^+=n\pi$. 另一种情况是完全透明的，即 $\Omega=0$，这时 $k_n^+=\left(n-\frac{1}{2}\right)\pi$. 因此，对于有限的不透明度，$k_n^+$ 的值介于 k_n^- 和 k_{n-1}^- 之间，亦即和前题一样，这里偶宇称和奇宇称的能级也是交替出现的. 本征函数可以写成

$$\left.\begin{aligned} &u_n^+(x)=\begin{cases} -A\sin k_n^+(x+a), & -a\leqslant x<0, \\ +A\sin k_n^+(x-a), & 0<x\leqslant +a, \end{cases} \\ &\left(n-\frac{1}{2}\right)\pi<k_n^+a<n\pi; \quad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots; \\ &u_n^+(-x)=u_n^+(x);\ \ |A|^2=\frac{2k_n^+}{2k_n^+a-\sin 2k_n^+a}. \end{aligned}\right\} \quad (19.7^+)$$

$u_n^+(x)$在 $x=0$ 处连续并且有限，但是在这点上 $u_n^+(x)$ 的微商并不连续，因而曲线呈现一个缺口.

Ωa	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$
0	1.571	4.712	7.854	10.996	14.137
$\frac{1}{4}$	1.715	4.765	7.886	11.018	14.155
$\frac{1}{2}$	1.835	4.816	7.917	11.040	14.171
1	2.023	4.915	7.979	11.085	14.208
2	2.282	5.091	8.097	11.173	14.276
4	2.568	5.361	8.305	11.335	14.408
10	2.866	5.763	8.711	11.704	14.734
∞	3.142	6.283	9.425	12.566	15.703

在附表中，对无量纲参数 Ωa 的一些值，列出按(19.6⁺)算出的一些最低态的 k_n^+a 的数值. 相应的能级在图 3 中画出，图中实线表示偶宇称态，虚线表示奇宇称态. 在图 3 的左边，$\Omega=0$，相应于壁是完全可穿透的，这就是问题 18 的情形；向图 3 的右边移动时，壁变得愈来愈不透明，这时偶宇称能级的位置逐步升高，而奇宇称

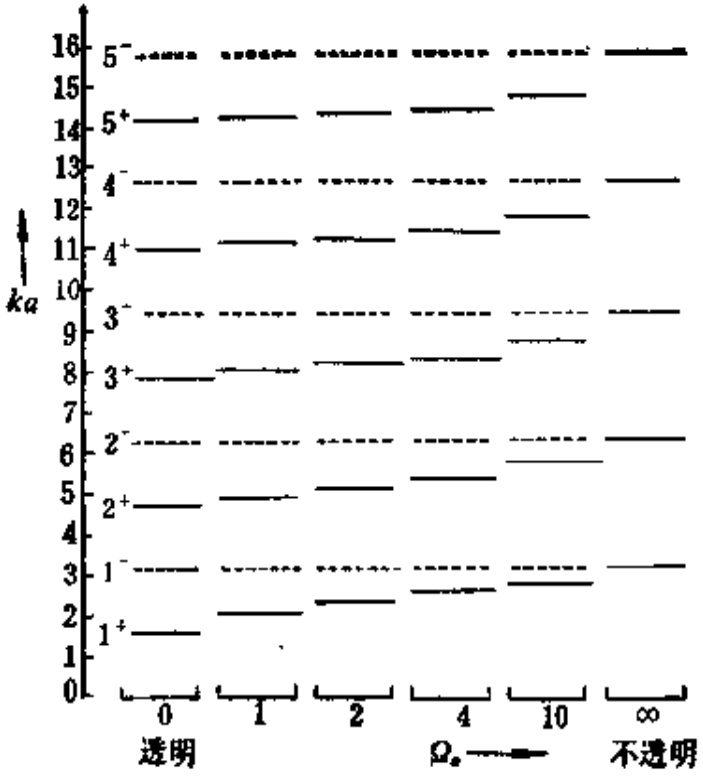


图 3　壁的不透明度取不同数值时能级的位置．实线：偶宇称，虚线：奇宇称

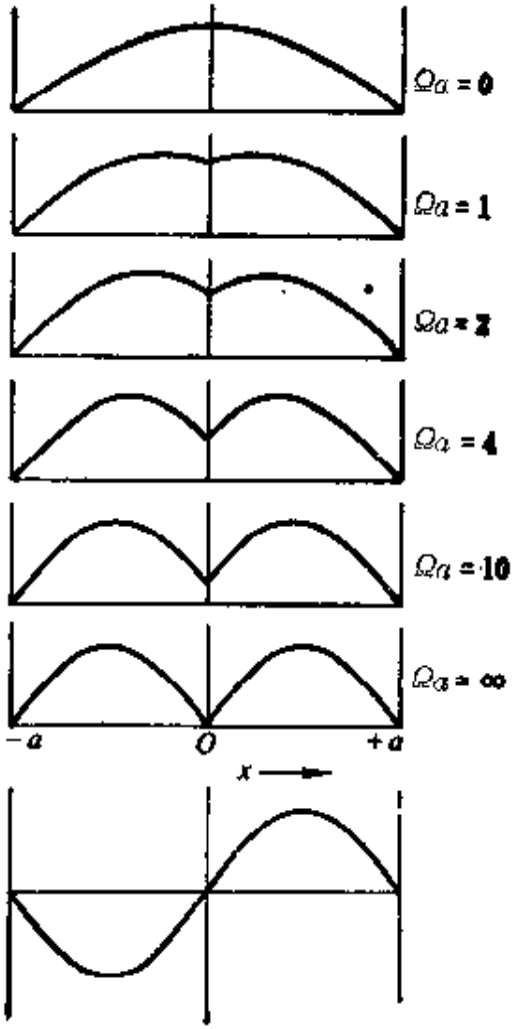


图 4　壁的不透明度取不同数值时的最低本征函数．上面：1^+，下面：1^-（在极限情况下）

能级的位置保持不变. 这种特点反映在偶宇称本征函数中，作为例子，我们在图 4 中画出 $n=1$ 的情况(图中的函数未归一化). 对于不可穿透的壁($\Omega\to\infty$)，$x=0$ 处的振幅下降到零，并且左右两部分的函数变为相互无关. 除左半部的函数符号相反外，这个结果与第一个奇宇称的本征函数（见图 4 最下面的一个图）完全相同，因此在 $\Omega\to\infty$ 的极限情况下，能级是简并的(图 3 的最右边).

问题 20　用狄拉克 δ 函数描述的不透明壁

试证明用狄拉克 δ 函数型的势

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{m}\Omega\delta(x) \tag{20.1}$$

同样可以描述前题中的势壁，并讨论壁上的边界条件.

解　问题是求解如下的薛定谔方程

$$u''+[k^2-2\Omega\delta(x)]u=0. \tag{20.2}$$

首先我们指出，微分方程(20.2)以及边界条件 $u(\pm a)=0$，对于宇称变换 $x\to -x$ 是不变的. 因此满足(20.2)及边界条件 $u(\pm a)=0$ 的解只能是宇称算符($x\to -x$)的本征函数. 这可以由下面看出：任意函数 $u(x)$ 可以分解为两部分，一部分是偶函数 $f(x)=f(-x)$，另一部分是奇函数 $g(x)=-g(-x)$，因此

$$u(x)=Af(x)+Bg(x);\quad u(-x)=Af(x)-Bg(x)$$

如果 $u(x)$ 是问题的解，则 $u(-x)$ 也是解，当能级没有简并时，这两个解只能相差一个常数因子(记作 α)，因此

$$u(-x)=\alpha u(x)$$

或

$$Af(x)-Bg(x)=\alpha[Af(x)+Bg(x)]$$

由于 f 和 g 是线性无关的，所以上式成立的充要条件是 $A=\alpha A$ 和 $B=-\alpha B$. 即：或者 $\alpha=1$，$B=0$，这时 $u(x)$ 的宇称为偶，或者 $A=0$，$\alpha=-1$，因而 $u(x)$ 的宇称为奇.

现在来研究势壁附近的情形. 对(20.2)求跨越势壁的积分，由于u是连续的，我们得到

$$u'(+0)-u'(-0)=2\Omega u(0) \tag{20.3}$$

即对数微商

$$L(x)=\frac{u'(x)}{u(x)} \tag{20.4}$$

在势壁处是不连续的，有一跳变2Ω：

$$L(+0)-L(-0)=2\Omega. \tag{20.5}$$

因此可以用一个比较人为的，但却是非常简单的边界条件来代替问题19中比较麻烦的极限过程. 必须指出，这个边界条件是仅由微分方程在势壁附近的行为导出的，因而如果附加一个非奇异势$V(x)$以及任何别处的边界条件，它仍然成立.

现在再来对本征函数作一简短的讨论. 对于奇宇称的解，$u_n^-(x)$在壁上有一个零点：$u_n^-(0)=0$. 按照(20.3)式，微商是连续的，没有任何跳变. 因此，不论势壁多么不透明，对奇宇称的解都没有影响. 这与问题19中得到的结果，(19.7⁻)式，完全一致.

另一方面，偶宇称的解必定具有如下形式：

$$u_n^+(x)=\begin{cases}-A\sin k_n^+(x+a) & -a\leqslant x<0\\ +A\sin k_n^+(x-a) & 0<x\leqslant +a\end{cases} \tag{20.6}$$

正如(19.7⁺)式所给出的. 由(20.6)得到

$$L(+0)=-k_n^+\cot k_n^+a;\quad L(-0)=+k_n^+\cot k_n^+a,$$

按条件(20.5)，则有

$$k_n^+\cot k_n^+a=-\Omega,$$

这与(19.6⁺)式一致. 因此进一步的讨论完全与问题19相同.

问题21 在狄拉克δ函数势壁上的散射

一束能量为E的粒子流，由左向右打在$x=0$处的如下势壁上

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{m}\Omega\delta(x), \tag{21.1}$$

试证明壁的影响表现为产生一个"散射"波，它从壁出发沿着向前和向后的方向传播.

解　除了 $x=0$ 处的无限小邻域外，薛定谔方程的解可写为

$$u(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx};\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2};\quad k>0 \tag{21.2}$$

其中 A、B 是常数，但对 $x>0$ 和 $x<0$，常数是不同的. 可以调节它们，使(21.2)满足边界条件. 我们选择如下的较特殊的形式

$$u(x)=\begin{cases}e^{ikx}+Be^{-ikx} & (x<0)\\ (1+F)e^{ikx} & (x>0)\end{cases} \tag{21.3}$$

这时入射粒子流的振幅归一化为 1. 于是 B 是向后散射振幅，而 F 是向前散射振幅.

按(20.3)式，$u(x)$ 在 $x=0$ 处的行为由关系式

$$u(+0)=u(-0)\quad 和\quad u'(+0)-u'(-0)=2\Omega u(0) \tag{21.4}$$

决定. 以(21.3)代入这些关系式，得到

$$B=F\quad 和\quad ik(1+F)-ik(1-B)=2\Omega(1+B)$$

于是最后得到

$$B=F=\frac{\Omega}{ik-\Omega} \tag{21.5}$$

在解(21.3)中，可以区分三种不同的流：入射流已归一化为 1，反射流的强度为 $|B|^2$，透射流的强度为 $|1+F|^2$. 由(21.5)式得

$$|B|^2=\frac{\Omega^2}{\Omega^2+k^2};\quad |1+F|^2=\frac{k^2}{\Omega^2+k^2} \tag{21.6}$$

由此引出守恒定律(连续性方程)

$$1=|B|^2+|1+F|^2 \tag{21.7}$$

即反射流的强度与透射流的强度之和等于入射流的强度.

如果壁是极不透明的($\Omega\to\infty$)，由(21.5)式得出 $B\simeq -1$ 和

$1+F\simeq 0$,这接近于全反射. 与此相反，如果壁几乎是完全透明的$(\Omega\to 0)$,则有

$$B=F\simeq\frac{\Omega}{ik}$$

这时散射流的强度与粒子能量成反比. 上式只在 $k\gg\Omega$ 的高能极限区域内成立，而对 $k\lesssim\Omega$ 的低能区域则不适用. 这是在高能下成立的一级玻恩近似的一种特殊情形. 但是必须指出，它的适用条件并不是(象有时叙述的那样)动能到处都比势能 $V(x)$大很多，因为在现在的例子中,在 $x=0$ 处的势能甚至趋于无限大.

势(21.1)的一个特殊行为是向前和向后散射振幅对所有能量都是相同的(见(21.5)式)

问题 22 在对称势垒上的散射

能量为 E 的粒子流射向局限于区域 $-a\leqslant x\leqslant+a$ 内的势垒 $V(x)$. 假设势是 x 的偶函数

$$V(x)=V(-x). \tag{22.1}$$

试利用波函数在 $x=\pm a$ 处的对数微商确定向后和向前散射波的振幅.

解 由对称条件(22.1)可得到如下重要的结论：对每一个能量 E,薛定谔方程有一个偶宇称的解

$$u_+(x)=u_+(-x);\quad u'_+(x)=-u'_+(-x) \tag{22.2a}$$

和一个奇宇称的解

$$u_-(x)=-u_-(-x);\quad u'_-(x)=u'_-(-x). \tag{22.2b}$$

由于它们是相互线性无关的，因此薛定谔方程的普遍解是上述两个解的任意线性组合. 在区域 $-a\leqslant x\leqslant+a$ 内可以确定这两个部分解 u_+ 和 u_-,在最坏的情况下,可以从 $x=0$ 出发,由初始条件

$$u_+(0)=1;\quad u'_+(0)=0$$

和

$$u_-(0)=0;\quad u'_-(0)=1$$

利用数值计算法确定这两个任意归一化的基本解. 因此我们可以算出它们在 $x=a$ 处的对数微商，为方便起见，将这些对数微商写为无量纲的形式

$$au'_+(a)/u_+(-a)=L_+;\quad au'_-(a)/u_-(a)=L_- \tag{22.3}$$

它们和各自解的归一化无关. 由(22.2)式可见，在 $x=-a$ 处的对数微商 $au'_\pm(-a)/u_\pm(a)$ 将是 $-L_+$ 和 $-L_-$.

相应于由左方入射的单位振幅平面波的解，可以写为

$$u(x)=\begin{cases} e^{ikx}+Be^{-ikx} & -\infty<x\leqslant -a \\ C_1u_+(x)+C_2u_-(x) & -a\leqslant x\leqslant +a \\ (1+F)e^{ikx} & +a\leqslant x<+\infty \end{cases} \tag{22.4}$$

由 $u(x)$ 和 $u'(x)$ 在 $x=\pm a$ 处的连续性条件得出四个等式

$$e^{-ika}+Be^{ika}=C_1u_+(a)-C_2u_-(a) \tag{22.5a}$$

$$ik(e^{-ika}-Be^{ika})=-C_1u'_+(a)+C_2u'_-(a) \tag{22.5b}$$

$$(1+F)e^{ika}=C_1u_+(a)+C_2u_-(a) \tag{22.5c}$$

$$ik(1+F)e^{ika}=C_1u'_+(a)+C_2u'_-(a) \tag{22.5d}$$

将(22.5a)和(22.5c)相加，则得 $2C_1u_+(a)$；将(22.5b)和(22.5d)相减，则得 $2C_1u'_+(a)$. 两者之比是

$$L_+=ika\,\frac{-e^{-ika}+(1+F+B)e^{ika}}{e^{-ika}+(1+F+B)e^{ika}} \tag{22.6a}$$

利用同样的办法，只是取相反的符号，可得

$$L_-=ika\,\frac{e^{-ika}+(1+F-B)e^{ika}}{-e^{-ika}+(1+F-B)e^{ika}} \tag{22.6b}$$

由上二式可以解出 $1+F\pm B$，并利用缩写

$$ka=q, \tag{22.7}$$

最后可得振幅关系式

$$B=-\frac{1}{2}e^{-2iq}\left[\frac{L_++iq}{L_+-iq}+\frac{L_-+iq}{L_--iq}\right] \tag{22.8a}$$

和

$$1+F=-\frac{1}{2}e^{-2iq}\left[\frac{L_++iq}{L_+-iq}-\frac{L_-+iq}{L_--iq}\right] \tag{22.8b}$$

按照连续性方程，我们期望反射强度与透射强度之和应当等于入射强度. 的确，由(22.8a, b)式可得

$$|B|^2=\frac{(L_+L_-+q^2)^2}{(L_+L_-+q^2)^2+q^2(L_+-L_-)^2} \tag{22.9a}$$

和

$$|1+F|^2=\frac{q^2(L_+-L_-)^2}{(L_+L_-+q^2)^2+q^2(L_+-L_-)^2} \tag{22.9b}$$

它们显然满足预期的关系式

$$|B|^2+|1+F|^2=1 \tag{22.10}$$

确定向前和向后散射振幅的问题现在归结为寻求偶、奇宇称波函数在 $x=a$ 处的对数微商(22.3). 当然，为了确定 L_+ 和 L_-，必须知道势 $V(x)$ 的具体形式.

与问题 21 不同，现在不再有等式 $B=F$. 如果

$$q|L_+-L_-|>|L_+L_-+q^2|$$

则向前散射占优势. 反之，则向后散射占优势.

问题 23　在直角势垒上的散射

试将问题 22 中得到的一般公式应用到下面的对称势垒上

$$V(x)=\begin{cases}\dfrac{\hbar^2k_0^2}{2m}, & |x|\leqslant a\\ 0, & \text{其余各处}\end{cases} \tag{23.1}$$

求出势垒的贯穿系数.

解　在势垒内部，薛定谔方程化为

$$u''+(k^2-k_0^2)u=0 \tag{23.2}$$

因此对于动能在阈值以下($k<k_0$)和动能在阈值以上($k>k_0$)，方程的解的类型不同. 现在我们先讨论第一种情形，令

$$k_0^2 - k^2 = \varkappa^2; \quad \text{则} \quad u'' - \varkappa^2 u = 0 \tag{23.3}$$

这时偶宇称解是

$$u_+(x) = \cosh \varkappa x; \quad u_+(0) = 1; \quad u'_+(0) = 0 \tag{23.4a}$$

奇宇称解是

$$u_-(x) = \frac{1}{\varkappa} \sinh \varkappa x; \quad u_-(0) = 0; \quad u'_-(0) = 1 \tag{23.4b}$$

因此

$$L_+ = a u'_+(a) / u_+(a) = \varkappa a \tanh \varkappa a \tag{23.5a}$$

$$L_- = a u'_-(a) / u_-(a) = \varkappa a \coth \varkappa a \tag{23.5b}$$

将上二式代入(22.9b)，化简后，则得势垒的贯穿系数：

$$T \equiv |1+F|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2k\varkappa}\right)^2 \sinh^2 2\varkappa a} \tag{23.6}$$

而反射系数，按(22.10)式，为

$$R \equiv |B|^2 = 1 - T \tag{23.7}$$

在经典物理学中，从左面来的通量将全部被势垒所反射，因此 $|B|^2=1$，而 $|1+F|^2=0$. 按(23.6)式，这种情况只有在 $\varkappa a \to \infty$ 时才能发生，这时的势垒相当于一个高于粒子能量的非常大的“势山”，势垒的可穿透性变得非常小，但并不为零(“隧道效应”). 势垒的贯穿系数可近似地写为

$$T = \frac{16 k^2 \varkappa^2}{k_0^4} e^{-4\varkappa a} \tag{23.8}$$

它的数量级主要由上式中的指数因子决定.

对于任意的势 $V(x)$，指数 $4\varkappa a$ 将推广为如下的积分表示式

$$4\varkappa a = 2\int_{-a}^{+a} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)}$$

(参见问题 116).

另一方面，如果动能超过势垒的高度，由(23.3)定义的量 $\varkappa$ 变为虚数. 利用缩写

$$K^2=k^2-k_0^2=-\varkappa^2 \tag{23.9}$$

可把(23.6)式写作

$$T=\frac{1}{1+\left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2\sin^2 2Ka} \tag{23.10}$$

虽然在经典力学中，对于超过势垒高度的动能必定有$T=1$和$R=0$，但是(23.10)式所表示的透明度，只有在能量满足条件$2Ka=n\pi(n=1, 2, 3, \cdots)$时才达到极大值$T=1$. 在这些能量之间，在$2Ka=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$附近$T$有极小值. (23.10)式中$\sin 2Ka$前面的系数愈小(亦即动能比阈值愈高)，这些极小值愈接近于$T=1$.

T作为能量（以阈高度U为单位）的函数的一般特性如图5所示，图中的曲线表示T和E/U的函数关系，并取$2k_0a=3\pi$. 对于$E<U$的情况，波函数模平方$|u|^2$作为x的函数画在图6中. 在势垒的右边，$|u|^2=|1+F|^2$，即它是与x无关的常数，而在势垒左边，入射波与反射波发生干涉. 图6中对$k^2=\varkappa^2=\frac{1}{2}k_0^2$和不同的势垒宽度画出了这种干涉特征. 势垒愈宽，透射强度愈小，而干涉现象愈显著.

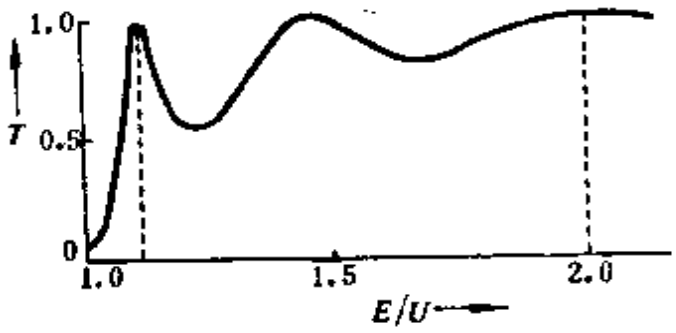


图5　在$E>U$时，势垒贯穿系数与能量的关系

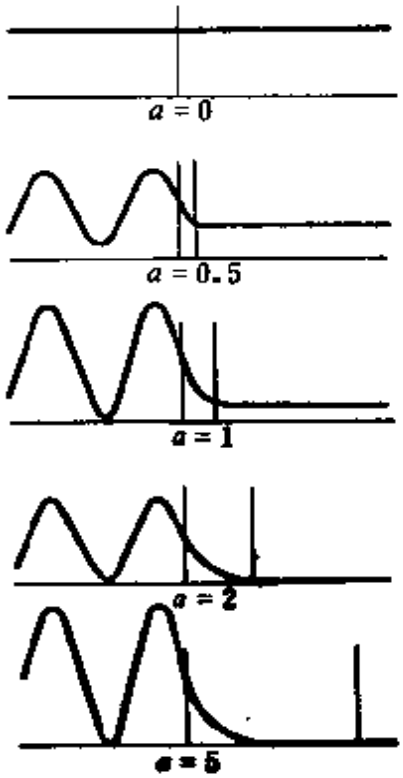


图6　在$E<U$时，从左方投向势垒的粒子流中的几率密度$|u|^2$. 两条垂线标记势垒宽度a，左边的波是入射束与反射束干涉的结果

问题 24　反射的反演

设在 $0<x<a$ 的区域内有一个 $V(x)>0$ 的势槛（它对来自左面或右面的波都是一个障碍）. 试证，不论势槛的形状如何，波从左面（$x<0$）入射时的反射系数和从右面（$x>a$）入射时的反射系数是一样的.

解　设 $u(x)$ 和 $v(x)$ 是薛定谔方程在 $0<x<a$ 中的二个线性无关的实数解，并且满足朗斯基行列式（Wronskian）

$$uv'-vu'=1 \tag{24.1}$$

对于波从左面入射的情况，波函数具有如下形式①

$$\psi=\begin{cases} e^{ikx}+Re^{-ikx}, & x<0 \\ Au(x)+Bv(x), & 0<x<a \\ Ce^{ik(x-a)}, & a<x \end{cases} \tag{24.2}$$

在 $x=0$ 和 $x=a$ 处 ψ 和 ψ' 的连续性条件是

$$\left.\begin{aligned} 1+R&=Au(0)+Bv(0) \\ ik(1-R)&=Au'(0)+Bv'(0) \\ Au(a)+Bv(a)&=C \\ Au'(a)+Bv'(a)&=ikC \end{aligned}\right\} \tag{24.3}$$

从上式中的后二式，利用（24.1），可得

$$\left.\begin{aligned} A&=C[v'(a)-ikv(a)] \\ B&=-C[u'(a)-iku(a)] \end{aligned}\right\} \tag{24.4}$$

将 A、B 的上述表示式代入（24.3）的前二式中，则得

$$1+R=(p_{0a}-iq)C;\quad 1-R=(p_{a0}-ir)C \tag{24.5}$$

其中

---

① 这里我们用符号 ψ 表示波函数的空间部分，因为在本问题中 $u(x)$ 有另外的含意.

$$\left.\begin{aligned} p_{0a} &= u(0)v'(a) - v(0)u'(a) \\ p_{a0} &= u(a)v'(0) - v(a)u'(0) \\ q &= k[u(0)v(a) - v(0)u(a)] \\ r &= \frac{1}{k}[u'(0)v'(a) - v'(0)u'(a)] \end{aligned}\right\} \tag{24.6}$$

从(24.5)最后得到

$$R = \frac{(p_{0a} - p_{a0}) - i(q - r)}{(p_{0a} + p_{a0}) - i(q + r)} \tag{24.7}$$

于是反射系数为

$$|R|^2 = \frac{(p_{0a} - p_{a0})^2 + (q - r)^2}{(p_{0a} + p_{a0})^2 + (q + r)^2} \tag{24.8}$$

现在改变入射波的方向，即从右向左. 这时的波函数不是(24.2)式，而是

$$\tilde{\psi} = \left\{\begin{array}{ll} \tilde{C}e^{-ikx}, & x < 0 \\ \tilde{A}u(x) + \tilde{B}v(x), & 0 < x < a \\ e^{-ik(x-a)} + \tilde{R}e^{ik(x-a)}, & a < x \end{array}\right\} \tag{24.9}$$

连续性条件是

$$\left.\begin{aligned} 1 + \tilde{R} &= \tilde{A}u(a) + \tilde{B}v(a) \\ -ik(1 - \tilde{R}) &= \tilde{A}u'(a) + \tilde{B}v'(a) \\ \tilde{A}u(0) + \tilde{B}v(0) &= \tilde{C} \\ \tilde{A}u'(0) + \tilde{B}v'(0) &= -ik\tilde{C} \end{aligned}\right\} \tag{24.10}$$

(24.10) 式和 (24.3)式有相同的结构. 只要将 $x=0$ 与 $x=a$ 互换并且用 $-k$ 代替 k, 就可以从(24.3)得到(24.10). 将这个变换($x=0$ 与 $x=a$ 互换，同时以 $-k$ 代替 k)应用于(24.6)式，则得

$$p_{0a} \to p_{a0};\ p_{a0} \to p_{0a};\ q \to q;\ r \to r \tag{24.11}$$

因此出现在最后的公式(24.7)和 (24.8) 中的唯一差别是将 p_{0a} 和 p_{a0} 互相交换一下. 由于(24.8)式对于 p_{0a} 和 p_{a0} 的交换是对称的，因此波从两个方向入射的反射系数相同，即

$$|\tilde{R}|^2=|R|^2$$

这就是所要证明的. 但是 $\tilde{R}$ 并不等于 R; 从(24.7)式, 可将 R 写成二个复数 α 和 β 的比, 即 $R=\alpha/\beta$; 在变换(24.11)下, $\tilde{R}=-\alpha^*/\beta\neq R$.

问题 25 直角势阱

试确定下面势阱的束缚态解及相应的本征值

$$V(x)=\begin{cases}-U & |x|<a\\ 0 & \text{其余各处}\end{cases} \tag{25.1}$$

解 由上题不难得到正能态的一般特征, 因此现在只要讨论负能量, 即束缚态的情况.

由于势在坐标反演下不变, $V(x)=V(-x)$, 因此解或者具有偶宇称或者具有奇宇称(参见问题 20). 令

$$E=\frac{-\hbar^2\varkappa^2}{2m};\quad U=\frac{\hbar^2k_0^2}{2m};\quad k^2=k_0^2-\varkappa^2 \tag{25.2}$$

则薛定谔方程的解是

偶宇称:

$$\left.\begin{aligned}u_+(x)&=\begin{cases}A_+\cos kx, & 0\leqslant x\leqslant a\\ A_+\cos ka\,e^{\varkappa(a-x)}, & x>a\end{cases}\\ u_+(-x)&=u_+(x)\\ 1/A_+^2&=\frac{1}{k}\left[ka+\sin ka\cos ka\right]+\frac{1}{\varkappa}\cos^2 ka\end{aligned}\right\} \tag{25.3e}$$

奇宇称:

$$\left.\begin{aligned}u_-(x)&=\begin{cases}A_-\sin kx, & 0\leqslant x\leqslant a\\ A_-\sin ka\,e^{\varkappa(a-x)}, & x>a\end{cases}\\ u_-(-x)&=-u_-(x)\\ 1/A_-^2&=\frac{1}{k}\left[ka-\sin ka\cos ka\right]+\frac{1}{\varkappa}\sin^2 ka\end{aligned}\right\} \tag{25.3o}$$

这里振幅已调节得使势阱内部和外部的波函数在 $x=a$ 处是连续

的．归一化常数是从条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx|u|^2=1$$

计算出来的．u' 在 $x=a$ 处的连续性给出另外的关系式，即

偶宇称：　$-k\sin ka=-\varkappa\cos ka$　或　$\tan ka=\frac{\varkappa}{k}$　(25.4e)

奇宇称：　$k\cos ka=-\varkappa\sin ka$　或　$\cot ka=-\frac{k}{\varkappa}$　(25.4o)

将(25.4e, o)代入(25.3e, o)的最后一行 $1/A_{\pm}^2$ 表示式中，对于两种宇称得到相同的归一化常数表示式

$$1/A_{\pm}^2=a+\frac{1}{\varkappa} \tag{25.5}$$

为了从(25.4)求出本征值，以(25.2)式的 $\varkappa=\sqrt{k_0^2-k^2}$ 代入(25.4)式，并利用缩写

$$C=k_0a, \tag{25.6}$$

则得

偶宇称：　$$\tan ka=\frac{\sqrt{C^2-(ka)^2}}{ka} \tag{25.7e}$$

奇宇称：　$$\tan ka=-\frac{ka}{\sqrt{C^2-(ka)^2}} \tag{25.7o}$$

对一给定的势，C 是决定势阱大小的常数 ($C^2\propto Ua^2$)，可以从(25.7e, o)式确定所有的 ka 值，因而也就确定了与势阱大小相容的所有能量本征值

$$E=-U\left[1-\left(\frac{ka}{C}\right)^2\right] \tag{25.8}$$

图 7 中画出了 $\tan ka$ 以及(25.7e)和(25.7o)右边表示式随 ka 变化的曲线．本征值方程 (25.7e, o) 的解可以由后二条曲线与 $\tan ka$ 曲线的交点求出．当然，后二条曲线与参数 C 有关．例如我们从 $C=1$ 开始，可以得到一个属于偶宇称的交点 α，而对奇

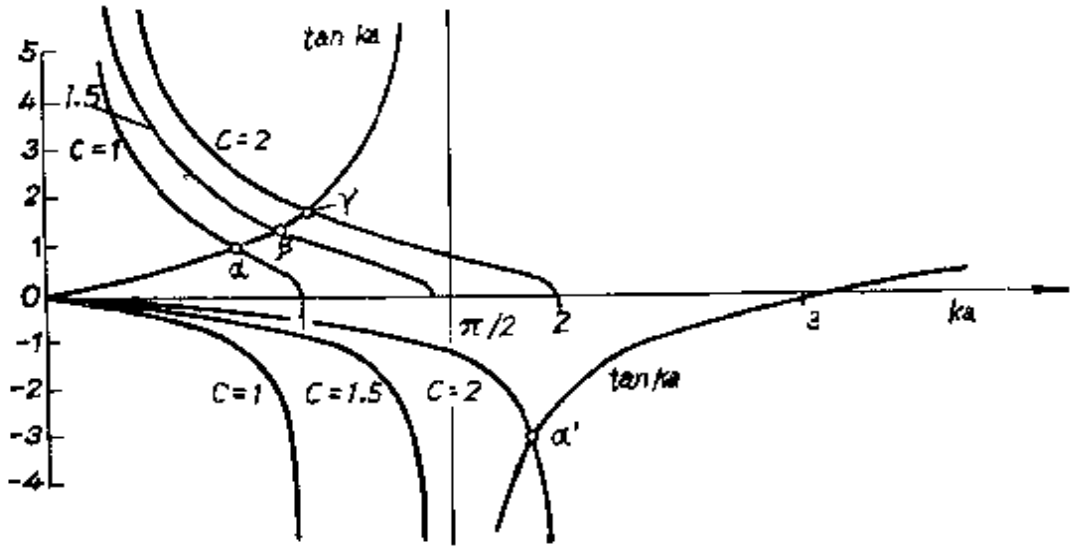


图 7　方程(25.7e, o)的图解法，(25.7e, o)右边取不同的势阱参数 C 得到的曲线与 $\tan ka$ 相交．在上半平面的交点($\tan ka>0$)属于偶宇称，而在下半平面的交点($\tan ka<0$)属于奇宇称

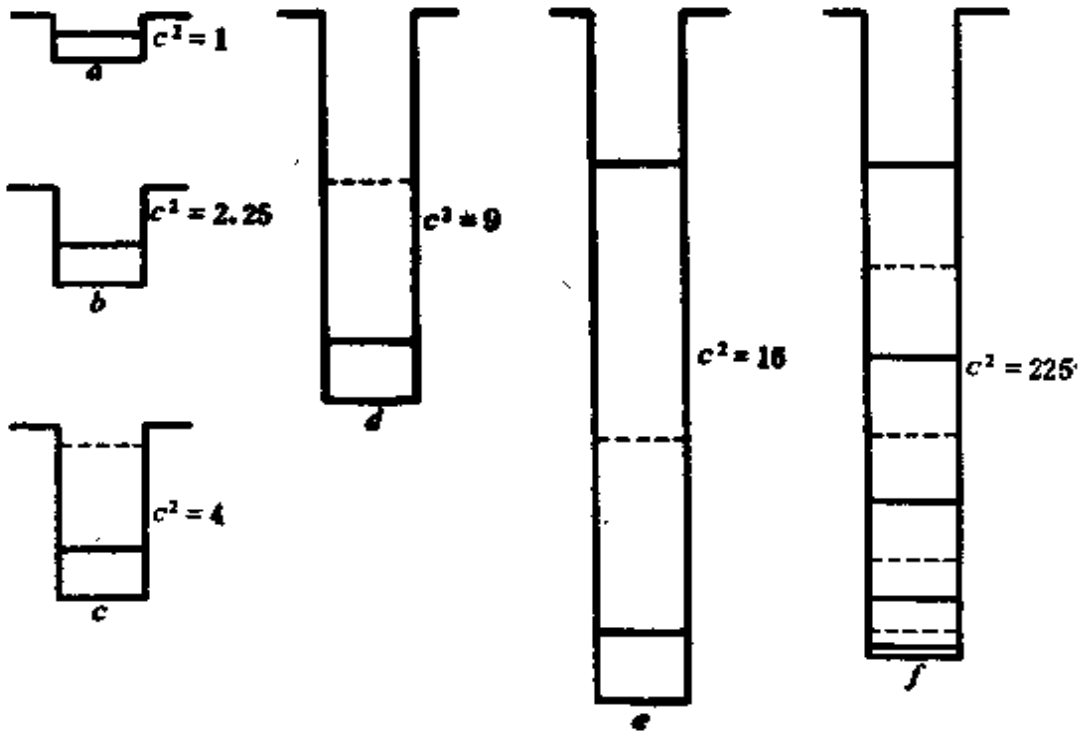


图 8*a–f*　在不同大小(由参数 C 决定)的势阱中的能级。实线表示偶宇称态，虚线表示奇宇称态

宇称则没有交点. 因此对于这样大小($C=1$)的势阱，只能容纳一个具有偶宇称的本征态. 图8a中画出$C=1$的势阱以及相应的本征值. 对于$C=1.5$的较大的势阱，图7中的交点出现在β处；这时仍然只有一个偶宇称态(图8b)，不过由于$(ka)_\beta>(ka)_\alpha$，所以$E_\beta<E_\alpha$. 如果势阱进一步加大，例如取$C=2$，这时除了交点γ给出最低的偶宇称态($E_\gamma<E_\beta$)外，还出现了一个相应于交点α'的奇宇称态(见图8c). 进一步增大C的值，则势阱对本征值的"容量"愈来愈大(图8d, e, f). 态的数目随着C的增大而直线上升，这些态形成一个偶奇宇称交替的系列. 由一般的规则可知，本征函数的零点愈多，相应的能量就愈高. 图9中画出$C=5$的四个最低本征函数.

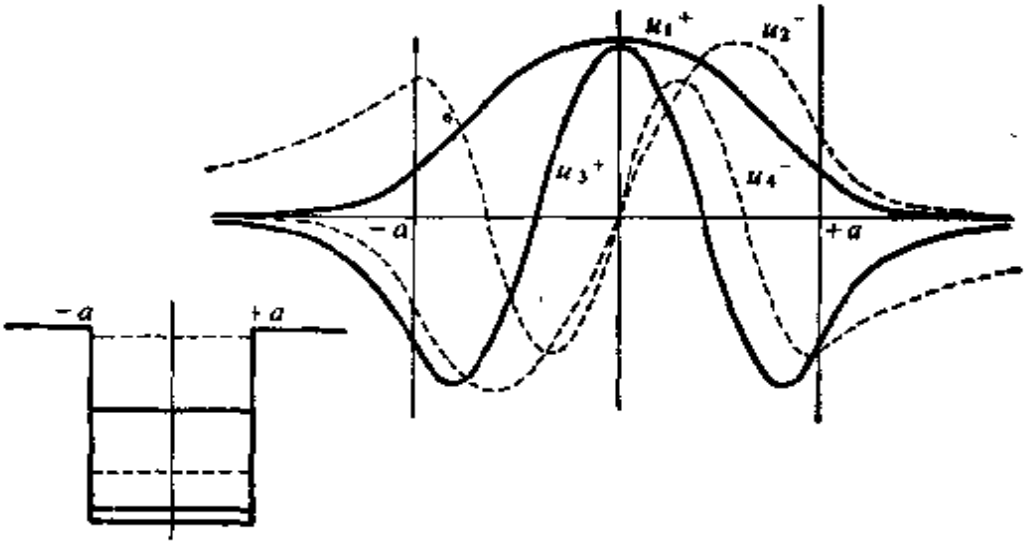


图9 $C=5$的势阱的能级和本征函数. 实线表示偶宇称态，虚线表示奇宇称态

在经典力学中，粒子可以在作为势阱边界的两壁(在$x=\pm a$处)之间以任意能量振动. 在这区域之外，粒子的动能将变成负的，因而粒子不会跑到势阱外面去. 在量子力学中，情况有所不同，在势阱内部找到粒子的几率P_i小于1；

$$P_t=\int_{-a}^{+a}dx\,|u|^2=1-\frac{k^2}{k_0^2(1+\varkappa a)}\,, \tag{25.9}$$

因此粒子处在势阱外面的几率并不为零. 随着离开势壁的距离 $|x|-a$ 的增大，这个几率按指数规律 $e^{-2\varkappa(|x|-a)}$ 下降.

问题 26 处在两个壁之间的直角势阱

对于图 10 的势，试确定薛定谔方程的解，并讨论对于正能态当 $l\to\infty$ 时的情形*.

解 首先对"束缚"态($E<0$)作一简短的讨论. 仍采用(25.2)式所定义的符号 k^2、k_0^2 和 $\varkappa^2$，归一化条件为

$$\int_{-l}^{+l}dx\,|u|^2=1.$$

波函数可写为

偶宇称:

$$\left.\begin{aligned}u_+&=\begin{cases}A_+\cos kx, & 0\leqslant x\leqslant a\\ A_+\dfrac{\cos ka}{\sinh\varkappa(l-a)}\sinh\varkappa(l-x), & a<x\leqslant l\end{cases}\\ 1/A_+^2&=\frac{1}{k}[ka+\sin ka\cos ka]\\ &\quad+\frac{\cos^2 ka}{\varkappa}\left[\coth\varkappa(l-a)-\frac{\varkappa(l-a)}{\sinh^2\varkappa(l-a)}\right]\end{aligned}\right\} \tag{26.1e}$$

奇宇称:

$$\left.\begin{aligned}u_-&=\begin{cases}A_-\sin kx, & 0\leqslant x\leqslant a\\ A_-\dfrac{\sin ka}{\sinh\varkappa(l-a)}\sinh\varkappa(l-x), & a<x\leqslant l\end{cases}\\ 1/A_-^2&=\frac{1}{k}[ka-\sin ka\cos ka]\\ &\quad+\frac{\sin^2 ka}{\varkappa}\left[\coth\varkappa(l-a)-\frac{\varkappa(l-a)}{\sinh^2\varkappa(l-a)}\right]\end{aligned}\right\} \tag{26.1o}$$

* 原书误为 $l\to 0$，已改正. ——译者注

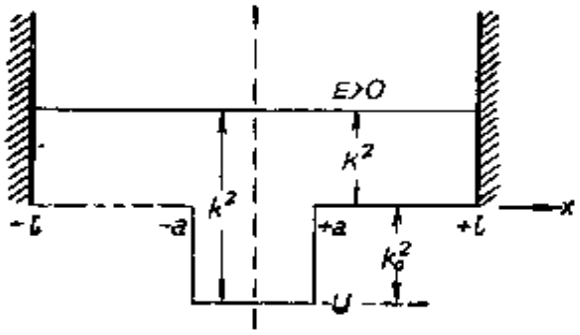


图 10　问题 26 的势

与问题 25 一样，这里已使 $u(a)$ 连续．但 $u'(a)$ 的连续性给出另外的条件，即

偶宇称：
$$\tan ka=\frac{\varkappa}{k}\coth \varkappa(l-a) \tag{26.2e}$$

奇宇称：
$$\tan ka=-\frac{k}{\varkappa}\tan \mathrm{h}\varkappa(l-a) \tag{26.2o}$$

从这些等式可计算本征值．但我们在此不作详细讨论．只要指出一点就够了，即如果

$$\varkappa(l-a)\gg 1,$$

则 coth 和 tanh 函数很快地趋于 1．因而方程(26.2e, o)过渡到上题的本征值方程(25.4e, o)，并且 (26.1e, o) 中的 $1/A_{\pm}^2$ 表示式过渡到 (25.3e, o) 中相应的表示式．当 $|x|<l$ 以致 $\varkappa(l-x)\gg 1$ 时，可以写出

$$\frac{\sinh \varkappa(l-x)}{\sinh \varkappa(l-a)}=e^{\varkappa(a-x)},$$

因此 (26.1e, o) 中的波函数仍然回到 (25.3e, o)中的波函数表示式．

我们更感兴趣的是讨论正能量的情形，这时对于有限的 l 值存在一系列分立本征值，当 l 增大时这些本征值构成一个愈来愈密的能级系，在 $l\to\infty$ 的极限情形下，就过渡到连续谱．对于 $E>0$，令

$$E=\frac{\hbar^2K^2}{2m};\quad K^2=-\varkappa^2=k^2-k_0^2 \tag{26.3}$$

这时波函数可写为

偶宇称:

$$\left.\begin{aligned} u_+&=\begin{cases} A_+\cos kx, & 0\leqslant x\leqslant a \\ A_+\dfrac{\cos ka}{\sin K(l-a)}\sin K(l-x), & a<x\leqslant l \end{cases} \\ 1/A_+^2&=\frac{1}{k}[ka+\sin ka\cos ka] \\ &\quad -\frac{\cos^2 ka}{K}\left[\cot K(l-a)-\frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)}\right] \end{aligned}\right\} \tag{26.4e}$$

奇宇称:

$$\left.\begin{aligned} u_-&=\begin{cases} A_-\sin kx, & 0\leqslant x\leqslant a \\ A_-\dfrac{\sin ka}{\sin K(l-a)}\sin K(l-x), & 0<x\leqslant l \end{cases} \\ 1/A_-^2&=\frac{1}{k}[ka-\sin ka\cos ka] \\ &\quad -\frac{\sin^2 ka}{K}\left[\cot K(l-a)-\frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)}\right] \end{aligned}\right\} \tag{26.4o}$$

这些表示式已自动满足 $u(a)$ 的连续性，但为了满足 $u'(a)$ 的连续性，还要加上如下的本征值条件

偶宇称:
$$\tan ka=\frac{K}{k}\cot K(l-a) \tag{26.5e}$$

奇宇称:
$$\tan ka=-\frac{k}{K}\tan K(l-a) \tag{26.5o}$$

利用这两个关系式，可将(26.4e, o)的 $1/A_\pm^2$ 表示式中最后一个方括号重新改写一下，因此得到

$$\begin{aligned} 1/A_+^2&=\frac{1}{k}[ka+\sin ka\cos ka] \\ &\quad +(l-a)\left(\cos^2 ka+\frac{k^2}{K^2}\sin^2 ka\right)-\frac{k}{K^2}\sin ka\cos ka \end{aligned} \tag{26.6e}$$

和

$$1/A_-^2=\frac{1}{k}[ka-\sin ka\cos ka]$$
$$+(l-a)\left(\sin^2 ka+\frac{k^2}{K^2}\cos^2 ka\right)+\frac{k}{K^2}\sin ka\cos ka \tag{26.6o}$$

当 $l\to\infty$ 时，在上二式中只要保留第二项就可以了，这时

$$\begin{aligned}1/A_+^2&=l\left(\cos^2 ka+\frac{k^2}{K^2}\sin^2 ka\right);\\ 1/A_-^2&=l\left(\sin^2 ka+\frac{k^2}{K^2}\cos^2 ka\right)\end{aligned} \tag{26.7}$$

当 $l\to\infty$ 时，从(26.4e, o)可得

$$\frac{\sin^2 K(l-a)}{A_+^2\cos^2 ka}\to l;\quad \frac{\sin^2 K(l-a)}{A_-^2\sin^2 ka}\to l$$

因此，在势阱外部($x>a$)，波函数可写为

$$u_\pm=\frac{1}{\sqrt{l}}\sin K(l-x) \tag{26.8}$$

这里 l 仍然出现在波函数的位相中，但是从本征值条件(26.5e, o)可得

偶宇称：

$$Kl=\tan^{-1}\left(\frac{\frac{K}{k}+\tan ka\tan Ka}{\tan ka-\frac{K}{k}\tan Ka}\right) \tag{26.9e}$$

奇宇称：

$$Kl=\tan^{-1}\left(\frac{\tan Ka-\frac{K}{k}\tan ka}{1+\frac{K}{k}\tan ka\tan Ka}\right) \tag{26.9o}$$

利用上式可将 l 消去.

波函数系统最显著的特征是，当 l 值很大但有限时，由(26.5e, o)导出的能级密度. 当变量 Kl 在宽度为 π 的区间上变化时，(26.5e, o)式的右边取遍 $-\infty$到$+\infty$ 之间的所有实数值.

在每一个宽度为 π 的区间里，两个方程中的一个恰好有一个解，于是在 K 坐标轴上，平均相隔 $\Delta K=\frac{\pi}{2l}$ 的距离，交替地出现偶宇称和奇宇称的能级．从(26.3)式可得，在能量坐标轴上平均能级距离是

$$\Delta E=\frac{\hbar^2}{m}K\frac{\pi}{2l}=\frac{\pi}{l}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}E}\,. \tag{26.10}$$

因此，两个相继能级间的平均距离与 $E^{\frac{1}{2}}$ 成正比，而与归一化间隔的长度 l 成反比．所以，在 $l\to\infty$ 的极限情形下，分立能谱过渡到连续能谱．

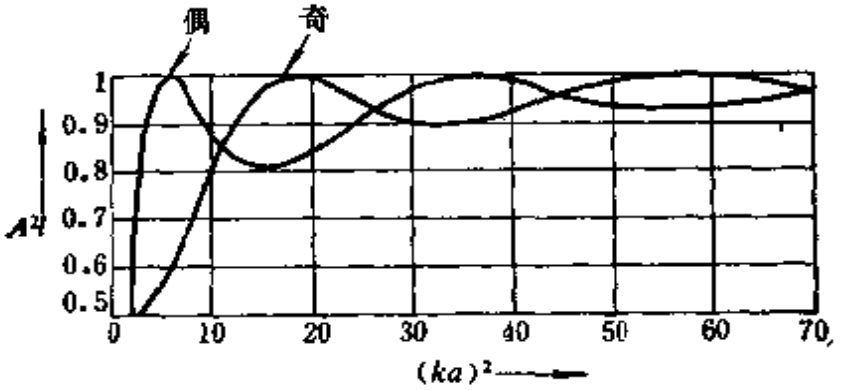


图 11　连续谱的虚态

对于 $k_0a\equiv C=2$，连续谱的振幅结构画在图 11 中．当 l 大并且阱外的归一化到处保持相同时，势阱内部振幅的平方用无量纲的量 A^2l 来量度．这个量与 $(Ka)^2$（即在无量纲标度中的能量）的关系，按照(26.7)式，已画在图 11 中．显然，使 A^2l 达到极大值 1 的能量值有无限多个，在这些能量值之间，A^2l 有极小值，能量愈高，极小值愈不明显（注意图 11 中略去纵坐标 0 到 0.5 这一段）．在振幅达到极大的能量下，态还保存着正*能量本征值结构的痕迹，因为这些态对应于波函数最大可能地集中于势阱内部．

* 似应为负．——译者注

因此常称之为虚态(与负能量下的"真实"本征态大不相同).

问题 27　虚　能　级

在 $x=0$ 和 $x=a$ 之间的一个势"腔"是以 $x=a$ 处的一个不透明壁(参见问题 20)为右边界的，如图 12 所示，于是在壁内($x<a$)和壁外 ($x>a$) 的波函数之间有一个小的耦合. 试证明当壁的不透明度大时，存在一系列窄的能带，在这些能带中耦合变得相当强. 数值例子：$\Omega a/\pi=50$.

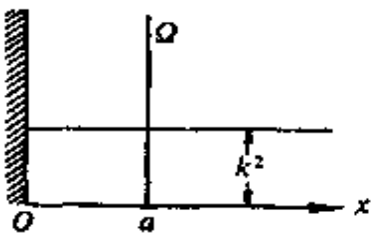


图 12　由可穿透壁围成的势腔

解　存在着一个连续能谱，它的波函数(在势腔外部归一化为单位振幅)是

$$u(x)=\begin{cases} A\sin kx, & 0<x<a \\ \sin(kx+\delta), & a<x<\infty \end{cases} \qquad (27.1)$$

按照问题 20，在具有有限不透明度 Ω 的壁上，边界条件是

$$\left.\begin{aligned} u(a+0)&=u(a-0) \\ u'(a+0)&=u'(a-0)+2\Omega u(a) \end{aligned}\right\} \qquad (27.2)$$

或，以 (27.1) 式代入，则有

$$\sin(ka+\delta)=A\sin ka$$

$$k\cos(ka+\delta)=kA\cos ka+2\Omega A\sin ka.$$

由此可得决定相角 δ 的关系式

$$\cot(ka+\delta)-\cot ka=2\frac{\Omega}{k} \qquad (27.3)$$

以及势腔内部的波幅 A 的关系式

$$1/A^2=1+4\frac{\Omega}{k}\sin ka\cos ka+4\frac{\Omega^2}{k^2}\sin^2 ka \qquad (27.4)$$

或

$$1/A^2=1+2\frac{\Omega}{k}\sin 2ka+2\frac{\Omega^2}{k^2}(1-\cos 2ka) \qquad (27.4')$$

对于不可穿透的壁($\Omega\to\infty$)振幅 A 趋于零，即外部的振动不可能扩展到势腔内部；这时势腔内部与外部完全不存在耦合. 对于大的然而是有限的 Ω，将允许有一个小的振幅 $A\sim\frac{k}{\Omega}$，如果(27.4)中的三角函数接近于零，振幅 A 甚至会变得很大.

设 ka 是一个比 π 大得多的数，则在使三角函数变化一整个周期的 k 间隔中，Ω/k 几乎保持不变(即如果 $ka\gg 2\pi$). 这样，在合理的近似下，由(27.4′)对 $2ka$ 求微分，并保持 Ω/k 不变，可以定出 A^2 的极大和极小：

$$\left[\frac{\partial(1/A^2)}{\partial(2ka)}\right]_{\Omega/k}=2\frac{\Omega}{k}\cos 2ka+2\frac{\Omega^2}{k^2}\sin 2ka=0$$

或

$$\tan 2ka=-\frac{k}{\Omega}. \tag{27.5}$$

设(27.5)式的解为 k_n，并引用缩写

$$k_n/\Omega=\varepsilon_n \tag{27.6}$$

则得

$$2k_na=n\pi-\tan^{-1}\varepsilon_n \tag{27.7}$$

其中 n 为整数. 因此

$$\sin 2k_na=(-1)^{n+1}\frac{\varepsilon_n}{\sqrt{1+\varepsilon_n^2}};\qquad \cos 2k_na=(-1)^n\frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_n^2}}.$$

将它们代入(27.4′)，$1/A^2$ 的极值变为

$$1/A_n^2=1-\frac{2}{\sqrt{1+\varepsilon_n^2}}+\frac{2}{\varepsilon_n^2}\left(1-\frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_n^2}}\right),\ n=2,\ 4,\ 6,\cdots \tag{27.8a}$$

和

$$1/A_n^2=1+\frac{2}{\sqrt{1+\varepsilon_n^2}}+\frac{2}{\varepsilon_n^2}\left(1+\frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon_n^2}}\right),\ n=1,\ 3,\ 5,\cdots \tag{27.8b}$$

由于 $\varepsilon_n\ll 1$，这些表示式可展开为 ε_n 的幂级数：

$$1/A_n^2=\frac{1}{4}\varepsilon_n^2=\frac{k_n^2}{4\Omega^2},\ n=2,\ 4,\ 6,\ \cdots \qquad (27.9a)$$

和

$$1/A_n^2=\frac{4}{\varepsilon_n^2}+2-\frac{1}{4}\varepsilon_n^2\simeq\frac{4\Omega^2}{k_n^2},\ n=1,\ 3,\ 5,\ \cdots \qquad (27.9b)$$

所有 ε_n^4 及更高次项均已略去.

对于偶的 n, 即对于 ka 接近 π 的整数倍的情形, 我们得到一个极大振幅

$$A_{n,\text{极大}}=\frac{2\Omega}{k_n}\gg 1 \qquad (27.10)$$

而对于奇的 n, 即对于 ka 接近 π 的半整数倍的情形, 我们得到一个极小振幅

$$A_{n,\text{极小}}=\frac{k_n}{2\Omega}\ll 1 \qquad (27.11)$$

只有在导致(27.10)式成立的能量值附近, 才存在明显的耦合, 使得外部的波函数穿透势垒而进入内部. 用经典语言来说, 这意味着存在一系列共振频率, 在这些频率上, 势腔可以被外部振动激发到它的本征振动状态.

按照 (27.7) 式, 这些共振出现在 $k_n a$ 与 $n\pi$ (n 是整数) 只有少许偏离的地方, 亦即对于这样的 k 值, 由(27.1)式给出的势腔内部的波函数非常接近于下列不可穿透壁 ($\Omega\to\infty$) 的本征函数:

$$u_n(x)=A\sin\frac{n\pi x}{a},\quad \text{并有}\ u_n(a)=0.$$

于是共振能级接近于 $\Omega\to\infty$ 的腔的能量本征值. 因此称这些能级为这系统的虚能级.

作为一个具体例子, 我们选取数值 $\Omega a=50\pi=157.08$, 在 $2ka=19\pi$ 和 $2ka=21\pi$ 之间的振幅 A 画在图13中. 这时 $\frac{k}{2\Omega}\simeq 0.1$, 容易看出, A 一般地也是这个数量级, 除非在稍低于 $2ka=20\pi$ 的

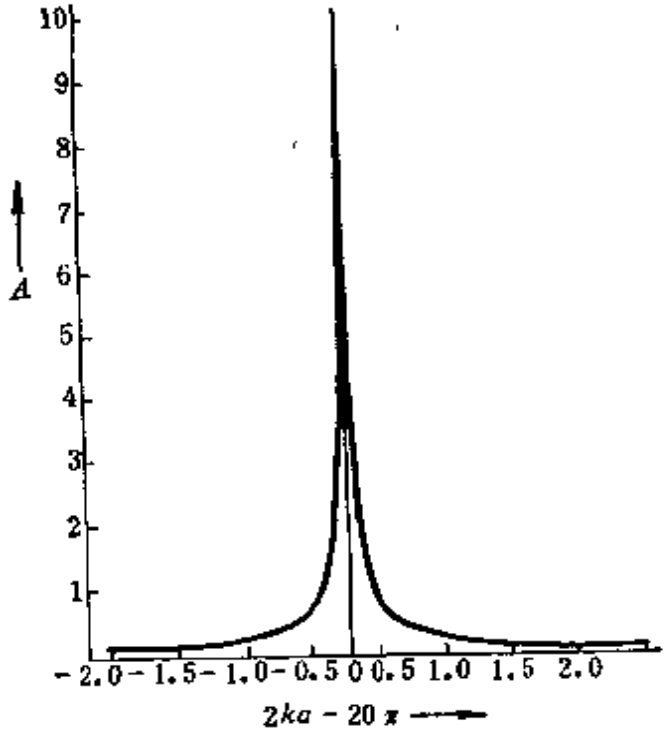


图 13　共振能级: 波幅与能量的关系

一个很窄的区域内，在此区域内 A 有一个典型的共振峰. 在由

$$2k_0a = 2n\pi - \tan^{-1}\frac{k}{\Omega}$$

确定的共振能量周围，$1/A^2$ 的级数展开近似地给出

$$1/A^2 = \frac{k^2}{4\Omega^2}\left[1+\frac{4\Omega^4}{k^4}(2ka-2k_0a)^2\right], \qquad (27.12)$$

由此得出谱线宽度的数量级是

$$\Delta k \sim \frac{k^2}{4\Omega^2 a}. \qquad (27.13)$$

现在来讨论(27.3)式的相角. 利用简单的三角运算可得

$$\tan\delta = -\frac{\Omega}{k}\,\frac{1-\cos 2ka}{1+\frac{\Omega}{k}\sin 2ka} \qquad (27.14)$$

如果 $\frac{\Omega}{k}$ 很大，通常可以略去上式分母中的因子 1，因此(27.14)式与 Ω 无关:

$$\tan\delta \simeq -\frac{1-\cos 2ka}{\sin 2ka} - -\tan ka$$

这又相当于一个不可穿透的壁，其在 $x>a$ 处的波函数为

$$u(x)=\sin k(x-a)$$

只有在

$$\sin 2ka=-\frac{k}{\Omega} \tag{27.15}$$

的附近上述近似才不再成立. (27.15)式有两种类型的解，即 $2ka$ 或者稍大于 $(2n+1)\pi$ 或者稍小于 $2n\pi$. 对第一种情形，分子 $1-\cos 2ka$ 接近于2，并且差不多是常数. 于是 $\tan\delta$ 通过一个奇异点，即 δ 变成 π 的半整数倍，譬如说 $\frac{\pi}{2}$. 在这个区域内相角曲线有一个平稳的坡度，并且不呈现很特别的行为. 另一方面，如果 $2ka$ 在 $2n\pi$ 附近，分子有一个零点，它与由(27.15)决定的分母的零点非常接近但并不重合，因此按(27.14)式，$\tan\delta$ 在一个非常短的 $2ka$ 间隔内通过无穷大(即相角 $\frac{\pi}{2}$)和零(即相角 π). 正如上面已看到的，共振发生在接近于 $2ka=2n\pi$ 的区域内，而振动系统在通过共振时呈现一个大约为 π 的相位跳变是很普遍的现象.

作为数值例子，图14中画出了相角通过如图13所示的 $2ka$ 间隔的情形. 如果 Ω 是无穷大，则给出的是虚线，这时相角在 $2ka=20\pi$ (这数值是前面任意引进的)处的跳变等于 π；这个跳变使得在能量增加时波函数中的归一化常数突然反号. 但是这没有任何物理意义，因为 π 的任何整数倍总可以加到相角上去. 然而对于上面用到的有限的 Ω 值，相角曲线是图14中的实线，这时给出一系列属于不同能量的波函数，它们和不可穿透壁的相应波函数在相角上相差不大，而是连续地通过共振能量，于是相角跳变具有实际的意义.

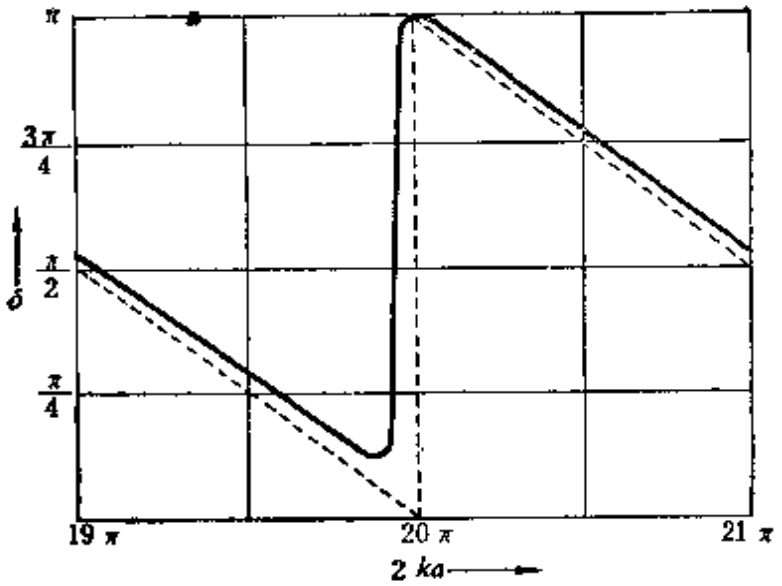


图 14　共振能级：相角与能量的关系

问题 28　周　期　势

试对于周期势导出波函数所满足的一般条件，并求出决定能谱的一般关系式.

解　如果 $V(x)$ 是一个周期为 a 的周期性势场，则薛定谔方程对于所有移动整数倍 a 的平移变换

$$V(x+a)=V(x);\ x\to x+na,\ n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \tag{28.1}$$

是不变的. 设 $u_1(x)$ 和 $u_2(x)$ 是薛定谔方程的二个线性独立的解，则 $u_1(x+a)$ 和 $u_2(x+a)$ 必定也是方程的解. 由于方程的任意解可以表示为 $u_1(x)$ 和 $u_2(x)$ 的线性组合，因此 $u_1(x+a)$ 和 $u_2(x+a)$ 也必定可以表示为

$$\left.\begin{aligned} u_1(x+a)&=C_{11}u_1(x)+C_{12}u_2(x)\\ u_2(x+a)&=C_{21}u_1(x)+C_{22}u_2(x)\end{aligned}\right\} \tag{28.2}$$

可以证明下述定理 (Floquet 定理)：在上述这些解中，存在两个具有性质

$$\psi(x+a)=\lambda\psi(x) \tag{28.3}$$

的解(记作 ψ_1 和 ψ_2)，其中 λ 是一常数因子. 因此

$$\psi(x+na)=\lambda^n\psi(x);\quad n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \tag{28.3'}$$

证明如下：令

$$\psi(x)=Au_1(x)+Bu_2(x) \tag{28.4}$$

利用(28.2)，得

$$\psi(x+a)=(AC_{11}+BC_{21})u_1(x)+(AC_{12}+BC_{22})u_2(x)$$

上式右边等于 $\lambda\psi(x)$，如果

$$\left.\begin{aligned}AC_{11}+BC_{21}&=\lambda A;\\ AC_{12}+BC_{22}&=\lambda B.\end{aligned}\right\} \tag{28.5}$$

(28.5)式是 A 和 B 的线性齐次联立方程，它有非零解的充要条件是它的系数行列式为零：

$$\begin{vmatrix}C_{11}-\lambda & C_{21}\\ C_{12} & C_{22}-\lambda\end{vmatrix}=0. \tag{28.6}$$

(28.6)式是 λ 的二次方程，由它的两个解 λ_1 和 λ_2 可得出两个函数 ψ_1 和 ψ_2.

从(28.3)可见，朗斯基行列式

$$D=\psi_1\psi_2'-\psi_2\psi_1'$$

满足关系式

$$D(x+a)=\lambda_1\lambda_2D(x).$$

但按照格林定理，D 是一个与 x 无关的常数．因此得到

$$\lambda_1\lambda_2=1 \tag{28.7}$$

当考虑(28.3')式时，对参数 λ_1、λ_2 可以有更进一步的了解．设 $|\lambda|>1$，则 ψ 的振幅将随着 $x\to\infty$ 而无限制地增加，并随 $x\to-\infty$ 而无限制地减小．如果 $|\lambda|<1$，则情况正好相反．但是这样的解不可能归一化，甚至对于更广义的平面波归一化(下面将采用这种归一化)也是如此．因此物理解只能在 $|\lambda|=1$ 时存在，记

$$\lambda_1=e^{iKa};\quad \lambda_2=e^{-iKa} \tag{28.8}$$

其中 K 是实数．由于 $e^{2\pi in}=1$，我们可以将所有正的和负的实数

K约化到下述区间中

$$-\frac{\pi}{a}\leqslant K\leqslant+\frac{\pi}{a}, \tag{28.9}$$

它给出所有可能的波函数的完全集合. 因此,对于所有的物理解,有

$$\psi(x+na)=e^{inKa}\psi(x) \tag{28.10}$$

上式只有在

$$\psi(x)=e^{iKx}u_K(x) \tag{28.11}$$

并且$u_K(x)$是一个周期函数,即

$$u_K(x)=u_K(x+a) \tag{28.12}$$

时才能成立. 这个结果称为布洛赫定理

现在再来讨论能谱. 如同(28.4)式一样, 用定义在区间$0\leqslant x\leqslant a$中的任意二个解u_1和u_2来构成ψ. 则在下一个周期$a\leqslant x\leqslant 2a$中,按照(28.10)式有

$$\psi(x)=e^{iKa}[Au_1(x-a)+Bu_2(x-a)] \tag{28.13}$$

其中自变量$x-a$正好落在第一个间隔$0\leqslant x\leqslant a$中. 在连接点$x=a$处,表示式(28.4)和(28.13)必须相等,并且它们的微商也必须相等. 因此得到两个方程

$$\left.\begin{aligned}Au_1(a)+Bu_2(a)&=e^{iKa}[Au_1(0)+Bu_2(0)]\\Au_1'(a)+Bu_2'(a)&=e^{iKa}[Au_1'(0)+Bu_2'(0)]\end{aligned}\right\} \tag{28.14}$$

上述对于A和B的线性齐次联立方程有解的充要条件,是它的系数行列式为零:

$$\begin{vmatrix}u_1(a)-e^{iKa}u_1(0) & u_2(a)-e^{iKa}u_2(0)\\u_1'(a)-e^{iKa}u_1'(0) & u_2'(a)-e^{iKa}u_2'(0)\end{vmatrix}=0$$

展开行列式,最后得到

$$\cos Ka=\frac{[u_1(0)u_2'(a)+u_1(a)u_2'(0)]-[u_2(0)u_1'(a)+u_2(a)u_1'(0)]}{2(u_1u_2'-u_2u_1')} \tag{28.15}$$

其中分母是朗斯基行列式. 因为朗斯基行列式对任意自变量是一个常数,所以将自变量略去不写.

(28.15)式给出了本征值存在的条件. 它只有在(28.15)式右边的绝对值 $\leqslant 1$ 时才能被满足; 也只有在这种情况下才能算出 K 的值. 满足此条件的能量间隔与不满足此条件的能量间隔是交替出现的, 因此得到的不是窄的能级而是一系列交替出现的容许能带和禁戒能带. 在(28.15)式中取 $\cos Ka=\pm 1$ 可以求得能带的边界.

注 由于 u_1 和 u_2 可以完全等价地用任意另外两个函数 v_1 和 v_2 的线性组合来代替, 因而(28.15)式也可以用这些函数来表示. 然而这样的表示式必定给出相同的能带,要看出这一点并不难. 将

$$u_1=c_{11}v_1+c_{12}v_2 \quad u_2=c_{21}v_1+c_{22}v_2$$

代入(28.15)式; 通过简单的计算可以证明,只要 c_{ik} 的行列式不等于零,得到的表示式的形式与(28.15)完全相同,只不过将 u_1, u_2 换成 v_1, v_2.

问题 29 狄拉克梳状势

设一周期性势由一系列相距为 a 的狄拉克函数构成:

$$V(x)=\frac{\hbar}{m}\Omega\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta(x+na) \tag{29.1}$$

试确定这个势的能带.

解 我们从基本解

$$u_1(x)=e^{ikx};\quad u_2(x)=e^{-ikx} \tag{29.2}$$

出发. 如果

$$u(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}(\text{在 } 0<x<a \text{ 间隔中}) \tag{29.3}$$

是在问题 28 意义上的物理解,则有

$$u(x)=e^{iKa}[Ae^{ik(x-a)}+Be^{-ik(x-a)}](\text{在 } a<x<2a \text{ 间隔中}) \tag{29.4}$$

现在,在 $x=a$ 处的边界条件是

$$\left.\begin{aligned}u(a+0)&=u(a-0)\\ u'(a+0)&=u'(a-0)+2\Omega u(a)\end{aligned}\right\} \tag{29.5}$$

因此

$$e^{iKa}(A+B)=Ae^{ika}+Be^{-ika} \tag{29.6a}$$

并且

$$ike^{iKa}(A-B)=ik(Ae^{ika}-Be^{-ika})+2\Omega(Ae^{ika}+Be^{-ika}) \tag{29.6b}$$

(29.6a, b)构成一组对于 A 和 B 的线性齐次联立方程,它的行列式必须等于零. 将行列式直接展开后就得到

$$\cos Ka=\cos ka+\frac{\Omega}{k}\sin ka \tag{29.7}$$

因此能量本征值的带由下式决定

$$\left|\cos ka+\frac{\Omega}{k}\sin ka\right|\leqslant 1 \tag{29.8}$$

或

$$\left|\cos\left(ka-\tan^{-1}\frac{\Omega a}{ka}\right)\right|=\frac{1}{\sqrt{1+(\Omega a/ka)^2}}; \tag{29.9}$$

于是能量由下式给出

$$E=\frac{\hbar^2}{2ma}(ka)^2 \tag{29.10}$$

在下面一些图中画出了 $\Omega a=4$ 的结果. (29.9)式左右两边作为 ka 的函数画在图 15 中,它们的交点用小圆圈标出,条件(29.9)成立的间隔在 ka 轴上用粗线标出. 带的上限出现在 ka 等于 π 整数倍处,这时由(29.7)式立即得出 $\cos Ka=\cos ka$. 在图 16

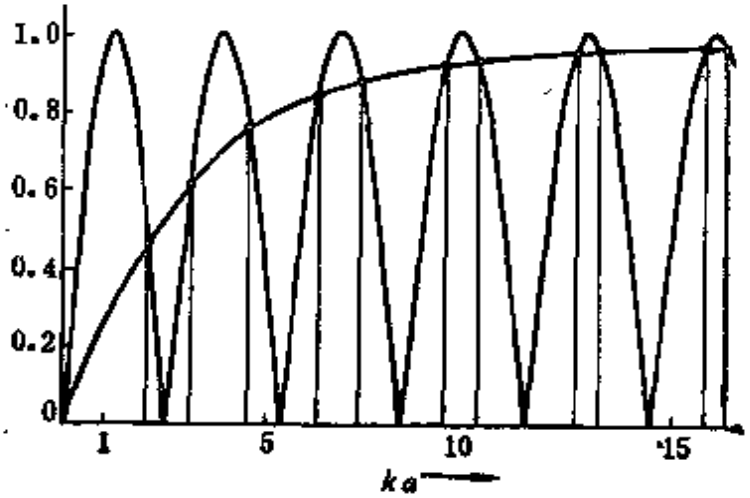


图 15 能带结构的图解法

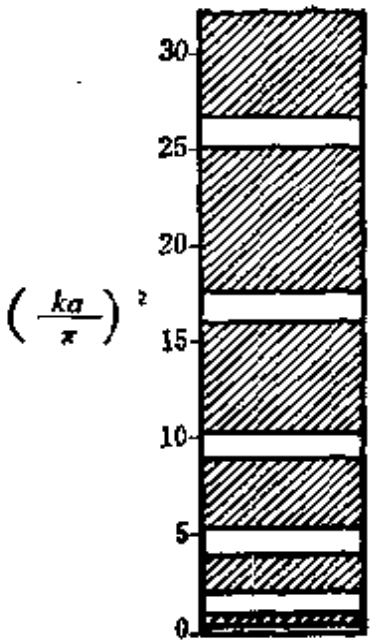


图16 狄拉克梳状势的能带结构

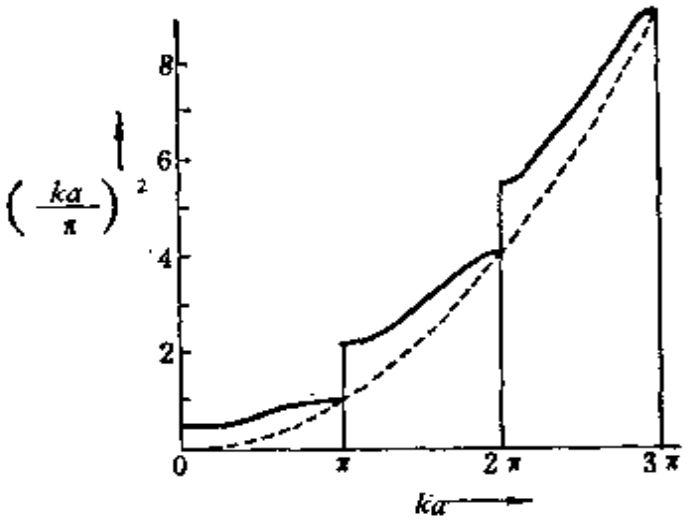


图17 对于前三个能带，能量随 ka 的变化曲线(一维布里渊区)虚线表示自由粒子能量的抛物线关系式

中将图 15 中确定的带的上下限用能量标度来表示，容许能带用斜线标出．当能量增加时，能带愈来愈宽，于是能谱愈来愈趋近于(但决不会完全达到)连续谱：即使在很高的能量下，在容许能带的上限 $ka=n\pi$ 的上面总还是有一个禁区．在图 17 和图 18 中对于前三个能带画出了能量(无量纲标度)与 Ka 的关系，在图 17 中从一个能带过渡到下一个能带时，能量值 Ka 单调地上升．在图 18 中，则约化到 $-\pi\leqslant Ka\leqslant+\pi$ 的间隔中．图 17 中的虚线是 $K=k$ 的抛物线，它通过能带的上限．

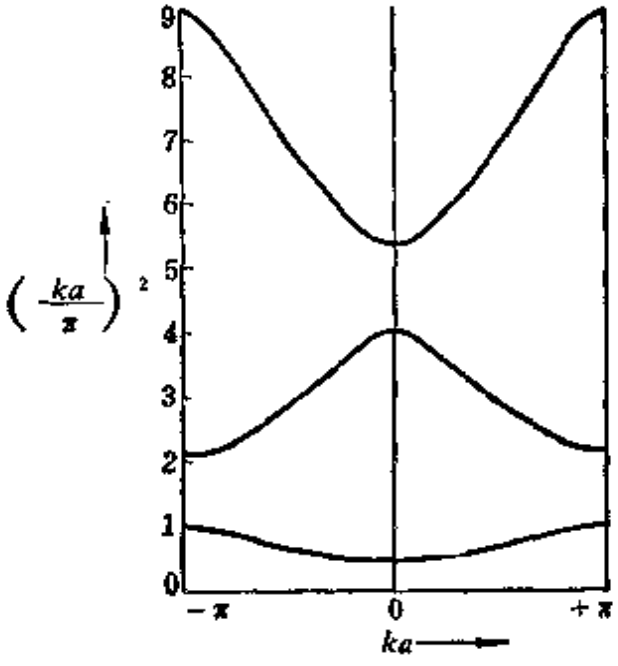


图18 图17曲线在区间 $-\pi\leqslant Ka\leqslant+\pi$ 中的表示

由于所有的图形都是对 $\Omega a=4$ 画出的，因此它们不能显示壁的不透明度对能谱的影响. 对于较小的 Ωa 值，(29.9)式右边将变得较接近于 1，于是图 15 中的相应曲线与余弦曲线的交点将更为接近它的极大值(即 1). 这意味着禁区变得愈来愈窄. 由于容许能带的上限(在 $ka=n\pi$ 处)与 Ωa 无关，因此，在图 16 中，当 Ωa 减小时，只是容许能带的下限向下移动. 如果 $\Omega a=0$，则禁区消失，这时狄拉克梳状势也就不存在，即过渡到完全不受力的情况，而给出的是不间断的连续谱. 另一方面，如果 $\Omega a\to\infty$，则容许能带简并为在 $ka=n\pi$ 处的分立能级. 在这种情况下壁将相邻的(处于两壁之间的) 势阱完全隔开，这时的能谱就和问题 18 的结果完全一样(只是本问题中的壁宽为 a，而在问题 18 中为 $2a$).

文献 Kronig R. de L., Penney, W.: Proc. Roy. Soc., London, **130**, 499(1931).

问题 30 谐 振 子

试求谐振子势

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{30.1}$$

的本征值和本征函数.

解 利用缩写

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \quad 和 \quad \lambda=\frac{m\omega}{\hbar} \tag{30.2}$$

可将薛定谔方程写成

$$\frac{d^2u}{dx^2}+(k^2-\lambda^2x^2)u=0 \tag{30.3}$$

在 $|x|\gg k/\lambda$ 时，上述微分方程的解的渐近行为如同 $e^{\pm\frac{1}{2}\lambda x^2}$. 如果将这个因子从函数 u 中分离出来，即令

$$u(x)=e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}v(x) \tag{30.4}$$

则满足方程

$$v''-2\lambda x v'+(k^2-\lambda)v=0 \tag{30.5}$$

的函数 $v(x)$ 或是正比于 $e^{\lambda x^2}$ 或是一个多项式. 利用级数

$$v(x)=\sum_{j=0}^{\infty}a_j x^j \tag{30.6}$$

求解(30.5),则得递推关系

$$a_{j+2}=\frac{\lambda(2j+1)-k^2}{(j+2)(j+1)}a_j \tag{30.7}$$

当 $j\to\infty$ 时, $\frac{a_{j+2}}{a_j}\to\frac{2\lambda}{j}$, 这相当于 $e^{\lambda x^2}$ 级数展开时相邻系数比的渐近表示式. 因此,如果级数(30.6)不中断为多项式,解(30.4)就不可能归一化. 如果级数在 x^n 之后中断,即 $a_{n+2}=0$, 也就是说如果

$$k^2=\lambda(2n+1),$$

或者利用(30.2),如果

$$E=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right);\quad n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{30.8}$$

则级数(30.6)中断为一个 n 阶多项式, 这样就可以保证由(30.7)求出的本征函数 $u_n(x)$ 是可归一化的,并且归一化的条件是

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx u_n(x)^2=1. \tag{30.9}$$

下面列出一些最低阶的本征函数:

$$\left.\begin{aligned}
u_0&=C_0 e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_1&=C_1 x e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_2&=C_2(1-2\lambda x^2)\,e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_3&=C_3\left(x-\frac{2}{3}\lambda x^3\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_4&=C_4\left(1-4\lambda x^2+\frac{4}{3}\lambda^2 x^4\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_5&=C_5\left(x-\frac{4}{3}\lambda x^3+\frac{4}{15}\lambda^2 x^5\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},
\end{aligned}\right\} \tag{30.10}$$

其中归一化常数是

$$C_n=\left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}c_n;\ c_0=1;\ c_1=\sqrt{2\lambda};\ c_2=\frac{1}{\sqrt{2}};$$
$$c_3=\sqrt{3\lambda};\ c_4=\sqrt{\frac{3}{8}};\ c_5=\sqrt{\frac{15\lambda}{4}}\qquad (30.11)$$

图 19 画出 $n=0,\ 1,\ 2$ 的三个本征函数和相应的能级.

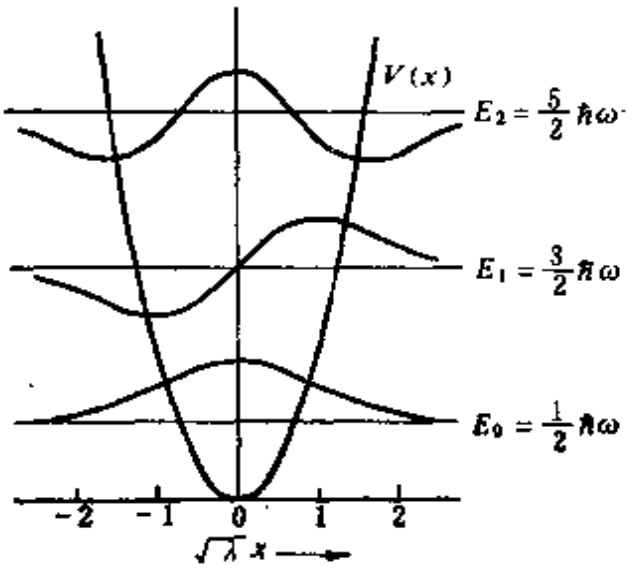


图 19　谐振子的前三个能级和本征函数(在势能曲线上画出)

可以看出，本征函数或者具有偶宇称或者具有奇宇称. 这是因为势是对称的，$V(-x)=V(x)$，因此 $u_n(-x)$ 也是微分方程的解，并且和 $u_n(x)$ 有相同的本征值(30.8). 由于不存在简并，这两个解只能相差一个因子 f，由归一化条件可知，此因子满足 $|f|^2=1$. 由于坐标 x 对原点反射两次后仍应回到原来的解，我们得到 $f^2=1$ 或 $f=\pm1$. 这表明所得到的解或者是奇宇称或者是偶宇称.

为了求得本征函数的具体表示式并显示它的宇称，引入变量

$$y=\lambda x^2,\qquad (30.12)$$

并代入 (30.5) 式；我们发现 $v(y)$ 满足合流超几何函数的微分方程

$$yv''+\left(\frac{1}{2}-y\right)v'+\left(\frac{k^2}{4\lambda}-\frac{1}{4}\right)v=0;$$

引用缩写

$$a=\frac{1}{4}-\frac{k^2}{4\lambda}=\frac{1}{4}-\frac{E}{2\hbar\omega},\qquad (30.13)$$

则上述微分方程的完全解是

$$v=A_1F_1\left(a,\frac{1}{2};\ y\right)+By^{\frac{1}{2}}{}_1F_1\left(a+\frac{1}{2},\frac{3}{2};y\right)\qquad (30.14)$$

由于合流级数 ${}_1F_1$ 是一个整函数，因此上式中第一部分是 x 的偶函数，第二部分是 x 的奇函数. 在无穷远点($y=\infty$)，v 的两部分都按 $e^y y^{a-\frac{1}{2}}$ 发散，即如果级数不为零或不中断，u 就不能归一化. 由于合流级数在它的第一个参数等于负整数时中断为多项式，因此有两种可能. 如果

$$a=-n \quad 或 \quad E_{2n}=\hbar\omega\left(2n+\frac{1}{2}\right), \tag{30.15a}$$

则第一个级数中断，这时得到一个本征函数

$$u_{2n}(x)=A\,{}_1F_1\left(-n,\frac{1}{2};\ \lambda x^2\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \tag{30.16a}$$

另一方面，如果

$$a+\frac{1}{2}=-n \quad 或 \quad E_{2n+1}=\hbar\omega\left(2n+\frac{3}{2}\right) \tag{30.15b}$$

则第二个级数中断，本征函数成为

$$u_{2n+1}(x)=Bx\,{}_1F_1\left(-n,\frac{3}{2};\ \lambda x^2\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \tag{30.16b}$$

这就完全确证了本征值公式(30.8)和本征函数(30.10).

由 (30.16a, b) 定出的多项式通常称为厄密多项式，它可定义为

$$\left.\begin{aligned} H_{2n}(\xi)&=(-1)^n\frac{(2n)!}{n!}{}_1F_1\left(-n,\frac{1}{2};\ \xi^2\right),\\ H_{2n+1}(\xi)&=(-1)^n\frac{(2n+1)!}{n!}2\xi\,{}_1F_1\left(-n,\frac{3}{2};\ \xi^2\right)\end{aligned}\right\} \tag{30.17}$$

或者

$$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \tag{30.18}$$

于是满足归一化条件(30.9)的本征函数由下列一般公式给出

$$u_n(x)=\left\{\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\right\}^{\frac{1}{2}}H_n(\sqrt{\lambda}\,x)\,e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \tag{30.19}$$

(30.19)的归一化因子可用下面的方法求得. 如果令

$$u_n=C_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi);\quad \xi=\sqrt{\lambda}\,x,$$

则从(30.9)得

$$C_n^2\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi e^{-\xi^2}[H_n(\xi)]^2=\sqrt{\lambda}$$

将上面积分中的一个 $H_n(\xi)$ 换成表示式 (30.18), 则得

$$C_n^2(-1)^n\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi H_n(\xi)\frac{d^ne^{-\xi^2}}{d\xi^n}=\sqrt{\lambda}$$

在相继进行 n 次分部积分后, 上式化为

$$C_n^2\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi e^{-\xi^2}\frac{d^nH_n(\xi)}{d\xi^n}=\sqrt{\lambda}.$$

由于 $H_n(\xi)$ 是 ξ 的 n 阶多项式, 因此微分 n 次后, 除 H_n 中的最高次项外, 其余项全部为零. 即

$$H_n(\xi)=(2\xi)^n+\cdots,$$

因此,

$$\frac{d^nH_n(\xi)}{d\xi^n}=2^nn!,$$

代入后, 得

$$C_n^2\cdot 2^nn!\sqrt{\pi}=\sqrt{\lambda}$$

这样求得的 C_n 就是(30.19)式的归一化因子.

问题 31　希耳伯空间中的谐振子

试利用算符

$$b=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p-i\omega mx);$$
$$b^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p+i\omega mx). \tag{31.1}$$

在谐振子的希耳伯空间中构成它的本征值和本征矢的系统.

解　将算符 b 和它的厄密共轭 $b^\dagger$ 代入哈密顿量

$$H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{31.2}$$

中, 则得

$$H=\frac{1}{2}\hbar\omega(bb^\dagger+b^\dagger b). \tag{31.3}$$

更进一步, 从正则对易关系 $xp-px=i\hbar$ 不难证明

$$b b^{\dagger} - b^{\dagger} b = 1, \tag{31.4}$$

(31.3)式和(31.4)式是构造希耳伯空间的数学基础.

我们假设,对于算符 $b^{\dagger}b$ 的一个本征值 λ, 至少存在一个右矢 $|\psi_\lambda\rangle$:

$$b^{\dagger} b |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle \tag{31.5}$$

并假设它是归一化的:

$$\langle\psi_\lambda|\psi_\lambda\rangle = 1, \tag{31.6}$$

用左矢 $\langle\psi_\lambda|$ 左乘(31.5)式则得

$$\langle\psi_\lambda| b^{\dagger} b |\psi_\lambda\rangle = \lambda.$$

利用厄密共轭算符的定义

$$\langle\chi| L^{\dagger} |\varphi\rangle = \langle L\chi|\varphi\rangle;$$

则有

$$\langle b\psi_\lambda | b\psi_\lambda\rangle = \lambda \tag{31.7}$$

由此可见矢量 $|b\psi_\lambda\rangle$ 模的平方为 λ, 作为一个模, λ 必须是正实数:

$$\lambda \geqslant 0 \tag{31.8}$$

其中等号只在 $b|\psi_\lambda\rangle = 0$ 时成立. 因为到此为止我们并没有对所选的 λ 作特殊的规定,因此(31.8)式对于任意本征值都成立.

其余的本征值可以用下面的办法求出, 在(31.5)式两边左乘以算符 b, 利用结合律和对易规则(31.4), 则得

$$b(b^{\dagger} b) = (b b^{\dagger}) b = (b^{\dagger} b + 1) b$$

即

$$(b^{\dagger} b + 1) b |\psi_\lambda\rangle = \lambda b |\psi_\lambda\rangle$$

或

$$(b^{\dagger} b) |b\psi_\lambda\rangle = (\lambda - 1) |b\psi_\lambda\rangle$$

这表明 $|b\psi_\lambda\rangle$ 是算符 $b^{\dagger}b$ 的属于本征值 $\lambda - 1$ 的一个本征矢. 由(31.7)式可见, $|b\psi_\lambda\rangle$ 还未归一化,归一化的本征矢是

$$|\psi_{\lambda-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} b |\psi_\lambda\rangle \tag{31.9}$$

重复运用上述构造原则,可得出一个递减的本征值序列

$$|\psi_{\lambda-n}\rangle=\frac{1}{\sqrt{\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\cdots\cdots(\lambda-n+1)}}b^n|\psi_\lambda\rangle \quad (31.10)$$

显然，$n>\lambda$ 时本征值将变成负的，但这与(31.8)式相矛盾. 为了避免出现负的本征值，只有本征值都取整数值时才行，这时序列(31.10)将会在 $|\psi_0\rangle$ 处中断，因为按照(31.9)式，$b|\psi_0\rangle=0$.

另一方面，重复运用算符 $b^\dagger$ 可以构成一个递增的本征值序列. 在(31.5)式两边左乘以 $b^\dagger$，由于

$$b^\dagger(b^\dagger b)=b^\dagger(bb^\dagger-1)=(b^\dagger b)b^\dagger-b^\dagger$$

则由(31.5)式有

$$(b^\dagger b)|b^\dagger\psi_\lambda\rangle=(\lambda+1)b^\dagger|\psi_\lambda\rangle$$

同样，矢量 $|b^\dagger\psi_\lambda\rangle$ 并未归一化：

$$\langle b^\dagger\psi_\lambda|b^\dagger\psi_\lambda\rangle=\langle bb^\dagger\psi_\lambda|\psi_\lambda\rangle=\langle(1+b^\dagger b)\psi_\lambda|\psi_\lambda\rangle=\lambda+1$$

因此归一化的本征矢是

$$|\psi_{\lambda+1}\rangle=\frac{1}{\sqrt{\lambda+1}}|b^\dagger\psi_\lambda\rangle \quad (31.11)$$

面与递增本征值相应的本征矢序列是

$$|\psi_{\lambda+n}\rangle=\frac{1}{\sqrt{\lambda(\lambda+1)(\lambda+2)\cdots\cdots(\lambda+n)}}b^{\dagger n}|\psi_\lambda\rangle \quad (31.12)$$

现在将上面的结果综合在一起. $b^\dagger b$ 的本征值是正整数 $n=0,1,2,\cdots$. 从(31.4)式可知 $bb^\dagger$ 有同样的本征矢系统，但本征值是 $n+1$. 因此(31.3)式的哈密顿算符满足关系式

$$H|\psi_n\rangle=\frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)|\psi_n\rangle;\ n=0,\ 1,\ 2,\cdots \quad (31.13)$$

这就是熟知的谐振子本征值，这一结果在问题 30 中是在薛定谔理论的框架内得到的.

希耳伯矢量 $|\psi_n\rangle$ 不是算符 b 和 $b^\dagger$ 的本征矢，但不难求出它们在 $|\psi_n\rangle$ 的希耳伯坐标系中的矩阵表示. 从(31.9)式得

$$\langle\psi_{n-1}|b|\psi_n\rangle=\sqrt{n} \quad (31.14)$$

从(31.11)式则有

$$\langle\psi_{n+1}|b^\dagger|\psi_n\rangle=\sqrt{n+1}. \tag{31.15}$$

由于 $|\psi_n\rangle$ 的正交性，其余的矩阵元都等于零．不难验证 $|\psi_n\rangle$ 的正交性：

$$\langle\psi_m|b^\dagger b\psi_n\rangle=n\langle\psi_m|\psi_n\rangle=\langle b\psi_m|b\psi_n\rangle,$$
$$\langle b^\dagger b\psi_m|\psi_n\rangle=m\langle\psi_m|\psi_n\rangle=\langle b\psi_m|b\psi_n\rangle.$$

二式相减即得

$$(n-m)\langle\psi_m|\psi_n\rangle=0.$$

因此或者 $n=m$，或者 $\langle\psi_m|\psi_n\rangle=0$．矩阵(31.14)和(31.15)可写成下面的形式

$$b=\begin{pmatrix}0&0&0&0&\cdots\\ \sqrt{1}&0&0&0&\cdots\\ 0&\sqrt{2}&0&0&\cdots\\ 0&0&\sqrt{3}&0&\cdots\\ \cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix};\quad b^\dagger=\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}&0&0&\cdots\\ 0&0&\sqrt{2}&0&\cdots\\ 0&0&0&\sqrt{3}&\cdots\\ \cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix} \tag{31.16}$$

文献　Becker, R. Leibfried, G.: Z. Physik **125**, 347(1949).

问题 32　利用希耳伯空间算符构成谐振子本征函数

试将问题31中的算符 b 和 $b^\dagger$ 转换到薛定谔理论，并由此求谐振子的本征函数．

解　从(31.1)式可见 b 和 $b^\dagger$ 是算符 p 和 x 的线性组合．在薛定谔理论中，x 是一经典变量，并且

$$p=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \tag{32.1}$$

是一微分算符．为方便起见，选择

$$l=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{32.2}$$

作为长度单位，并将所有关系式中的 x 都换成无量纲变量

$$\xi=\frac{x}{l} \tag{32.3}$$

于是得到

$$b=-\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right);\quad b^{\dagger}=\frac{i}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right) \tag{32.4}$$

按照问题(31)得到的结果,最低的本征态由 $b\psi_0=0$ 或

$$\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\psi_0(\xi)=0 \tag{32.5}$$

确定. 这是一个微分方程,它的完全解是

$$\psi_0=C_0e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

归一化常数 C_0 由下式决定:

$$\langle\psi_0|\psi_0\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi_0^2=l\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi\psi_0(\xi)^2=1$$

由此可得

$$\psi_0(\xi)=\pi^{-\frac{1}{4}}l^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{32.6}$$

应用 $b^{\dagger}$ 可以构成本征函数的完全序列:

$$\psi_{n+1}=\frac{i}{\sqrt{2(n+1)}}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\psi_n \tag{32.7}$$

因此这个序列可以由(32.6)式重复微分而得到. 如果将 ψ_n 写成

$$\psi_n=C_nH_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \tag{32.8}$$

则,按照(32.7)式,函数 $H_n(\xi)$ 将是变量 ξ 的一个 n 阶多项式. 从(32.7)式,可得递推关系

$$C_{n+1}H_{n+1}=\frac{-i}{\sqrt{2(n+1)}}C_n(H_n'-2\xi H_n) \tag{32.9}$$

如果选择归一化常数使

$$C_{n+1}=\frac{i}{\sqrt{2(n+1)}}C_n, \tag{32.10}$$

则(32.9)式变成厄密多项式

$$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$$

的递推关系式，即

$$H_{n+1}=-(H_n'-2\xi H_n)$$

与(30.19)式比较，可见除因子 i 之外，那里导出的归一化因子

$$C_n=\left\{\frac{1}{2^n n!}\frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}}\right\}^{1/2}\qquad \text{其中 } \lambda=\frac{1}{l^2}$$

满足(32.10)式. 由于归一化仍然在每一个本征函数中留下一个不确定的相因子，因此因子 i 是无关紧要的.

问题 33　谐振子的矩阵表示

设谐振子的哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2M}p^2+\frac{M\omega^2}{2}x^2 \tag{33.1}$$

试求在 H 对角化的希耳伯坐标系中动量 p 和坐标 x 的矩阵表示 p_{mn} 和 x_{mn}. 能量本征值是什么?

解　我们从哈密顿量的对角性出发，即

$$H_{mn}=\frac{1}{2M}\sum_k p_{mk}p_{kn}+\frac{M\omega^2}{2}\sum_k x_{mk}x_{kn}=E_n\delta_{mn}, \tag{33.2}$$

其中 E_n 是能量本征值. 更进一步，利用关系式(见问题 8)

$$\frac{\partial H}{\partial x}=-\frac{i}{\hbar}(Hp-pH);\quad \frac{\partial H}{\partial p}=+\frac{i}{\hbar}(Hx-xH) \tag{33.3}$$

以及 $\partial H/\partial x=M\omega^2 x$, $\partial H/\partial p=p/M$, 用矩阵记号写为

$$M\omega^2 x_{mn}=-\frac{i}{\hbar}\sum_k(H_{mk}p_{kn}-p_{mk}H_{kn});$$

$$\frac{1}{M}p_{mn}=+\frac{i}{\hbar}\sum_k(H_{mk}x_{kn}-x_{mk}H_{kn}).$$

利用(33.2)式可以将上式化为

$$\left.\begin{aligned} M\omega^2 x_{mn} &= -\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)p_{mn}; \\ \frac{1}{M}p_{mn} &= +\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)x_{mn} \end{aligned}\right\} \tag{33.4}$$

这两个关于 x_{mn} 和 p_{mn} 的齐次方程，只有在下述情况下才是相容的：或者这两个矩阵元都等于零，或者它们的系数行列式等于零，即

$$(E_m - E_n)^2 = (\hbar\omega)^2. \tag{33.5}$$

如果将本征值按大小次序排列

$$\cdots < E_1 < E_2 < E_3 < \cdots.$$

则两个相邻本征值之差等于 $\hbar\omega$，并且

$$E_n = \hbar\omega(n+\varepsilon); \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{33.6}$$

其中 ε 是一个对于所有本征值都相同的常数. 这样一来，只有 $p_{n,n\pm1}$ 和 $x_{n,n\pm1}$ 不等于零，并且从(33.4)式可得

$$p_{n,n\pm1} = \mp iM\omega x_{n,n\pm1} \tag{33.7}$$

现在我们对哈密顿量作更深入的了解. 从 p^2 和 x^2 的矩阵元出发，按照(33.7)式有

$$(p^2)_{nk} = p_{n,n+1}p_{n+1,k} + p_{n,n-1}p_{n-1,k}$$

显然，只有在 $k=n$, $n+2$, $n-2$ 时，$(p^2)_{nk}$ 才不为零. 对于 x^2 的矩阵元也如此. 将它们代入(33.2)式，则得哈密顿量的非对角矩阵元

$$H_{n,n+2} = \frac{1}{2M}p_{n,n+1}p_{n+1,n+2} + \frac{M\omega^2}{2}x_{n,n+1}x_{n+1,n+2}$$

$$= x_{n,n+1}x_{n+1,n+2}\left[-\frac{1}{2M}M^2\omega^2 + \frac{M\omega^2}{2}\right] = 0$$

同样可得 $H_{n,n-2}=0$. 这与 H 的对角性(从这一点出发，我们得到(33.4)式)完全一致. 剩下的对角矩阵元是

$$E_n = \frac{1}{2M}(p_{n,n+1}p_{n+1,n} + p_{n,n-1}p_{n-1,n}) + \frac{M\omega^2}{2}(x_{n,n+1}x_{n+1,n} + x_{n,n-1}x_{n-1,n}),$$

按(33.7)式，上式第一项与第二项相等，因此得到

$$E_n = M\omega^2(x_{n,n+1}x_{n+1,n}+x_{n,n-1}x_{n-1,n}). \tag{33.8}$$

(33.8)式和(33.6)式给出 x 矩阵元之间的一个关系. 另一个关系可由 x 是厄密算符得到，即

$$x_{n\pm1,n} = x^*_{n,n\pm1} \tag{33.9}$$

因此有

$$\hbar\omega(n+\varepsilon) = M\omega^2(|x_{n,n+1}|^2+|x_{n-1,n}|^2) \tag{33.10}$$

引用缩写

$$\frac{M\omega}{\hbar}|x_{n-1,n}|^2 = f(n), \tag{33.11}$$

(33.10)式可写成

$$n+\varepsilon = f(n+1)+f(n),$$

假使 $f(n)$ 是 n 的幂级数，不难得到这个函数方程的唯一解是

$$f(n) = \frac{1}{2}\left(n+\varepsilon-\frac{1}{2}\right). \tag{33.12}$$

把它代入(33.11)式，则得

$$x_{n,n+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}\left(n+\varepsilon+\frac{1}{2}\right)} \tag{33.13}$$

现在来决定常数 ε. (33.10)式的右边不可能是负的；因此(33.10)式左边的能量值也不可能是负的. 假设 $n=0$ 是最小的 n 值，则矩阵元

$$x_{-1,0} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M}\left(\varepsilon-\frac{1}{2}\right)} \tag{33.14}$$

必定是零. 如果它不等于零，就可以利用(33.10)式递推计算 $x_{n-1,n}$ 的值，一直到 $n=-\infty$，而这是与 $n+\varepsilon>0$ 相矛盾的. 因此，由 $x_{-1,0}=0$ 得出

$$\varepsilon = \frac{1}{2}, \tag{33.15}$$

因而能量本征值(33.6)变成

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{33.16}$$

并且按照(33.9)式和(33.13)式，x 的矩阵元是

$$x_{n,n+1}=\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}(n+1)};\quad x_{n,n-1}=\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}n} \tag{33.17}$$

问题 34　谐振子的动量空间波函数

试确定动量空间中的谐振子波函数.

解　由于

$$V(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2, \tag{34.1}$$

显然在这种情况下 $V(x)$ 的傅里叶变换并不存在，因此不能利用积分方程(14.6). 为此我们仍然回到定义

$$u(x)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}dke^{ikx}f(k); \tag{34.2}$$

$$f(k)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}dxe^{-ikx}u(x). \tag{34.3}$$

将(34.2)式代入薛定谔方程

$$\frac{d^2u}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{m\omega^2}{2}x^2\right]u=0, \tag{34.4}$$

利用

$$\frac{d^2u}{dx^2}=-(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}dkk^2e^{ikx}f(k)$$

以及(连续两次分部积分)

$$x^2u=-(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}dke^{ikx}f''(k),$$

则(34.4)式变成

$$(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}dke^{ikx}\left\{-k^2f(k)+\frac{2mE}{\hbar^2}f(k)+\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2f''(k)\right\}=0. \tag{34.5}$$

利用问题 30 中已经用过的缩写

$$\lambda=\frac{m\omega}{\hbar};\quad \mu=\frac{E}{\hbar\omega} \tag{34.6}$$

我们由(34.4)式和(34.5)式将谐振子问题在坐标空间和在动量空间的相似特征概括如下：

坐 标 空 间	动 量 空 间
$u''+(2\mu\lambda-\lambda^2x^2)u=0$	$f''+\left(\frac{2\mu}{\lambda}-\frac{k^2}{\lambda^2}\right)f=0$
$\tilde{x}=\sqrt{\lambda}x$	$\tilde{k}=\frac{k}{\sqrt{\lambda}}$
$\frac{d^2u}{d\tilde{x}^2}+(2\mu-\tilde{x}^2)u=0$	$\frac{d^2f}{d\tilde{k}^2}+(2\mu-\tilde{k}^2)f=0$

因此，f 与 $\tilde{k}$ 的函数关系，除归一化外，和 u 与 $\tilde{x}$ 的函数关系相同．在问题14的末尾已证明，从

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx|u(x)|^2=1$$

可得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dk|f(k)|^2=1,$$

于是我们得到

$$u(x)=\lambda^{1/4}\tilde{u}(\tilde{x});\quad f(k)=\lambda^{-1/4}\tilde{f}(\tilde{k})$$

其中 $\tilde{f}$ 与 $\tilde{k}$ 的函数关系和 $\tilde{u}$ 与 $\tilde{x}$ 的函数关系相同，后者的函数形式在问题30中已经确定．

问题35 非 谐 振 子

设非谐振子的势是

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2+\varepsilon_1\left(\frac{x}{l}\right)^3+\varepsilon_2\left(\frac{x}{l}\right)^4;\quad l=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{35.1}$$

试用微扰法求一级和二级近似下的能级表示式．

解 谐振子能量是

$$E_n^0=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \tag{35.2}$$

归一化本征函数是

$$u_n^0(x) = (2^n n! l\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi); \quad \xi = x/l \tag{35.3}$$

在一级近似下能级的移动等于微扰能量的对角矩阵元

$$\Delta^{(1)} E_n = E_n - E_n^0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\varepsilon_1 \xi^3 + \varepsilon_2 \xi^4) [u_n^0(x)]^2. \tag{35.4}$$

由于$[u_n^0(x)]^2$是x的偶函数，微扰项$\varepsilon_1\xi^3$对$\Delta^{(1)}E_n$的贡献为零，$\varepsilon_2\xi^4$的贡献

$$\Delta^{(1)} E_n = \varepsilon_2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \ \xi^4 [u_n^0(\xi)]^2$$

可以用类似求归一化积分的办法来计算，即把积分号内的一个$H_n(\xi)$用多项式表示，而另一个写成

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \tag{35.5}$$

这样，在连续n次分部积分后得到

$$\Delta^{(1)} E_n = \frac{\varepsilon_2}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (\xi^4 H_n(\xi))$$

$\xi^4 H_n(\xi)$的前几项是

$$\xi^4 H_n(\xi) = 2^n \left\{ \xi^{n+4} - \frac{1}{2}\binom{n}{2} \xi^{n+2} + \frac{3}{4}\binom{n}{4} \xi^n \cdots \right\} \tag{35.6}$$

因此将$n+4$次的多项式经n次微分后得

$$\frac{d^n}{d\xi^n}(\xi^4 H_n) = 2^n \left\{ \frac{(n+4)!}{4!} \xi^4 - \frac{1}{2}\binom{n}{2} \frac{(n+2)!}{2!} \xi^2 + \frac{3}{4}\binom{n}{4} n! \right\}$$

利用熟知的积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi}; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, \xi^2 e^{-\xi^2} = \frac{1}{2}\sqrt{\pi};$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, \xi^4 e^{-\xi^2} = \frac{3}{4}\sqrt{\pi} \tag{35.7}$$

最后得到

$$\Delta^{(1)} E_n = \frac{3}{4} \varepsilon_2 (2n^2 + 2n + 1) \tag{35.8}$$

一级微扰的计算结果可定性解释如下．在势中的小附加项

$\varepsilon_1\xi^3$ 使抛物线 $\left(V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)$ 发生一个小的不对称性，然而在较低的能量下这种不对称性几乎不改变抛物线的宽度．因此振动质点的运动仍然被限制在和谐振子情况相同的宽度范围内，因此有理由认为它的能量将和谐振子情况一样．然而附加项 $\varepsilon_2\xi^4$ 的影响则不同，它使抛物线的两边对称地升高(对 $\varepsilon_2>0$)或降低(对 $\varepsilon_2<0$)，即使在最低的能量下也如此．抛物线宽度的变窄($\varepsilon_2>0$)或变宽($\varepsilon_2<0$)将会使所有的能级升高($\varepsilon_2>0$)或降低($\varepsilon_2<0$)，这种改变与(35.8)的符号一致．

在二级近似下，除考虑(35.2)和(35.8)外，还要加上另一项能量修正

$$\Delta^{(2)}E_n=\sum_m\frac{|\langle n|\varepsilon_1\xi^3+\varepsilon_2\xi^4|m\rangle|^2}{E_n^0-E_m^0}. \tag{35.9}$$

对于谐振子只有下面一些非对角矩阵元不为零，并可用与计算对角矩阵元(35.8)相同的方法把它们计算出来：

$$\left.\begin{aligned}
&\langle n|\xi^3|n+1\rangle=3\left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{3}{2}};\quad \langle n|\xi^3|n-1\rangle=3\left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{3}{2}};\\
&\langle n|\xi^3|n+3\rangle=\left\{\frac{1}{8}(n+3)(n+2)(n+1)\right\}^{\frac{1}{2}};\\
&\langle n|\xi^3|n-3\rangle=\left\{\frac{1}{8}\,n(n-1)(n-2)\right\}^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}\right\} \tag{35.10}$$

和

$$\left.\begin{aligned}
&\langle n|\xi^4|n+2\rangle=\sqrt{(n+2)(n+1)}\left(n+\frac{3}{2}\right);\\
&\langle n|\xi^4|n-2\rangle=\sqrt{n(n-1)}\left(n-\frac{1}{2}\right);\\
&\langle n|\xi^4|n+4\rangle=\frac{1}{4}\sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)};\\
&\langle n|\xi^4|n-4\rangle=\frac{1}{4}\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}
\end{aligned}\right\} \tag{35.11}$$

利用这些矩阵元以及一般公式(35.9)则得

$$\Delta^{(2)}E_n=-\frac{\varepsilon_1^2}{\hbar\omega}\cdot\frac{15}{4}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right)$$
$$-\frac{\varepsilon_2^2}{\hbar\omega}\cdot\frac{1}{8}\left(34n^3+51n^2+59n+21\right) \quad (35.12)$$

最后，二级近似下的能量表示式是

$$E_n=\hbar\omega\left\{\left(n+\frac{1}{2}\right)-\left(\frac{\varepsilon_1}{\hbar\omega}\right)^2A_n^{(2)}+\frac{\varepsilon_2}{\hbar\omega}B_n^{(1)}\right.$$
$$\left.-\left(\frac{\varepsilon_2}{\hbar\omega}\right)^2B_n^{(2)}\right\} \quad (35.13)$$

其中

$$\left.\begin{aligned}A_n^{(2)}&=\frac{15}{4}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right);\\B_n^{(1)}&=\frac{3}{4}(2n^2+2n+1);\\B_n^{(2)}&=\frac{1}{8}(34n^3+51n^2+59n+21)\end{aligned}\right\} \quad (35.14)$$

我们将这些系数列成下表，由此不难计算能级．在图 20 中对微扰 $\varepsilon_1\xi^3$ 画出能级与无量纲参数 $\frac{\varepsilon_1}{\hbar\omega}$ 的函数关系．由于不存在一级效应，因此曲线是以 $\varepsilon_1=0$ 为顶点的抛物线．微扰能量为负是由于对较大的 ε_1 值(这时不再能忽略它的影响)，$\varepsilon_1\xi^3$ 使势的抛物线变

n	$A_n^{(2)}$	$B_n^{(1)}$	$B_n^{(2)}$
0	$\frac{11}{8}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{21}{8}$
1	$\frac{71}{8}$	$\frac{15}{4}$	$\frac{165}{8}$
2	$\frac{191}{8}$	$\frac{39}{4}$	$\frac{615}{8}$
3	$\frac{371}{8}$	$\frac{75}{4}$	$\frac{1575}{8}$

宽．在较高的能量下，这种变宽愈来愈厉害，这时即使是二级微扰理论也愈来愈不可靠．在 $\xi=\frac{-\hbar\omega}{3\varepsilon_1}$ 处，势曲线出现一个高度为

$V_{极大}=(\hbar\omega)^3/(54\varepsilon_1^2)$ 的极大值，当能量超过 $V_{极大}$ 时，能级将消逝，这样一种效应是不能从我们的近似中得到的.

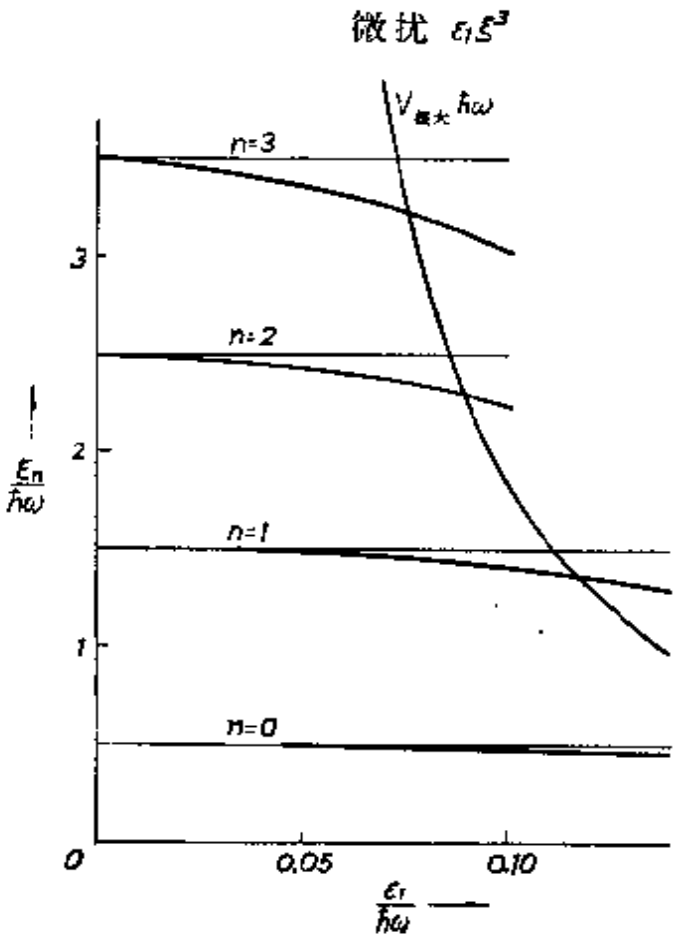


图 20　不对称的非谐振子能级，只包含二级微扰贡献，$V_{极大}/\hbar\omega$ 粗略地表示出这种近似的适用范围的极限

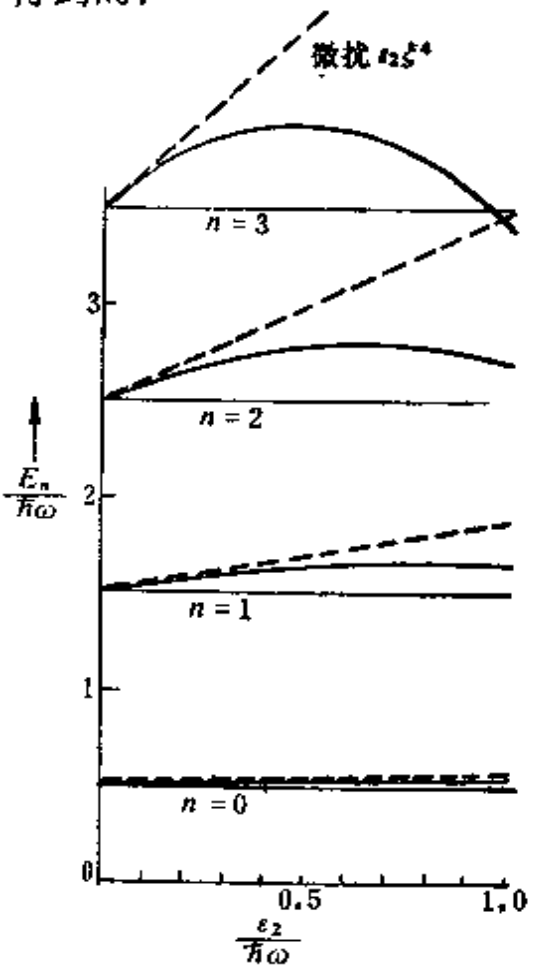


图 21　对称的非谐振子能级，虚线只计算到一级近似，实线还包括二级近似在内

一般说来，图 20 的曲线表明，能级的能量愈高，近似计算能够给出可靠结果的微扰参数 $\frac{\varepsilon_1}{\hbar\omega}$ 就愈小. 这在图 21 中已完全确证，其中虚线表示一级效应，实线还包括二级修正. 当 $\frac{E_n}{\hbar\omega}$ 的值增大到超过曲线的能量极大值后开始下降时实线肯定是不可靠的.

问题 36　近似波函数

设 $x=\pm a$ 处有二刚性墙壁. 一粒子在二壁之间沿 x 方向运

动，除粒子到达壁时受到壁的作用力外，不再有其它的作用力．试用具有正确零点的简单的归一化多项式，近似表达基态和第一激发态的波函数，并比较能量的近似值和精确值．

解 设 u_0 和 u_1 是精确波函数，E_0 和 E_1 是这两个态的精确能级．从问题 18 知

$$u_0=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi x}{2a};\qquad E_0=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\cdot\frac{\pi^2}{4} \tag{36.1}$$

和

$$u_1=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a};\qquad E_1=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\cdot\pi^2 \tag{36.2}$$

它们可用下列最简单的具有相同零点的多项式近似表达：

$$\tilde{u}_0=\sqrt{\frac{15}{16a}}\left[1-\left(\frac{x}{a}\right)^2\right] \tag{36.3}$$

和

$$\tilde{u}_1=\sqrt{\frac{15}{16a}}\left[\frac{x}{a}-\left(\frac{x}{a}\right)^3\right] \tag{36.4}$$

所有四个波函数(36.1)—(36.4)都已按下式归一化

$$\int_{-a}^{+a}dx\,u^2=1.$$

在 $x=0$ 处 u_0 的极大值等于 1(以 $a^{-\frac{1}{2}}$ 为单位)，而在同一点处 $\tilde{u}_0$ 的极大值等于 $\left(\frac{15}{16}\right)^{\frac{1}{2}}=0.970$，只小了 3%．$u_1$ 的两个极大值，在 $x=\pm\frac{a}{2}$ 处，并等于 ±1，而 $\tilde{u}_1$ 的极大值，在 $x=\frac{1}{\sqrt{3}}\,a=0.577a$ 处，并等于 $\pm\left(\frac{35}{36}\right)^{\frac{1}{2}}=\pm0.986$，高度更近于 1，但位置却移动了．

对所有的情况，能量都可由下式算出

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{+a}dx\left(\frac{du}{dx}\right)^2.$$

将(36.3)和(36.4)代入上式，不难算出能量的近似值

$$\tilde{E}_0=\frac{\hbar^2}{2ma}\cdot\frac{5}{2}\quad 和\quad \tilde{E}_1=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\cdot\frac{21}{2}. \tag{36.5}$$

比较(36.1)、(36.2)和(36.5)的数值$\left[以\ \frac{\hbar^2}{2ma^2}\ 为单位\right]$则有

$$E_0=2.4674 \qquad \tilde{E}_0=2.5000$$
$$E_1=9.8696 \qquad \tilde{E}_1=10.5000.$$

能量的近似值总是高于精确值；$\tilde{E}_0$ 非常接近于 E_0，而 $\tilde{E}_1$ 与 E_1 相比似乎稍差一些. 然而，即使在这种情况下，误差也不大于 6%.

问题 37 势　　阶

试确定波垂直入射到下列势阶上的反射系数

$$V(x)=\frac{1}{2}V_0\left(1+\tanh\frac{x}{2a}\right) \tag{37.1}$$

解　势 $V(x)$ 从 $x=-\infty$ 时的 $V=0$ 连续上升到 $x=+\infty$ 时的 $V=V_0$，上升主要出现在间隔 $-2a<x<+2a$ 中：

$$V(-2a)=0.119V_0;\quad V(+2a)=0.881V_0$$

描述来自左面的入射波的波函数，必须有如下的渐近行为：

$$\left.\begin{aligned} u&=e^{ikx}+Re^{-ikx} && 当x\to-\infty;\\ u&=\begin{cases} Ce^{-Kx} & 如果\ E<V_0 \quad 当\ x\to+\infty,\\ Ce^{ik'x} & 如果\ E>V_0 \quad 当\ x\to+\infty \end{cases} \end{aligned}\right\} \tag{37.2}$$

量 $|R|^2$ 就是反射系数.

为了求解具有势(37.1)的薛定谔方程

$$\frac{d^2u}{dx^2}+\left[k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(x)\right]u=0, \tag{37.3}$$

用变量

$$y=(1+e^{x/a})^{-1} \tag{37.4}$$

代替 x，引用缩写

$$\varkappa^2=k^2a^2=\frac{2ma^2}{\hbar^2}E;\quad \lambda^2=\frac{2ma^2}{\hbar^2}V_0. \tag{37.5}$$

考虑到

$$\frac{d}{dx}=-\frac{1}{a}y(1-y)\frac{d}{dy};\quad 1+\tanh\frac{x}{2a}=2(1-y),$$

(37.3)式可化为如下的微分方程

$$y(1-y)\frac{d^2u}{dy^2}+(1-2y)\frac{du}{dy}+\left[\frac{\varkappa^2}{y(1-y)}-\frac{\lambda^2}{y}\right]u=0 \quad (37.6)$$

这个方程的极点在 $y=0,\ 1,\ \infty$ 处，因此解是超几何函数. 令

$$u(y)=y^{\nu}(1-y)^{\mu}f(y) \quad (37.7)$$

其中

$$\nu^2=\lambda^2-\varkappa^2;\qquad \mu^2=-\varkappa^2 \quad (37.8)$$

通过简单的计算可将(37.6)化为高斯方程的标准形式

$$y(1-y)f''+[(2\nu+1)-(2\mu+2\nu+2)y]f'-(\mu+\nu)(\mu+\nu+1)f=0 \quad (37.9)$$

它的特解是

$$f(y)=C\,{}_2F_1(\mu+\nu,\ \mu+\nu+1,\ 2\nu+1;\ y) \quad (37.10)$$

其中常数 C 是待定的，现在我们要求它满足边界条件(37.2).

如果从极限 $x\to+\infty$ 或 $y\simeq e^{-x/a}\to 0$ 出发，则解(37.10)变成 $f(0)=C$ 或

$$u(y)\to Cy^{\nu}\simeq Ce^{-\nu x/a}. \quad (37.11)$$

现在需要区分两种情况.

a) $\lambda>\varkappa$，$\nu>0$ 是实数，当 $x\to+\infty$ 时，表示式(37.11)指数地趋于零，这正是在 $E<V_0$ 时预期出现的情况，因此我们得到

$$u\to Ce^{-Kx}\quad 其中\ K^2=\frac{\nu^2}{a^2}=\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E) \quad (37.12a)$$

b) $\lambda<\varkappa$，$\nu=-ik'a$ 是虚数. 这时

$$u\to Ce^{ik'x}\quad 其中\ k'=\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0) \quad (37.12b)$$

另一方面，对 $x\to-\infty$ 或 $y\to 1$，$1-y\simeq e^{+x/a}\to 0$，应用自变量为 y 和 $1-y$ 的超几何函数之间熟知的变换关系，

$$
{}_2F_1(\mu+\nu,\ \mu+\nu+1,\ 2\nu+1;y)
$$

$$
=\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu)\Gamma(\nu-\mu+1)}\ {}_2F_1(\mu+\nu,\ \mu+\nu+1,\ 2\mu+1;1-y)
$$

$$
+(1-y)^{-2\mu}\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu+\nu)\Gamma(\mu+\nu+1)}\ {}_2F_1(\nu-\mu,\ \nu-\mu+1,
$$

$$
-2\mu+1;1-y)
$$

以及 $1-y=e^{x/a}$, 则得

$$
u\to C\left\{\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu)\Gamma(\nu-\mu+1)}\ e^{\mu x/a}\right.
$$

$$
\left.+\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu+\nu)\Gamma(\mu+\nu+1)}\ e^{-\mu x/a}\right\}
$$

或者考虑到

$$
\mu=+i\kappa;\qquad \mu/a=ik \tag{37.13}
$$

就得到形如(37.2)的解, 其中

$$
C=\frac{\Gamma(\nu-\mu)\Gamma(\nu-\mu+1)}{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(-2\mu)} \tag{37.14}
$$

$$
R=\frac{\Gamma(+2\mu)\Gamma(\nu-\mu)\Gamma(\nu-\mu+1)}{\Gamma(-2\mu)\Gamma(\nu+\mu)\Gamma(\nu+\mu+1)} \tag{37.15}
$$

同样, 我们要区分两种情况, $E\gtrless V_0$

a) $E<V_0$; $\mu=i\kappa$ 是虚数; $\nu>0$ 是实数. (37.15)的分子和分母互为复共轭, 因此

$$
|R|^2=1.
$$

这就是全反射.

b) $E>V_0$; $\mu=i\kappa$ 和 $\nu=-i\sigma$ 都是虚数. 这时只有因子 $\Gamma(\pm 2\mu)$ 是复共轭的, 并对 $|R|^2$ 没有贡献. 由于

$$
\Gamma(z)=\frac{1}{z}\Gamma(z+1),
$$

我们得到

$$
|R|^2=\left|\frac{(\nu+\mu)\Gamma(\nu-\mu+1)^2}{(\nu-\mu)\Gamma(\nu+\mu+1)^2}\right|^2
$$

$$
=\left(\frac{\kappa-\sigma}{\kappa+\sigma}\right)^2\left\{\left|\frac{\Gamma(1-i(\kappa+\sigma))}{\Gamma(1+i(\kappa-\sigma))}\right|^2\right\}^2
$$

利用基本公式

$$|\Gamma(1+i\eta)|^2=\frac{\pi\eta}{\sinh\pi\eta},$$

最后得到反射系数的公式

$$|R|^2=\left\{\frac{\sinh\pi(\varkappa-\sigma)}{\sinh\pi(\varkappa+\sigma)}\right\}^2, \tag{37.16}$$

或者用势阶左边和右边的波数 k 和 k'，则得

$$|R|^2=\left\{\frac{\sinh\pi(k-k')a}{\sinh\pi(k+k')a}\right\}^2 \tag{37.17}$$

注 1 如果 a 很小，这相当于在 $x=0$ 处势有一个不连续跃变的极限情形，(37.17)式简单地变成

$$|R|^2=\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2. \tag{37.18}$$

当然，在这种情况下没有必要利用超几何函数，而(37.2)式的两个渐近条件对于各自的整个半空间都是严格成立的. 即

$$\begin{aligned} &u=e^{ikx}+Re^{-ikx} && \text{对 } x<0\\ &u=Ce^{ik'x} && \text{对 } x>0 \end{aligned} \tag{37.19}$$

(这里只讨论我们感兴趣的情况 b). u 和 u' 在 $x=0$ 处的连续性给出

$$1+R=C; \qquad ik(1-R)=ik'C,$$

它们的解是

$$C=\frac{2k}{k+k'}; \qquad R=\frac{k-k'}{k+k'}. \tag{37.20}$$

通量在跃变点的连续性要求

$$k(1-R^2)=k'C^2; \tag{37.21}$$

不难看出，(37.20)的 C 和 R 满足上述要求.

注 2 用(37.4)式引入新变量 y 的目的，在于使微分方程的系数函数有理化，因而使它成为我们所熟知的一类微分方程. 利用另外的变换，例如

$$y=(1+e^{-x/a})^{-1}, \tag{37.4'}$$

也可以达到这个目的. 选择(37.4)式是为了使特解(37.10)能够满足我们的特殊问题的边界条件，而选择(37.4')则不可能. 虽然如此，利用(37.4')进行计算还是有益的.

问题 38　普薛耳-特勒 (Pöschl-Teller) 势阱

设势为

$$V(x)=\frac{1}{2}V_0\left\{\frac{\varkappa(\varkappa-1)}{\sin^2\alpha x}+\frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2\alpha x}\right\};\quad V_0=\frac{\hbar^2\alpha^2}{m}\qquad(38.1)$$

其中 $\varkappa>1$, $\lambda>1$, $V(x)$ 在 $x=0$ 和 $x=\frac{\pi}{2\alpha}$ 处趋于 ∞, 试在 $x=0$ 到 $x=\frac{\pi}{2\alpha}$ 的区域中求解薛定谔方程.

解　图 22 中画出了 $\lambda=2$ 和 $\varkappa>1$ 取三个不同值时势(38.1)的曲线. 当 $\varkappa=\lambda$ 时, 势阱对于 $\alpha x=\frac{\pi}{4}$ 对称; 如果 $\varkappa>\lambda$, 势阱变斜, 其最小值移向较大的 x 值. 如果 $1<\varkappa<\lambda$, 则最小值移向相反方向, 因而在 $x=0$ 处的奇异性愈来愈不显著, 直到 $\varkappa\to 1$, 奇异性完全消失, 这时在 $\alpha x=-\frac{\pi}{2}$ 到 0 之间的势阱和 0 到 $+\frac{\pi}{2}$ 之间的势阱连成一个大的势阱. 但是, 利用恒等式

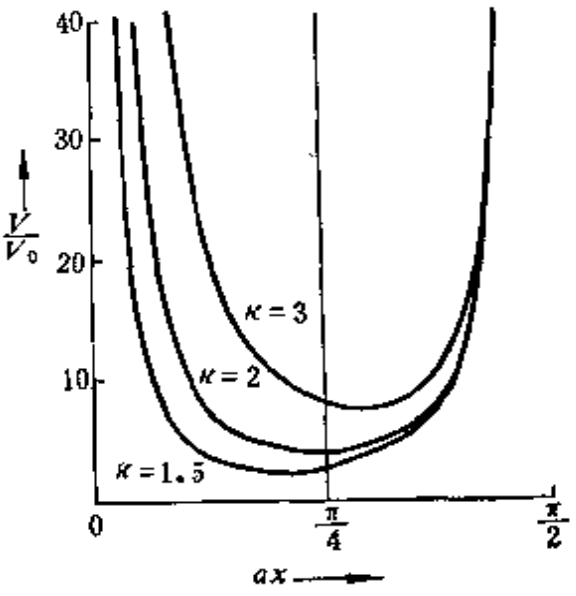


图 22　当 $\lambda=2$ 和 $\varkappa\neq\lambda$ 时的三个不同的普薛耳-特勒势. 只有 $\varkappa=\lambda$ 的势阱是对称的

$$\frac{1}{\cos^2\alpha x}=\frac{1}{4}\left[\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\alpha x}{2}-\frac{\pi}{4}\right)}+\frac{1}{\cos^2\left(\frac{\alpha x}{2}-\frac{\pi}{4}\right)}\right]$$

可以将这个大的势阱化为 $\varkappa=\lambda$ 的情况$\left(\text{将 }\alpha\text{ 换成 }\frac{\alpha}{2},\ V_0\text{ 换成 }\frac{V_0}{4}\right)$.

自然, 势(38.1)是周期性的, 然而这对于求解薛定谔方程实际

上无关紧要，因为由两个阱之间的奇异性所构成的势垒是不可穿透的．因此我们只讨论其中的一个阱，譬如间隔 $0\leqslant x\leqslant \pi/2\alpha$，并且对于这个间隔利用边界条件

$$u=0 \qquad \text{当 } x=0 \quad \text{和} \quad x=\frac{\pi}{2\alpha} \tag{38.2}$$

求解薛定谔方程．

引入新变量

$$y=\sin^2\alpha x \tag{38.3}$$

可将薛定谔方程变换为

$$y(1-y)u''+\left(\frac{1}{2}-y\right)u'+\frac{1}{4}\left(\frac{k^2}{\alpha^2}-\frac{\varkappa(\varkappa-1)}{y}-\frac{\lambda(\lambda-1)}{1-y}\right)u=0 \tag{38.4}$$

其中

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

微分方程(38.4)有三个正则奇点；(在 $y=0,\ 1,\ \infty$)，因此可将它约化为超几何方程，只要令

$$u=y^{\mu}(1-y)^{\nu}f(y) \tag{38.5}$$

并取合适的 μ, ν 值．选择

$$\mu=\frac{\varkappa}{2}, \quad \nu=\frac{\lambda}{2}, \tag{38.6}$$

的确可以将(38.4)化为

$$y(1-y)f''+\left[\left(\varkappa+\frac{1}{2}\right)-y(\varkappa+\lambda+1)\right]f'+\frac{1}{4}\left[\frac{k^2}{\alpha^2}-(\varkappa+\lambda)^2\right]f=0 \tag{38.7}$$

这个方程的一般解是

$$f=C_1\,{}_2F_1(a,\ b,\ c;\ y)+C_2y^{1-c}\,{}_2F_1(a+1-c,\ b+1-c,\ 2-c;\ y) \tag{38.8}$$

其中参数

$$a=\frac{1}{2}\left(\varkappa+\lambda+\frac{k}{\alpha}\right),\quad b=\frac{1}{2}\left(\varkappa+\lambda-\frac{k}{\alpha}\right),\quad c=\varkappa+\frac{1}{2}\qquad(38.9)$$

为了确定(38.8)式的积分常数 C_1 和 C_2，我们利用边界条件(38.2)；用 y 作变量时，(38.2)式可表示为

$$u(0)=0;\qquad u(1)=0.\qquad(38.2')$$

在 $y=0$ 处，两个超几何级数都等于1，因此

$$u\simeq y^{\mu}(C_1+C_2y^{\frac{1}{2}-\varkappa})=C_1y^{\frac{\varkappa}{2}}+C_2y^{\frac{1-\varkappa}{2}}$$

由于 $\varkappa>1$，第二项在 $y\to0$ 时是奇异的，所以 $C_2=0$。在 $y=1$ 处，利用变换

$$\begin{aligned}&{}_2F_1(a,\ b,\ c;\ y)\\&=\frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}\,{}_2F_1(a,\ b,\ a+b-c+1;\ 1-y)\\&\quad+\frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\\&\quad\times(1-y)^{c-a-b}\,{}_2F_1(c-a,\ c-b,\ c-a-b+1;\ 1-y)\end{aligned}$$

由于 $c-a-b=\dfrac{1}{2}-\lambda$，第二项在 $y=1$ 附近对于 u 的贡献是

$$u=\cdots+C_1(1-y)^{\nu+c-a-b}\frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}$$

其中指数

$$\nu+c-a-b=\frac{1}{2}(1-\lambda)<0$$

导致 u 的奇性，从而使 u 不满足边界条件。然而，如果 $a\neq-n$ 或者 $b\neq-n(n=0,\ 1,\ 2,\cdots)$，则第二项分母中的 Γ 函数 $\to\infty$，因而使 u 在 $y\to1$ 时不再具有奇性。如果

$$a=-n\qquad(38.10)$$

由(38.9)式，给出正的

$$b=\varkappa+\lambda+n$$

反过来，如果 $b=-n$，我们得到 $a=\varkappa+\lambda+n$，由于波函数对于交换参数 a 和 b 是不变的，因此这两个条件给出相同的解．将(38.9)式中的 a 代入(38.10)式就得到本征值

$$k^2=\alpha^2(\varkappa+\lambda+2n)^2 \quad \text{或} \quad E_n=\frac{1}{2}V_0(\varkappa+\lambda+2n)^2 \tag{38.11}$$

和波函数

$$u_n(x)=C_1\sin^{\varkappa}\alpha x\cos^{\lambda}\alpha x \times {}_2F_1\left(-n,\ \varkappa+\lambda+n,\ \varkappa+\frac{1}{2};\ \sin^2\alpha x\right) \tag{38.12}$$

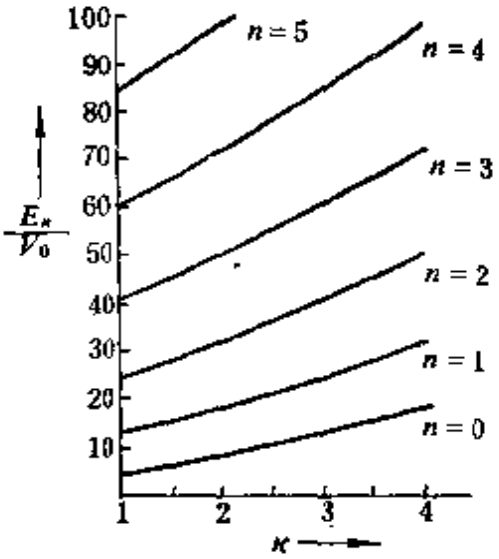


图 23　$\lambda=2$时的普谢耳-特勒势的能级与不对称参数 $\varkappa$ 的关系

其中常数 C_1 仍然要由归一化条件来确定．在图 23 中，对于 $\lambda=2$，画出了最低几个本征值与 $\varkappa$ 的函数关系．与图 22 中的势曲线对照，可以看出，正如所期，势阱愈窄，能级的位置愈高．如果 $2n\gg\varkappa+\lambda$，(38.11) 式趋向于势阱的本征值公式 $k^2=4\alpha^2n^2$ $(n=1,\ 2,\cdots)$．这也是合理的，因为在能级的高度增加时势底部的连续弯曲对能级的影响愈来愈小．

注　在势的底部最小值附近，势曲线可以近似用抛物线来代替，即相当于一个谐振子势．我们限于讨论 $\varkappa=\lambda$ 而最小值在 $\alpha x=\frac{\pi}{4}$ 的情形，利用变量

$$z=x-\frac{\pi}{4\alpha}$$

则得

$$V=4V_0\lambda(\lambda-1)\left[\frac{1}{2}+\alpha^2z^2+O(z^4)\right]$$

令 z^2 项的系数因子等于 $\frac{1}{2}m\omega^2$，则有

$$\omega=2\sqrt{2\lambda(\lambda-1)}\ \frac{\hbar}{m}\alpha^2$$

如果略去这势和抛物型势的差别，则

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+2V_0\lambda(\lambda-1)$$

或

$$E_n/V_0=2\sqrt{2\lambda(\lambda-1)}\left(n+\frac{1}{2}\right)+2\lambda(\lambda-1).$$

当然，这一近似只有在经典转折点(x_t)处的$|x|$远小于$\frac{1}{\alpha}$或

$$\alpha^2x_t^2=\frac{n+\frac{1}{2}}{\sqrt{2\lambda(\lambda-1)}}\ll 1$$

时才能成立。这一结果在$\alpha\to 0$, $\lambda\to\infty$而$\lambda\alpha^2$保持有限的极限情况下将是严格成立的.

文献: Pöschl, G., Teller, E.: Z. Physik **83**, 143(1933). Rosen, N., Morse, P. M.: Phys. Rev. **42**, 210(1932). Lotmar, W.: Z. Physik **93**, 528 (1935).

问题 39　修正普薛耳-特勒势阱

试对势(图 24)

$$V(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\frac{\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2\alpha x}\quad(\text{其中 }\lambda>1)\qquad(39.1)$$

求解一维薛定谔方程，对正能量试求反射系数和透射系数. 对负能量，试求能量的本征值.

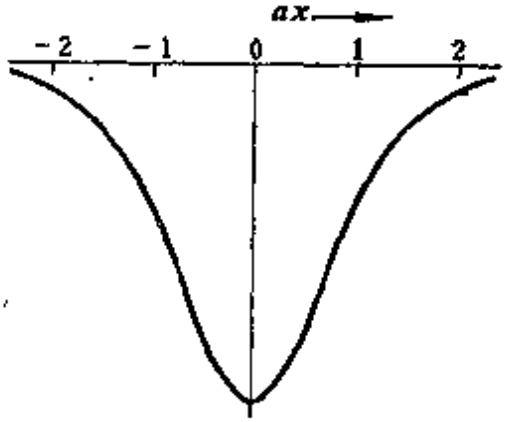


图 24　修正普薛耳-特勒势阱

解　薛定谔方程可写为

$$u''+\left\{k^2+\frac{\alpha^2\lambda(\lambda-1)}{\cosh^2\alpha x}\right\}u=0\qquad(39.2)$$

其中$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$，引入新变量

$$y=\cosh^2\alpha x,\qquad(39.3)$$

则得

$$y(1-y)u''+\left(\frac{1}{2}-y\right)u'-\left\{\frac{k^2}{4\alpha^2}+\frac{\lambda(\lambda-1)}{4y}\right\}u=0.$$

令

$$u=y^{\frac{\lambda}{2}}v(y), \tag{39.4}$$

以之代入上式,则得超几何微分方程

$$y(1-y)v''+\left\{\left(\lambda+\frac{1}{2}\right)-(\lambda+1)y\right\}v'-\frac{1}{4}\left(\lambda^2+\frac{k^2}{\alpha^2}\right)v=0 \tag{39.5}$$

引入缩写

$$a=\frac{1}{2}\left(\lambda+i\frac{k}{\alpha}\right);\quad b=\frac{1}{2}\left(\lambda-i\frac{k}{\alpha}\right), \tag{39.6}$$

则方程(39.5)的完全解可写为③

$$v(x)=A\,{}_2F_1\left(a,\ b,\ \frac{1}{2};1-y\right)$$
$$+B(1-y)^{\frac{1}{2}}\,{}_2F_1\left(a+\frac{1}{2},b+\frac{1}{2},\frac{3}{2};1-y\right) \tag{39.7}$$

因此在 $x=0$ 或 $y=1$ 处,波函数趋于

$$u(0)\sim A+B(1-y)^{\frac{1}{2}}. \tag{39.8}$$

我们将选出二个实的标准解 u_e 和 u_o (x的偶函数和奇函数)

$$u_e(-x)=u_e(x);\quad u_o(-x)=-u_o(x) \tag{39.9}$$

作为一个基本组. 对于 $B=0$, $A=1$,我们得到偶的标准解

$$u_e(x)=\cosh^{\lambda}\alpha x\ {}_2F_1\left(a,b,\frac{1}{2};\ -\sinh^2\alpha x\right) \tag{39.10a}$$

---

③ 这解适用于区域 $0\leqslant|x|<\infty$ 或 $1\leqslant y<\infty$. 超几何方程

$$y(1-y)v''+[c-(a+b+1)y]v'-abv=0$$

在转到变数 $z=1-y$ 时化为

$$z(1-z)v''+[c'-(a+b+1)z]v'-abv=0$$

其中 $c'=a+b+1-c$. 这样,(39.7)式就约化为常见的以 z 为变量的形式. z 的变化区间是 $-\infty<z\leqslant 0$.

而对于 $A=0$, $B=i$, 则得到奇的标准解

$$u_o(x)=\cosh^{\lambda}\alpha x\sinh\alpha x\,{}_2F_1\left(a+\frac{1}{2},b+\frac{1}{2},\frac{3}{2};\ -\sinh^2\alpha x\right) \tag{39.10b}$$

下面我们详细讨论这些解.

为此首先需要知道在自变量

$$-\sin h^2\alpha x\to -2^{-2}e^{2\alpha|x|}$$

趋向负无穷大时, (39.10a)和(39.10b)的渐近行为, 由熟知的公式得到

$$u_e(x)\to 2^{-\lambda}e^{\lambda\alpha|x|}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\left\{\frac{\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma\left(\frac{1}{2}-a\right)}2^{2a}e^{-2a\alpha|x|}\right.$$

$$\left.+\frac{\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma\left(\frac{1}{2}-b\right)}2^{2b}e^{-2b\alpha|x|}\right\} \tag{39.11a}$$

和

$$u_o(x)\to\pm 2^{-(\lambda+1)}e^{(\lambda+1)\alpha|x|}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\left\{\frac{\Gamma(b-a)}{\Gamma\left(b+\frac{1}{2}\right)\Gamma(1-a)}\right.$$

$$\left.\times 2^{2a+1}e^{-(2a+1)\alpha|x|}+\frac{\Gamma(a-b)}{\Gamma\left(a+\frac{1}{2}\right)\Gamma(1-b)}2^{2b+1}e^{-(2b+1)\alpha|x|}\right\} \tag{39.11b}$$

其中±号相应于 $x\gtrless 1$. 如果能量是正的, 按照(39.6)式, a 和 b 是复共轭的, 于是(39.11a, b)化为

$$u_e(x)\to\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\left\{\frac{\Gamma(1-ik/\alpha)e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda}{2}-i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}-i\frac{k}{2\alpha}\right)}e^{-ik|x|}\right.$$

$$\left.+\frac{\Gamma(ik/\alpha)\,e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)}e^{ikx}\right\} \tag{39.12a}$$

和

$$u_0(x)\to\pm\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\left\{\frac{\Gamma(-ik/\alpha)e^{i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}-i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(1-\frac{\lambda}{2}-i\frac{k}{2\alpha}\right)}e^{-ik|x|}\right.$$

$$\left.+\frac{\Gamma(ik/\alpha)e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(1-\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)}e^{ik|x|}\right\}\qquad(39.12b)$$

利用缩写

$$\varphi_e=\arg\frac{\Gamma(ik/\alpha)e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)}\qquad(39.13a)$$

和

$$\varphi_0=\arg\frac{\Gamma(ik/\alpha)e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(1-\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)}\qquad(39\ 13b)$$

则上面二个函数化为

$$u_e\to C_e\cos(k|x|+\varphi_e);\quad u_o\to\pm C_o\cos(k|x|+\varphi_o)\quad(\text{在}x\gtrless 0\text{处})$$

(39.14)

其中振幅因子可从(39.12a, b)算出，但是在下面的讨论中并不需要知道它.

现在将两个基本解线性组合起来，记作

$$u=Au_e+Bu_o.$$

对于 $x>0$, 它是

$$u=\frac{A}{2}C_e(e^{i\varphi_e}e^{ikx}+e^{-i\varphi_e}e^{-ikx})+\frac{B}{2}C_o(e^{i\varphi_o}e^{ikx}+e^{-i\varphi_o}e^{-ikx})$$

对于 $x<0$, 它是

$$u=\frac{A}{2}C_e(e^{i\varphi_e}e^{-ikx}+e^{-i\varphi_e}e^{ikx})-\frac{B}{2}C_o(e^{i\varphi_o}e^{-ikx}+e^{-i\varphi_o}e^{ikx})$$

我们需要一个具有如下渐近形式的解

$$u=\begin{cases} e^{ikx}+Re^{-ikx} & \text{对 } x<0 \\ Te^{ikx} & \text{对 } x>0 \end{cases} \tag{39.15}$$

即

$$\frac{A}{2}C_e e^{i\varphi_e}+\frac{B}{2}C_o e^{i\varphi_o}=T,$$

$$\frac{A}{2}C_e e^{-i\varphi_e}+\frac{B}{2}C_o e^{-i\varphi_o}=0,$$

$$\frac{A}{2}C_e e^{i\varphi_e}-\frac{B}{2}C_o e^{i\varphi_o}=R,$$

$$\frac{A}{2}C_e e^{-i\varphi_e}-\frac{B}{2}C_o e^{-i\varphi_o}=1$$

从第二和第四个方程，可以求出 AC_e 和 BC_o，以之代入第一和第三个方程，就得到 T 和 R

$$T=\frac{1}{2}\left(e^{2i\varphi_e}-e^{2i\varphi_o}\right);\quad R=\frac{1}{2}\left(e^{2i\varphi_e}+e^{2i\varphi_o}\right) \tag{39.16}$$

由此可得透射强度系数

$$|T|^2=\sin^2(\varphi_e-\varphi_o) \tag{39.17}$$

和反射强度系数

$$|R|^2=\cos^2(\varphi_e-\varphi_o) \tag{39.18}$$

它们只与相角有关而与本征函数中的任何归一化因子无关，并且满足守恒定律

$$|T|^2+|R|^2=1.$$

为了计算系数 (39.17) 和 (39.18)，我们回过来讨论 (39.13) 式，利用缩写

$$k/2\alpha=q$$

则有

$$\varphi_e-\varphi_o=\arg\Gamma\left(iq+\frac{\lambda}{2}+\frac{1}{2}\right)+\arg\Gamma\left(iq+1-\frac{\lambda}{2}\right)$$

$$-\arg\Gamma\left(iq+\frac{\lambda}{2}\right)-\arg\Gamma\left(iq+\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{2}\right) \tag{39.19}$$

从一般公式

$$\Gamma(z)\,\Gamma(1-z)=\frac{\pi}{\sin\pi z}$$

得到

$$\arg\Gamma(z)-\arg\Gamma(1-z^*)=-\arg\sin\pi z \qquad (39.20)$$

令

$$iq+\frac{\lambda}{2}+\frac{1}{2}=z_1;\qquad iq+\frac{\lambda}{2}=z_2$$

则有

$$iq+\frac{1}{2}-\frac{\lambda}{2}=1-z_1^*;\qquad iq+1-\frac{\lambda}{2}=1-z_2^*$$

因此将(39.19)式中第一第四项组合在一起，第二第三项组合在一起，然后利用(39.20)则得

$$\varphi_e-\varphi_o=-\arg\sin\pi\left(\frac{\lambda+1}{2}+iq\right)+\arg\sin\pi\left(\frac{\lambda}{2}+iq\right)$$

$$=\tan^{-1}\left(\tan\frac{\pi\lambda}{2}\tanh\pi q\right)+\tan^{-1}\left(\cot\frac{\pi\lambda}{2}\tanh\pi q\right)$$

整理后得到

$$\varphi_e-\varphi_o=\tan^{-1}\left\{\frac{\sinh\pi k/\alpha}{\sin\pi\lambda}\right\}. \qquad (39.21)$$

如果深度参数 λ 是整数，则上式分母中的 $\sin\pi\lambda=0$，因此 $\varphi_e-\varphi_o=\frac{\pi}{2}$，按照(39.17)式和(39.18)式，$|T|^2=1$，$|R|^2=0$，在这种情况下，对各种能量的粒子，入射能量将全部透射过去而没有任何反射（这对于 $\lambda=1$ 是显然的）。另一方面，在 $E=0$ 的极限下（即 $\pi k/\alpha=0$），(39.21)式中的分子等于零，因此对于非整数的 λ 值我们得到 $\varphi_e-\varphi_o=0$ 和全反射：$|T|^2=0$，$|R|^2=1$。从(39.17)、(39.18)和(39.21)式，对所有的 λ 值，$|R|^2$ 和 $|T|^2$ 可写为

$$|R|^2=\frac{1}{1+p^2};\qquad |T|^2=\frac{p^2}{1+p^2} \qquad (39.22)$$

其中

$$p=\frac{\sinh\pi k/\alpha}{\sin\pi\lambda}.$$

在图 25 中,相应于 $k/2\alpha=0.1$ 和 0.2 两种能量,画出了反射系数与 $\lambda(1<\lambda<2)$ 的关系曲线,在任意间隔 $n<\lambda<n+1$(n 是整数)中的曲线只不过是同样图形的重复.

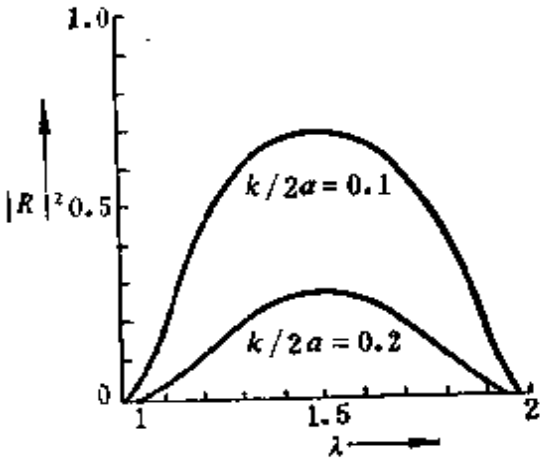


图 25 在两种不同能量下,反射系数与势阱大小的函数关系

束缚态 对于负能量存在着本征值,设 $k=i\varkappa$, 于是

$$E=-\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m} \qquad (39.23)$$

并且参数(39.6)变成实的,即

$$a=\frac{1}{2}\left(\lambda-\frac{\varkappa}{\alpha}\right);\quad b=\frac{1}{2}\left(\lambda+\frac{\varkappa}{\alpha}\right) \qquad (39.24)$$

这样我们仍然可以用渐近公式(39.11a, b), 但是现在这些表示式中的第一项 $\sim e^{\varkappa|x|}$, 第二项 $\sim e^{-\varkappa|x|}$. 因此,对于 $\varkappa>0$, 存在一个可归一化解的充要条件是第一项的系数等于零. 由于 Γ 函数现在全部取实自变量,它的极点在自变量等于负整数 $-n$ 处($n=0, 1, 2, \cdots$), 因此本征值由下式给出

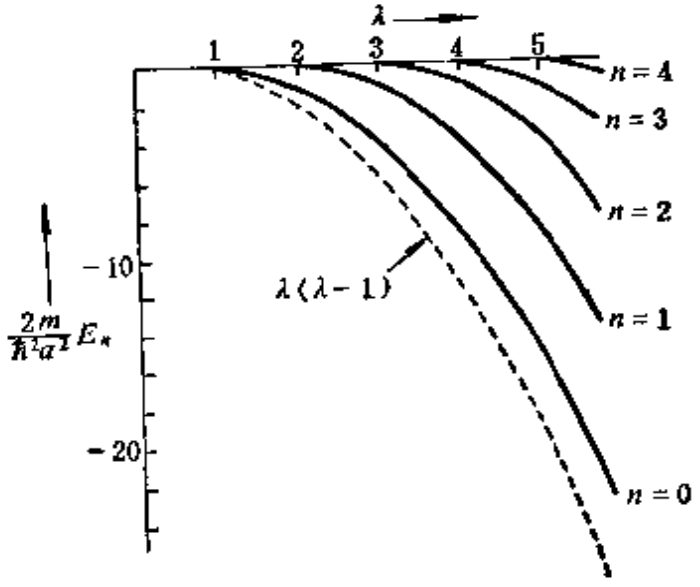


图 26 在不同大小的修正普舒耳-特勒势阱中的能级,虚线表示势阱的深度

$$\frac{1-\lambda}{2}+\frac{\varkappa}{2\alpha}=-n \quad 或 \quad \frac{\varkappa}{\alpha}=\lambda-1-2n \quad (对于偶本征态)$$

和

$$1-\frac{\lambda}{2}+\frac{\varkappa}{2\alpha}=-n \quad 或 \quad \frac{\varkappa}{\alpha}=\lambda-2-2n \quad (对于奇本征态)$$

稍许改变记号就得到能量表示式

$$E_n=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}(\lambda-1-n)^2;\ n\leqslant\lambda-1 \quad (n=0,\ 1,\ 2,\cdots) \quad (39.25)$$

其中对偶(奇)本征态，n 取偶(奇)数. 这些本征值已画在图 26 中；必须指出，对于整数的 λ，总存在一个零能量的本征值($n=\lambda-1$).

问题 40　地球表面上空的自由落体

一个粒子在地球表面上空的均匀引力场中运动，假设粒子在地面上的反射是弹性的(例如一个钢球在一块水平玻璃板上跳动)，试用量子理论讨论这个经典力学的基本问题.

解　球的跳动对应于一个定态. 用 x 表示粒子在地面上的高度，并且引力势的标准形式是 $V(x)=mgx$，对 $x>0$，求解下面的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}+(mgx-E)u=0 \quad (40.1)$$

在 $x=0$ 处，弹性反射的假设给出边界条件

$$u(0)=0 \quad (40.2a)$$

补充的边界条件是

$$u(\infty)\to 0 \quad (40.2b)$$

利用缩写

$$\frac{2m^2g}{\hbar^2}=\frac{1}{l^3};\qquad \frac{2mE}{\hbar^2}=\frac{\lambda}{l^2} \quad (40.3)$$

和变量

$$\xi=\frac{x}{l}-\lambda \quad (40.4)$$

这里 l 是特征长度，并且 ξ 没有量纲，这样，(40.1)式变成

$$\frac{d^2u}{d\xi^2}-\xi u=0 \quad (40.5)$$

边界条件(40.2a, b)变成

$$u(-\lambda)=0;\quad u(\infty)\to 0 \tag{40.6}$$

经典上，容许运动的间隔处在两个经典转折点 $\xi=-\lambda$ 和 $\xi=0$ 之间(图 27)，即完全处在 ξ 为负值的范围内.

微分方程(40.5)的解是 1/3 阶的贝塞耳函数，满足边界条件 $u(\infty)=0$ 的解是爱里函数①(图 28)

$$u(\xi)=C\cdot \mathrm{Ai}(\xi) \tag{40.7}$$

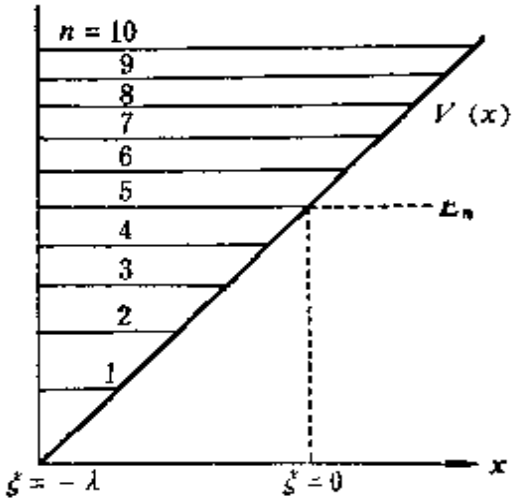


图 27　地球表面上空均匀引力势以及 1 个最低本能级

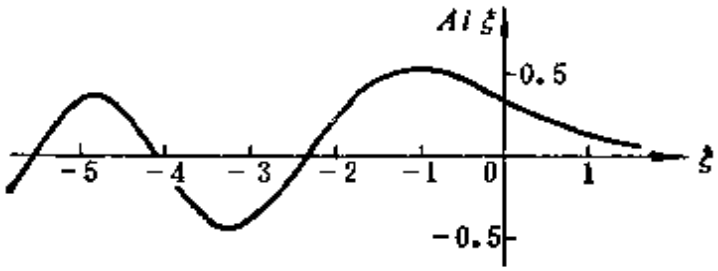


图 28　爱里函数

对于正的 ξ 值(相应于图 27 中转折点 $\xi=0$ 或 $x=\lambda$ 的右边)，爱里函数可表示为变型的汉克尔函数

$$\mathrm{Ai}(\xi)=\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{\xi}{3}}\,K_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right)\ \text{对}\ \xi>0 \tag{40.8}$$

① 目前已经有了详细的爱里函数及其零点的表，例如可以参看 Abramowitz, M., Stegun, I. E. 数学函数手册: Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover 1965 年版. 本问题中的零点表取自该书.

从一般公式

$$K_\nu(z)\to\sqrt{\frac{\pi}{2z}}e^{-z};\quad z\to\infty$$

可得 $u(\xi)$ 的渐近行为

$$u(\xi)\to C\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\xi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}}\quad \text{对 } \xi\to\infty \tag{40.9}$$

在经典间隔(即负的 ξ 值)中,爱里函数表示为贝塞耳函数

$$\mathrm{Ai}(-\zeta)=\frac{1}{3}\sqrt{\zeta}\left\{J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right)+J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right)\right\}$$

或

$$u(\xi)=\frac{C}{3}\sqrt{|\xi|}\left\{J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}}\right)+J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}}\right)\right\}\quad \text{对 } \xi<0 \tag{40.10}$$

按照(40.6)的另一边界条件,此函数在 $\xi=-\lambda$ 处必须等于零. 由于 λ 是(用适当单位表示的)能量本征值,因此这些本征值由

$$\mathrm{Ai}(-\lambda)=0 \tag{40.11a}$$

或

$$J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\lambda^{\frac{3}{2}}\right)+J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\lambda^{\frac{3}{2}}\right)=0 \tag{40.11b}$$

得出.

零 点 表

$\mathrm{Ai}(-\lambda_n)=0$		$\mathrm{Ai}'(-\lambda_n)=0$	
n	λ_n	n	λ_n
1	2.338	6	9.023
2	4.088	7	10.040
3	5.521	8	11.009
4	6.787	9	11.936
5	7.944	10	12.829

在附表中列出了爱里函数的前十个零点: 相应的能级已画在前面图 27 中. 对较高的能级, $\lambda\gg1$, 可应用渐近关系

$$J_{\frac{1}{3}}(z)\to\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z-\frac{5\pi}{12}\right);\quad J_{-\frac{1}{3}}(z)\to\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z-\frac{\pi}{12}\right)$$

代入(40.10)式，给出

$$u(\xi)\to\frac{C}{\sqrt{3\pi}}|\xi|^{-\frac{1}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)\quad(\text{对于大的}\ \xi\ \text{负值}) \tag{40.12}$$

和本征值条件

$$\frac{2}{3}\lambda_n^{\frac{3}{2}}=\left(2n-\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}. \tag{40.13}$$

上式给出的本征值正好补充了表中 $n\gg1$ 的部分．从(40.13)式立即得到能量本征值

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2ml^2}\left\{\frac{3\pi}{4}\left(2n-\frac{1}{2}\right)\right\}^{\frac{2}{3}}\quad(\text{对}\ n\gg1) \tag{40.14}$$

注 1　渐近公式(40.9)和(40.12)与用 WKB 近似所得到的结果完全一致，参见问题 115，那里讨论通过转折点时波函数的解析延拓，而不必求助于爱里函数．

注 2　本问题中的特征长度 l 对任何质量都可以计算出来，对于电子，$l=0.088\text{cm}$．并且质量愈大 l 愈小($l\propto m^{-\frac{2}{3}}$)，(40.14)式中的基本能量常数

$$\varepsilon=\frac{\hbar^2}{2ml^2}$$

对于电子是 $\varepsilon=1.03\times10^{-25}$ 尔格，并且质量愈大，ε 愈小．这些数量级使我们对于在宏观物体中量子效应趋于零这一点有相当深刻的印象，对于较大的质量，波函数(40.12)的波长变得非常短，以致只有 u^2 对许多波长的平均值才有意义．即

$$\overline{u^2}=\frac{|C|^2}{6\pi}|\xi|^{-\frac{1}{2}}=\frac{|C|^2}{6\pi}\cdot\frac{1}{\sqrt{\lambda-\frac{x}{l}}}$$

引入 $h=\lambda l$，它是经典运动的最高点，则

$$\overline{u^2}\propto\frac{1}{\sqrt{h-x}}$$

这与经典的预言完全一致．$\overline{u^2}dx$ 是在间隔 dx 中找到粒子(在定态中跳动!)的几率．由于这个几率正比于在此间隔中的停留时间 dt，因此有

$$\overline{u^2}\,dx \propto dt$$

或 $v=dx/dt \propto \frac{1}{u^2} \propto \sqrt{h-x}$，这和经典力学给出的

$$v=\sqrt{2g(h-x)}$$

完全一致．值得注意的是，在经典力学中，这是最基本和最简单的问题之一，而用量子力学处理时却遇到这样大的数学困难．

注 3 从测不准关系不难得到：零点能 $E_1=\varepsilon\lambda_1$ 具有 ε 的数量级．因为 $\Delta p\cdot\Delta x=\hbar$ 而 $\Delta p\sim\sqrt{2mE}$，并且经典的运动间隔 $\Delta x=\frac{E}{mg}$，所以

$$\Delta p\cdot\Delta x=\sqrt{2mE}\,\frac{E}{mg}=\hbar$$

或

$$E=\sqrt[3]{\frac{1}{2}\hbar^2mg^2}=\varepsilon$$

这个数量级正是我们所预期的．

问题 41　加 速 电 场

设初能量为 E 的电子流从金属表面沿正 x 方向发射出来，并且在正 x 方向上有一个加速电场 $\mathscr{E}$，试用量子力学证明下述经典公式仍然成立

$$\frac{1}{2}mv^2=E+e\mathscr{E}x \tag{41.1}$$

其中 v 是距离金属表面为 x 处电子的速度．

解　由于 $V(x)=-e\mathscr{E}x$，我们必须解如下的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2u}{dx^2}-e\mathscr{E}xu=Eu \quad \text{对 } x>0 \text{（参见图 29）}, \tag{41.2}$$

找出代表沿正 x 方向行进的波的解．与前题所用方法类似，利用特征长度 l 和无量纲参量 λ：

$$\frac{2me\mathscr{E}}{\hbar^2}=\frac{1}{l^3};\quad \frac{2mE}{\hbar^2}=\frac{\lambda}{l^2}, \tag{41.3}$$

以及无量纲变量

$$\xi=\frac{x}{l}+\lambda. \tag{41.4}$$

于是(41.2)式化为*

$$\frac{d^2u}{d\xi^2}+\xi u=0 \quad \text{对 } \xi>\lambda. \tag{41.5}$$

相应于出射波的解是

$$u(\xi)=C\sqrt{\frac{\pi}{3}}\,\xi H^{(1)}_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\,\xi^{\frac{3}{2}}\right) \tag{41.6}$$

从公式

$$H^{(1)}_{\frac{1}{3}}(z)\to\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\exp\left[i\left(z-\frac{5\pi}{12}\right)\right]$$

得到 $u(\xi)$ 的渐近行为是①

$$u(\xi)\to Ce^{-\frac{5\pi i}{12}}\xi^{-\frac{1}{4}}e^{\frac{2i}{3}\xi^{\frac{3}{2}}} \tag{41.7}$$

为了验证(41.1)式，我们求粒子通量流

$$s=\frac{\hbar}{2im}\left(u^*\frac{du}{dx}-u\frac{du^*}{dx}\right) \tag{41.8}$$

和粒子密度

$$\rho=u^*u \tag{41.9}$$

的比值，此比值就是粒子的速度 v. 从(41.7)式，可得

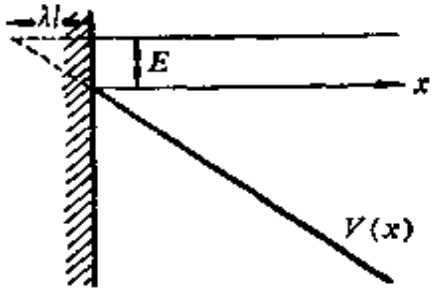


图 29　电子在均匀电场中的加速

$$\frac{du}{dx}=\frac{1}{l}\left(-\frac{1}{4\xi}+i\sqrt{\xi}\right)u,$$

因此，从(41.8)式得到

$$s=\frac{\hbar}{2iml}\left\{\left(-\frac{1}{4\xi}+i\sqrt{\xi}\right)-\left(-\frac{1}{4\xi}-i\sqrt{\xi}\right)\right\}u^*u$$

或

$$v=\frac{s}{\rho}=\frac{\hbar}{ml}\sqrt{\xi}=\frac{\hbar}{m}\frac{\sqrt{x+\lambda l}}{l^{\frac{3}{2}}}$$

---

* 相当于 $x>0$，应该是 $\xi>\lambda$，但原书中误为 $\xi>\frac{\lambda}{l}$. ——译者注

① 注意(41.7)式与 WKB 近似相同. 与前题一样，这里没有用到爱里函数，因为解析延拓不会有困难，而且还因为在这情况下所要找的解是第一和第二类爱里函数的线性组合

$$u=C\sqrt{\pi}\,e^{-\frac{i\pi}{6}}\{\mathrm{Ai}(-\xi)-i\,\mathrm{Bi}(-\xi)\}.$$

利用(41.3)式可将上式改写为

$$v=\sqrt{\frac{2e\mathscr{E}}{m}\left(x+\frac{E}{e\mathscr{E}}\right)}=\sqrt{\frac{2}{m}}\sqrt{e\mathscr{E}x+E}$$

这和(41.1)式完全一致.

在上面的证明中,用了波函数的渐近形式,即我们已假设 $\xi\gg1$ 或 $x\gg l$, 特征长度 l 可以从(41.3)式定出; 对于一个合理的场强 $\mathscr{E}=300$ 伏/厘米 (或 1 静电单位), 求得电子的特征长度 $l=3.69\times10^{-6}$ 厘米. 因此条件 $x\gg l$ 通常是很好地被满足的.

B 不具有球对称性的两个或三个自由度的问题

问题 42 圆 振 子

试研究一质点在二维势

$$V(x)=\frac{m}{2}\omega^2(x^2+y^2) \qquad (42.1)$$

作用下的运动.

解 这问题可用直角坐标也可用极坐标

$$r^2=x^2+y^2 \qquad (42.2)$$

来解,下面我们分别用两种方法求解,并比较所得结果.

a) 直角坐标: 薛定谔方程可以分离变量,即波函数可以写成两个单变量函数的积

$$u(x,\ y)=f(x)g(y)$$

而每一个函数满足一个一维谐振子方程(参见问题 30)

$$f''+(k_1^2-\lambda^2x^2)f=0;\qquad g''+(k_2^2-\lambda^2y^2)g=0$$

其中

$$k_1^2+k_2^2=k^2;\qquad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m};\qquad \lambda=\frac{m\omega}{\hbar}$$

因此,我们有本征值

$$k_1^2=2\lambda\left(n_1+\frac{1}{2}\right);\qquad k_2^2=2\lambda\left(n_2+\frac{1}{2}\right)$$

或

$$E=\hbar\omega(n_1+n_2+1);\qquad n_1,\ n_2=0,\ 1,\ 2,\cdots \tag{42.3}$$

而波函数是

$$u_{n_1n_2}(x,\ y)=f_{n_1}(x)f_{n_2}(y),$$

式中 f_{n_i} 代表在(30.10)式中给出的一维谐振子波函数，其归一化常数见(30.11)式．由于决定总能量的和

$$n_1+n_2=n \tag{42.4}$$

可以按 $n+1$ 种不同的方法分解为二个整数之和，因此能级是简并的．而一般解可写成下面的任意线性组合

$$u_n(x,\ y)=\sum_{n_1=0}^{n}A_{n_1}f_{n_1}(x)f_{n-n_1}(y) \tag{42.5}$$

其中 A_{n_1} 满足

$$\sum_{n_1=0}^{n}|A_{n_1}|^2=1. \tag{42.6}$$

b) 极坐标：这时势只与 r 有关，因此可将波函数写成

$$u(r,\ \varphi)=v(r)e^{iM\varphi};\qquad M=0,\ \pm1,\ \pm2,\cdots \tag{42.7}$$

其中 $v(r)$ 满足微分方程

$$\left(v''+\frac{1}{r}v'-\frac{M^2}{r^2}v\right)+(k^2-\lambda^2r^2)v=0$$

第一个括号来源于拉普拉斯算符．令

$$v=r^{|M|}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}F(r)$$

则 $F(r)$ 满足下面的微分方程

$$F''+\left(\frac{2|M|+1}{r}-2\lambda r\right)F'-[2\lambda(|M|+1)-k^2]F=0.$$

引入新变量

$$t=\lambda r^2$$

则上式可化为库末(Kummer)方程

$$t\frac{d^2F}{dt^2}+[(|M|+1)-t]\frac{dF}{dt}-\frac{1}{2}\left[(|M|+1)-\frac{k^2}{4\lambda}\right]F=0,$$

它在 $t=0$ 处正则的解是合流超几何级数

$$F(t)={}_1F_1(a,\ |M|+1;t),$$

其中

$$a=\frac{1}{2}(|M|+1)-\frac{k^2}{4\lambda} \tag{42.8}$$

对大的 t 值，此函数的发散行为和 e^t 一样，因而不可能满足归一化条件．当且仅当

$$a=-n_r \quad (n_r=0,\ 1,\ 2,\cdots) \tag{42.9}$$

时，合流超几何级数才能变成一多项式，因而波函数才能归一化．因此我们得到的解是

$$u_{n_r,M}(r,\ \varphi)=C_{n_r,M}r^{|M|}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}{}_1F_1(-n_r,\ |M|+1;\lambda r^2)e^{iM\varphi} \tag{42.10}$$

和

$$E=\hbar\omega(|M|+1+2n_r). \tag{42.11}$$

与(42.4)式相仿，可以令

$$|M|+2n_r=n,$$

我们又得到具有和前面相同的多重性的简并度．

c) 比较：每一个解(42.10)是二维角动量算符

$$L=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

的本征函数，其本征值为 $\hbar M$：

$$Lu_{n_r,M}=\hbar Mu_{n_r,M} \tag{42.12}$$

另一方面，直角坐标中的乘积解，除基态外，不是角动量的本征函数．然而我们可以在(42.5)式中选择适当的系数 A_{n_r}，使得简并乘积函数的线性组合给出 (42.10) 式类型的解．下面举三个最低的能态为例，这些结果可以用直接计算验证．

$n=0$ (基态，非简并)；$n_r=0,\ M=0,\ n=0,\ E=\hbar\omega$.

$$u_{0,0}(r,\ \varphi)=\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}=u_0(x)u_0(y)$$

$n=1$ (两个简并态)；$n_r=0,\ M=\pm1,\ n=1,\ E=2\hbar\omega$.

$$u_{0,\pm1}(r,\ \varphi)=\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}re^{-\frac{\lambda}{2}r^2}e^{\pm i\varphi}=\frac{1}{\sqrt{2}}\{u_1(x)u_0(y)\pm iu_0(x)u_1(y)\}$$

$n=2$（三个简并态）：$n_r=1, M=0$ 和 $n_r=0, M=\pm2, E=3\hbar\omega$.

$$u_{1,0}(r,\ \varphi)=\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}(1-\lambda r^2)e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\{u_2(x)u_0(y)+u_0(x)u_2(y)\};$$

$$u_{0,\pm2}(r,\ \varphi)=\sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}}\lambda r^2e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}e^{\pm2i\varphi}$$

$$=\frac{1}{2}\{u_0(x)u_2(y)-u_2(x)u_0(y)\pm i\sqrt{2}\,u_1(x)u_1(y)\}.$$

注　应将本问题与球谐振子的问题 65 和 66 相比较.

问题 43　二维转子的斯塔克效应

一个转动惯量为 Θ、电矩为 p 的刚性转子在一平面中转动. 试研究在 x 方向有一均匀电场 $\mathscr{E}$ 时能量项的微扰.

解　未受微扰的转子满足薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\Theta}\cdot\frac{d^2u}{d\varphi^2}=Eu \tag{43.1}$$

其本征函数是

$$|m>=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi},\qquad m=0,\ \pm1,\ \pm2,\cdots \tag{43.2}$$

能量本征值是

$$E_m=\frac{\hbar^2m^2}{2\Theta} \tag{43.3}$$

微扰势是

$$V(\varphi)=-p\mathscr{E}\cos\varphi; \tag{43.4}$$

它在 $\varphi=0$ 处有极小值$(-p\mathscr{E})$，而在 $\varphi=\pi$ 处有极大值$(+p\mathscr{E})$. 对能量本征值(43.3)的一级修正是

$$\Delta_1E_m=\langle m|V|m\rangle=-\frac{p\mathscr{E}}{2\pi}\oint d\varphi\,e^{-im\varphi}\cos\varphi e^{im\varphi}.$$

由于这个积分等于零，所以

$$\Delta_1 E_m = 0, \tag{43.5}$$

因此，只可能有正比于 $\mathscr{E}^2$ 的二级斯塔克效应：

$$\Delta_2 E_m = \sum_{m}{}' \frac{|\langle m'|V|m\rangle|^2}{E_m - E_{m'}} \tag{43.6}$$

上面求和式中的 V 的非对角元是

$$\begin{aligned}\langle m'|V|m\rangle &= -\frac{p\mathscr{E}}{2\pi}\oint d\varphi\, e^{i(m-m')\varphi}\cos\varphi \\ &= -\frac{1}{2}\, p\mathscr{E}(\delta_{m',m+1}+\delta_{m',m-1}).\end{aligned} \tag{43.7}$$

因此，(43.6)的求和只包含 $m' = m \pm 1$ 两项：

$$\Delta_2 E_m = \frac{1}{4}\, p^2\mathscr{E}^2\, \frac{2\Theta}{\hbar^2}\left\{\frac{1}{m^2-(m-1)^2}+\frac{1}{m^2-(m+1)^2}\right\}$$

或

$$\Delta_2 E_m = \mathscr{E}^2\, \frac{p^2\Theta}{\hbar^2}\, \frac{1}{4m^2-1}. \tag{43.8}$$

在上述近似下，本征函数从一般公式

$$u_m = |m\rangle + \sum_{m'}{}' |m'\rangle \frac{\langle m'|V|m\rangle}{E_m - E_{m'}} \tag{43.9}$$

算出．这时求和只剩下两项：

$$u_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{e^{im\varphi} + \frac{1}{2}\, p\mathscr{E}\left[\frac{1}{2m+1}\, e^{i(m+1)\varphi} - \frac{1}{2m-1}\, e^{i(m-1)\varphi}\right]\right\}. \tag{43.10}$$

在同样的近似程度下

$$|u_m|^2 = 1 - \frac{2p\mathscr{E}}{4m^2-1}\cos\varphi \tag{43.11}$$

表示出沿着圆周的变化．对于 $m=0$ 的情况，

$$|u_m|^2 = 1 + 2p\mathscr{E}\cos\varphi,$$

即在场方向($\varphi=0$)上找到偶极子的几率最大，而在相反方向($\varphi=\pi$)则最小．这显然对应于一个偶极子在静电场中的经典取向．另一方面，如果 $m \neq 0$，则(43.11)式中的附加项符号相反，因此我

们得到相反的行为. 即使如此，也还是可以用经典模型来理解：当偶极子转动时，它通过 $\varphi=0$（势的极小值处）附近的速度要比它通过相反方向（$\varphi=\pi$，势的极大值处）的速度来得大. 因此如果我们能得到一系列快照的统计结果，将发现转子在 $\varphi=\pi$ 附近比在 $\varphi=0$ 附近出现得更为频繁.

注 1 虽然态 $|m\rangle$ 和 $|-m\rangle$ 是简并的，但没有必要用它们的线性组合

$$|\xi,|m|\rangle=\alpha_{\xi,|m|}|m\rangle+\beta_{\xi,|m|}|-m\rangle,\quad \xi=1,2$$

来代替 $|m\rangle$ 和 $|-m\rangle$ 本身，因为微扰势的矩阵元 $\langle -m|V|m\rangle=0$，因此在这一对态之间不可能有耦合.

注 2 如果垂直于转动平面加一磁场 $\mathscr{H}$，将引起另一势能项

$$V_{磁}=-\mathscr{M}\cdot\mathscr{H}$$

其中 $\mathscr{M}$ 是和角动量有关的磁矩

$$\mathscr{M}=\frac{e}{2Mc}\mathbf{L}$$

因此，对于质量为 M，电荷为 e 的转子

$$V_{磁}=-\frac{e}{2Mc}\mathscr{H}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}=i\mu\mathscr{H}\frac{\partial}{\partial\varphi}\quad 而\ \mu=\frac{e\hbar}{2Mc}$$

这时，薛定谔方程(43.1)化为

$$-\frac{\hbar^2}{2\Theta}\frac{d^2u}{d\varphi^2}+i\mu\mathscr{H}\frac{du}{d\varphi}=Eu$$

它的解仍然是(43.2)，但是本征值

$$E_m=\frac{\hbar^2}{2\Theta}m^2-\mu\mathscr{H}m$$

对于 m 的符号不再简并（二维塞曼效应）.

问题 44 离化氢分子

设 H_2^+ 中的两个质子相距 R，电子与它们的距离为 r_a 和 r_b（图 30）. 试近似计算 $H_2^+\rightarrow H+H^+$ 的离解能. 在计算中用

$$|a\rangle=\frac{\gamma^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}e^{-\gamma r_a}\quad 和\quad |b\rangle=\frac{\gamma^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}e^{-\gamma r_b}\qquad (44.1)$$

的线性组合构成电子的本征函数，并利用 γ 作为里兹参量. 确定

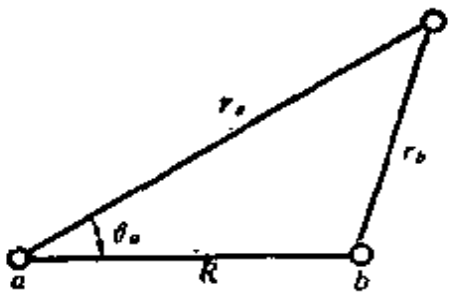


图 30　H_2^+ 分子的坐标

平衡距离 R，然后再考虑两个质子相对振动的零点能.

解　我们先假定两个质子分开一固定的距离 R(固定核的玻恩-奥本海默近似),则电子运动的薛定谔方程(用原子单位表示)为

$$Hu\equiv-\frac{1}{2}\nabla^2u-\left(\frac{1}{r_a}+\frac{1}{r_b}\right)u=E_eu \tag{44.2}$$

其中 E_e 是电子的能量. 于是固定核的分子的能量是

$$E_{分子}=\frac{1}{R}+E_e \tag{44.3}$$

应用变分法使表示式

$$E_{分子}=\langle u|H|u\rangle+\frac{1}{R} \tag{44.4}$$

在约束条件

$$\langle u|u\rangle=1 \tag{44.5}$$

下成为极小. 利用线性组合

$$u=\alpha|a\rangle+\beta|b\rangle, \tag{44.6}$$

其中 $|a\rangle$ 与 r_a 的函数关系和 $|b\rangle$ 与 r_b 的函数关系相同，设 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 都是归一化的,则有

$$\langle a|a\rangle=\langle b|b\rangle=1 \quad 而 \quad \langle a|b\rangle=\langle b|a\rangle=S \tag{44.7}$$

式中 S 称为重叠积分. 以(44.6)代入(44.4)式和(44.5)式，则得

$$E_{分子}=(\alpha^2+\beta^2)\langle a|H|a\rangle+2\alpha\beta\langle b|H|a\rangle+\frac{1}{R}=极小 \tag{44.8}$$

和

$$(\alpha^2+\beta^2)+2\alpha\beta S=1 \tag{44.9}$$

从对称性考虑,显然有两个解,一个是对称的,

$$\alpha=\beta=\frac{1}{\sqrt{2(1+S)}};\quad E_e=\frac{\langle a|H|a\rangle+\langle b|H|a\rangle}{1+S} \tag{44.10}$$

另一个是反对称的,

$$\alpha=-\beta=\frac{1}{\sqrt{2(1-S)}};\quad E_e=\frac{\langle a|H|a\rangle-\langle b|H|a\rangle}{1-S},\tag{44.11}$$

对称解属于较低的能级，因而给出分子的基态．因此下面只讨论(44.10)式．

现在利用(44.1)式中特殊的归一化函数 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$，由直接计算可得

$$H|a\rangle=\left\{-\frac{1}{2}\gamma^2+\frac{\gamma-1}{r_a}-\frac{1}{r_b}\right\}|a\rangle$$

因此

$$\langle a|H|a\rangle=\frac{\gamma^3}{\pi}\int d\tau\, e^{-2\gamma r_a}\left\{-\frac{1}{2}\gamma^2+\frac{\gamma-1}{r_a}-\frac{1}{r_b}\right\}\tag{44.12}$$

$$\langle b|H|a\rangle=\frac{\gamma^3}{\pi}\int d\tau\, e^{-\gamma(r_a+r_b)}\left\{-\frac{1}{2}\gamma^2+\frac{\gamma-1}{r_a}-\frac{1}{r_b}\right\}.\tag{44.13}$$

引入缩写

$$\mathscr{C}=\frac{\gamma^3}{\pi}\int d\tau\,\frac{e^{-2\gamma r_a}}{r_b};\qquad \mathscr{E}=\frac{\gamma^3}{\pi}\int d\tau\,\frac{e^{-\gamma(r_a+r_b)}}{r_b}\tag{44.14}$$

以及与定义(44.7)相应的

$$S=\frac{\gamma^3}{\pi}\int d\tau\, e^{-\gamma(r_a+r_b)},\tag{44.15}$$

则可将(44.12)和(44.13)化为

$$\langle a|H|a\rangle=-\frac{1}{2}\gamma^2+\gamma(\gamma-1)-\mathscr{C}\tag{44.16}$$

和

$$\langle b|H|a\rangle=-\frac{1}{2}\gamma^2S+(\gamma-2)\mathscr{E}\tag{44.17}$$

于是

$$E_{分子}=-\frac{1}{2}\gamma^2+\frac{\gamma(\gamma-1)-\mathscr{C}+(\gamma-2)\mathscr{E}}{1+S}+\frac{1}{R}\tag{44.18}$$

剩下来的问题是计算积分 $\mathscr{C}$、$\mathscr{E}$ 和 S．积分 $\mathscr{C}$，即所谓经典相互作用积分，描述质子 b 对按波函数 $|a\rangle$ 分布在质子 a 周围的电子电荷的库仑相互作用能，为了计算积分 $\mathscr{C}$，利用展开(参见图30)

$$\frac{1}{r_b}=\begin{cases}\dfrac{1}{R}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\dfrac{r_a}{R}\right)^n P_n(\cos\theta_a) & \text{当 } r_a<R,\\ \dfrac{1}{r_a}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\dfrac{R}{r_a}\right)^n P_n(\cos\theta_a) & \text{当 } r_a>R.\end{cases}$$

只有其中 $n=0$ 的一项对积分 $\mathscr{C}$ 有贡献，利用初等积分可得

$$\mathscr{C}=\frac{1}{R}[1-(1+\gamma R)e^{-2\gamma R}] \tag{44.19}$$

积分 $\mathscr{E}$ 称为交换积分，它没有经典的对应，而是本征函数对称化(即本征函数对于电子在 a 处的位置和在 b 处的位置交换是不变的)的结果. 为了计算 $\mathscr{E}$，需要采用以两个质子作为焦点的共轴旋转椭球坐标系. 令

$$r_a=\frac{R}{2}(\xi+\eta),\quad r_b=\frac{R}{2}(\xi-\eta),$$

除去 ξ、η 外，用围绕分子轴的转角 φ 作为第三个坐标，则体积元为

$$d\tau=\left(\frac{R}{2}\right)^3(\xi^2-\eta^2)d\xi d\eta d\varphi,$$

积分区间是 $1\leqslant\xi\leqslant\infty$，$-1\leqslant\eta\leqslant+1$，$0\leqslant\varphi\leqslant2\pi$. 同样的办法可用来计算重叠积分 S。结果是

$$\mathscr{E}=\gamma(1-\gamma R)e^{-\gamma R} \tag{44.20}$$

和

$$S=\left(1+\gamma R+\frac{1}{3}\gamma^2R^2\right)e^{-\gamma R} \tag{44.21}$$

如果我们将(44.19—21)代入(44.18)式，则能量 $E_{分子}$ 是两个参量 γ 和 R 的函数. 为方便起见，用 γ 和

$$\rho=\gamma R \tag{44.22}$$

代替 γ 和 R 作为求能量极小值的里兹参数. 于是，除(44.21)式的 S 外，$\mathscr{C}$ 和 $\mathscr{E}$ 可化为

$$\mathscr{C}=\gamma\mathscr{C}',\quad \mathscr{C}'=\frac{1}{\rho}[1-(1+\rho)e^{-2\rho}] \tag{44.23}$$

$$\mathscr{E}=\gamma\mathscr{E}',\quad \mathscr{E}'=(1+\rho)e^{-\rho} \tag{44.24}$$

由此可见，S，$\mathscr{C}'$，$\mathscr{E}'$都只和参量 ρ 有关，这样一来，(44.18)式化为

$$E_{分子}=-\frac{1}{2}\gamma^2+\frac{\gamma(\gamma-1)-\gamma\mathscr{C}'+\gamma(\gamma-2)\mathscr{E}'}{1+S}+\frac{\gamma}{\rho}. \tag{44.25}$$

它可写成如下的函数形式

$$E_{分子}=f(\rho)\gamma^2+g(\rho)\gamma$$

因此，从

$$\frac{\partial E_{分子}}{\partial\gamma}=2\gamma f(\rho)+g(\rho)=0$$

可以定出最佳的 γ 值：

$$\gamma=-\frac{g(\rho)}{2f(\rho)},$$

并得出

$$E_{分子}=-\frac{g^2(\rho)}{4f(\rho)}.$$

现在还必须确定这个表示式(作为一个变量 ρ 的函数)的极小值.

由稍许冗长但并不困难的数值计算得出的主要结果列在附表中

计算结果的表

$\gamma R=\rho$	γ	$-E_{分子}$	R
1.0	0.832	0.300	1.200
1.5	1.113	0.500	1.345
2.0	1.216	0.573	1.645
2.3	1.235	0.5848	1.86
2.5	1.240	0.5865	2.02
2.8	1.228	0.5827	2.28
3.0	1.216	0.578	2.47
3.5	1.180	0.560	2.96

如果通过 $\rho=2.3$、2.5 和 2.8 三个点作一条能量抛物线，我们甚至可以将极小值确定得比表中所示的更为准确. 利用内插法，我们得到

$$E_{分子}=0.0380(R-2.08)^2-0.5866, \tag{44.26}$$

即与能量极小值相应的平衡距离是

$$R_0=2.08\text{ 原子单位(u)}=1.10\text{Å},$$

能量抛物线最小值的深度是

$$V_0=-0.5866\text{ 原子单位}.$$

为了求离解能 D，必须考虑在核振子势(44.26)中分子振动的零点能$\frac{1}{2}\hbar\omega$，并从分子的结合能中减去氢原子的结合能$\left(\text{等于}-\frac{1}{2}\text{u}\right)$：

$$D=-\frac{1}{2}\text{u}-\left(V_0+\frac{1}{2}\hbar\omega\right)=0.0866\text{u}-\frac{1}{2}\hbar\omega=2.36\text{eV}-\frac{1}{2}\hbar\omega.$$

为了粗略地计算零点能我们对于势只考虑谐振子近似(44.26)，这时显然有 $\frac{1}{2}M\omega^2=0.0380$（参见问题 30），$M$是振动的约化质量，即质子质量的一半．采用原子单位，给出 $\hbar\omega=0.00913$，因而零点能是

$$\frac{1}{2}\hbar\omega=0.00457\text{u}=0.124\text{eV}$$

因此离解能 $D=2.24\text{eV}$．将这一近似值和实验值 2.65 eV 相比较．考虑到我们的理论近似计算的是 V_0 而不是 D，上述结果看来是相当不错的；V_0 的实验值是 $V_0=-0.6017$，因此我们的理论值 $V_0=-0.5866$ 只和它相差 2.6%．

问题 45　平面波的斜入射

设有平面波斜入射到理想化的势阶

$$V=\begin{cases}0 & \text{当 } x<0\\ V_0 & \text{当 } x>0\end{cases}$$

上．试导出反射定律和折射定律，并求出反射和折射粒子束的强度．特别注意讨论全反射的情况。

解　下面将采用缩写

$$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2;\quad \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}=K^2 \tag{45.1}$$

假设 $V_0<E$，即 K 是实数(这包括 V_0 为负的情况)．在 $x<0$ 的半空间中，薛定谔方程的标准的归一化解是

$$u=e^{ik\cdot r}+Re^{ik'\cdot r}\quad (x<0) \tag{45.2a}$$

其中 $\boldsymbol{k}=(k_x, k_y, k_z)$是入射波的波矢，$R$ 和 $\boldsymbol{k}'=(k'_x, k'_y, k'_z)$是反射波的振幅和波矢．在 $x>0$ 的半空间中只有透射波

$$u=Te^{K\cdot r}\quad (x>0) \tag{45.2b}$$

它的振幅是 T，波矢是 $\boldsymbol{K}=(K_x, K_y, K_z)$．这里我们有

$$\boldsymbol{k}^2=\boldsymbol{k}'^2=k^2;\quad \boldsymbol{K}^2=K^2. \tag{45.3}$$

在 $x=0$ 的分界面上，不论是用(45.2a)或用(45.2b)来计算，u 和 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 作为变量 y 和 z 的函数必定是相同的，由此可见，不仅它们的位相必定相等：

$$k_y y+k_z z=k'_y y+k'_z z=K_y y+K_z z, \tag{45.4}$$

而且 u 和 $\frac{\partial u}{\partial x}$ 的振幅也一定分别相等，即

$$1+R=T;\quad k_x+Rk'_x=TK_x. \tag{45.5}$$

首先研究(45.4)式．如果选择 z 轴使 $k_z=0$，即 z 轴垂直于入射平面，则讨论将大为简化．这时，按照(45.4)式，k'_z 和 K_z 也等于零．因此两个矢量 $\boldsymbol{k}'$ 和 $\boldsymbol{K}$ 都在 xy 平面中．在图 31 中画出了三个波矢并定义了三个角度 α, α', β．利用这些角度可以将(45.4)式的 y 分量写成

$$k\sin\alpha=k\sin\alpha'=K\sin\beta.$$

因此得到反射定律 $\alpha=\alpha'$ 和斯涅耳折射定律

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}=\frac{K}{k}; \tag{45.6a}$$

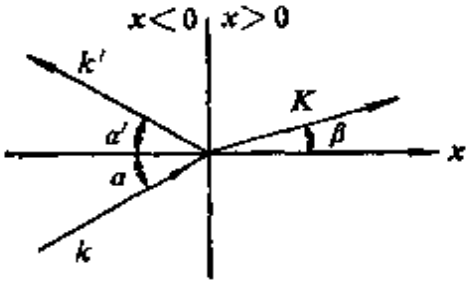


图 31　斜入射的波矢和角度的定义

与光学中相同，由上式可定义一个折射率

$$n=\frac{K}{k}=\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}. \tag{45.6b}$$

由(45.5)式，可得振幅 T 和 R，即

$$\left.\begin{aligned} R&=\frac{K_x-k_x}{k'_x-K_x}=\frac{K\cos\beta-k\cos\alpha}{-k\cos\alpha-K\cos\beta}=-\frac{\sin(\alpha-\beta)}{\sin(\alpha+\beta)}\\ T&=\frac{k'_x-k_x}{k'_x-K_x}=\frac{-k\cos\alpha-k\cos\alpha}{-k\cos\alpha-K\cos\beta}=\frac{2\cos\alpha\sin\beta}{\sin(\alpha+\beta)} \end{aligned}\right\} \tag{45.7}$$

有了这些振幅，就可进一步计算三个波的强度，我们把它们定义为流密度

$$\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{2i/m}(u^*\nabla u-u\nabla u^*). \tag{45.8}$$

在 $x<0$ 的入射半平面中，从(45.2a)式可得

$$\nabla u=i\boldsymbol{k}e^{ik\cdot r}+Ri\boldsymbol{k}'e^{ik'\cdot r},$$

直接计算后得到矢量

$$\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{m}\left\{\boldsymbol{k}+R^2\boldsymbol{k}'+R(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cos(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}\right\},$$

它的分量是

$$\left.\begin{aligned} s_x&=\frac{\hbar}{m}k\cos\alpha(1-R^2)\\ s_y&=\frac{\hbar}{m}k\sin\alpha\{1+R^2+2R\cos(2kx\cos\alpha)\} \end{aligned}\right\} \tag{45.9}$$

在势的突变面的另一边($x>0$)，由(45.2b)式可得

$$\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{m}T^2\boldsymbol{K},$$

它的分量是

$$s_x=\frac{\hbar}{m}K\cos\beta\cdot T^2;\qquad s_y=\frac{\hbar}{m}K\sin\beta\cdot T^2. \tag{45.10}$$

通量的连续性要求 s_x 在势的突变面的两边是相等的，即

$$k\cos\alpha(1-R^2)=K\cos\beta T^2.$$

利用(45.6a)和(45.7)不难证明上式的确是恒等的．另一方面，分量 s_y 并不受这样的条件限制（除了要求 s_y 不依赖于 y 这一条件）．然而，有意思的是 s_y 依赖于 x 是由于入射波与反射波之间干涉的

结果. 在势阶前面 ($x<0$) 任何地方 s_y 随距离的周期性变化，都不会引起符号的改变，因为(45.9)式中的花括号是在$(1-R)^2$和$(1+R)^2$之间振荡，而两者都是正的.

如果对包括几个波长的区域求平均，则干涉项的贡献将相互抵消，于是入射流、反射流和透射流变为

$$s_0=\frac{\hbar}{m}k;\qquad s_r=\frac{\hbar}{m}R^2k';\qquad s_t=\frac{\hbar}{m}T^2K \tag{45.11}$$

这些矢量绝对值称为强度，比值 $s_r/s_0=R^2$ 是光学的反射系数，$s_t/s_0=nT^2$ 是透射系数.

对于 $V_0>E$，即如果(45.1)式中的 K 是虚数：

$$K=i\varkappa,$$

将出现全反射. 由于(45.4)式仍然必须成立，因此 $K_y=k\sin\alpha$ 并且 $K_z=0$，由此可见

$$K_x^2=K^2-K_y^2-K_z^2=-(\varkappa^2+k^2\sin^2\alpha)$$

是负的，$K_x=i\varkappa_x$ 是虚数. 于是(45.5)式可以写为

$$1+R=T;\qquad k_x+Rk'_x=Ti\varkappa_x. \tag{45.5'}$$

反射定律和前面的一样. 自然，现在不存在折射定律，并且代替(45.7)式，我们得到的是

$$R=\frac{i\varkappa_x-k\cos\alpha}{-k\cos\alpha-i\varkappa_x};\qquad T=\frac{-2k\cos\alpha}{-k\cos\alpha-i\varkappa_x} \tag{45.7'}$$

因此 $|R|^2=1$，于是反射强度等于入射强度，这是与任何波在全反射情况下的行为一致的.

注　对这个问题的考虑和光学中的相同. 然而，由于光的矢量特征，光波入射到一个折射面的理论要复杂得多，而这里我们只简单地处理标量波. (45.7)式相应于垂直于入射平面的电矢量分量所满足的菲涅耳公式.

问题 46　对称陀螺

在处理一大类分子的转动问题时，可以将分子看作是一个刚

体，而不考虑核的振动和电子的运动．设分子具有对称陀螺的形状，其对于体轴（即对称轴）的转动惯量是 C，而对于一切垂直于体轴并通过质心的轴的转动惯量是 A．试由经典哈密顿量导出自由转动的薛定谔方程，并确定能量本征值．

解 如果体轴的位置用角度 θ 和 φ 来描述，并且陀螺围绕该轴的转动用角度 ψ 来描述，则动能的经典表示式是①

$$T_{经典}=\frac{1}{2}\{A(\dot{\varphi}^2\sin^2\theta+\dot{\theta}^2)+C(\dot{\varphi}\cos\theta+\dot{\psi})^2\} \tag{46.1}$$

三个欧拉角 θ、φ、ψ 是广义坐标，由于 $T_{经典}$ 是 $\dot{\theta}$、$\dot{\varphi}$、$\dot{\psi}$ 的二次式，可应用问题 13 中给出的方法将它转变到量子表示式．那里定义的度规张量具有如下的协变分量

$$\left.\begin{array}{lll} g_{\theta\theta}=A, & g_{\theta\varphi}=0, & g_{\theta\psi}=0 \\ g_{\varphi\theta}=0, & g_{\varphi\varphi}=A\sin^2\theta+C\cos^2\theta, & g_{\varphi\psi}=C\cos\theta \\ g_{\psi\theta}=0, & g_{\psi\varphi}=C\cos\theta, & g_{\psi\psi}=C \end{array}\right\} \tag{46.2}$$

其行列式为

$$g=A^2C\sin^2\theta. \tag{46.3}$$

逆变分量由 $g^{ik}=G_{ik}/g$ 给出：

$$\left.\begin{array}{lll} g^{\theta\theta}=\dfrac{1}{A}, & g^{\theta\varphi}=0, & g^{\theta\psi}=0 \\ g^{\varphi\theta}=0, & g^{\varphi\varphi}=\dfrac{1}{A\sin^2\theta}, & g^{\varphi\psi}=-\dfrac{\cos\theta}{A\sin^2\theta}, \\ g^{\psi\theta}=0, & g^{\psi\varphi}=-\dfrac{\cos\theta}{A\sin^2\theta}, & g^{\psi\psi}=\dfrac{1}{C}+\dfrac{\cos^2\theta}{A\sin^2\theta}. \end{array}\right\} \tag{46.4}$$

按照(13.11)式可以通过直接计算求出动能算符，结果是

$$T=-\frac{\hbar^2}{2A}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-\frac{2\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi\partial\psi}+\left(\frac{A}{C}+\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\right)\frac{\partial^2}{\partial\psi^2}\right\}. \tag{46.5}$$

① 这个表示式的推导见经典力学教科书，例如作者的 Lehrbuch der theoretischen Physik Vol II，第50、75 页．[可参见朗道、栗弗席兹：《力学》，147 页，(35.2) 式（中译本，高等教育出版社，1959年）——译者注]

因此，对于自由旋转的陀螺，薛定谔方程变为

$$Tu=Eu, \tag{46.6}$$

由于没有外加的势能，因此 T 就是哈密顿量.

具有(46.5)式的 T 算符的方程(46.6)，可以用分离变量法求解，即令

$$u=f(\theta)e^{i(M\varphi+K\psi)}. \tag{46.7}$$

由于角度 φ 和 ψ 的取值范围是 0 到 2π，为了保证 u 的单值性，量子数 M 和 K 必须是整数. 这些量子数可以很简单地解释如下：$\hbar M$ 是角动量在固定于空间的 z 轴(极轴)方向上的分量，而 $\hbar K$ 是角动量在固定于物体的对称轴方向上的分量.

以(46.7)代入(46.6)，则得 $f(\theta)$ 满足的微分方程

$$-\frac{\hbar^2}{2A}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)-\frac{M^2}{\sin^2\theta}+\frac{2MK\cos\theta}{\sin^2\theta}\right.$$
$$\left.-\left(\frac{A}{C}+\frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\right)K^2\right\}f=Ef. \tag{46.8}$$

利用缩写

$$\lambda=\frac{2A}{\hbar^2}E-K^2\left(\frac{A}{C}-1\right), \tag{46.9}$$

并引入变量

$$s=\frac{1}{2}(1+\cos\theta)=\cos^2\frac{\theta}{2};\quad 0\leqslant s\leqslant 1, \tag{46.10}$$

则微分方程(46.8)化为

$$s(1-s)\frac{d}{ds}\left[s(1-s)\frac{df}{ds}\right]+\left[\lambda s(1-s)-\frac{1}{4}(M+K)^2+MKs\right]f=0 \tag{46.11}$$

我们用如下两个正数代替量子数 M 和 K：

$$p=\frac{1}{2}|M+K|;\quad q=\frac{1}{2}|M-K| \tag{46.12}$$

因而

$$\frac{1}{4}(M+K)^2=p^2;\quad MK=p^2-q^2.$$

现在我们令

$$f(s)=s^p(1-s)^qF(s), \tag{46.13}$$

则(46.11)式化为超几何级数的微分方程：

$$s(1-s)F''+[(2p+1)-(2p+2q+2)s]F' \\ -[(p+q)(p+q+1)-\lambda]F=0 \tag{46.14}$$

这方程在$s=0(\theta=\pi)$的正则解是

$$F={}_2F_1(p+q+1+J,\ p+q-J,\ 2p+1;\ s) \tag{46.15}$$

并且

$$\lambda=J(J+1), \tag{46.16}$$

或，按(46.9)式有

$$E=\frac{\hbar^2}{2A}J(J+1)+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{C}-\frac{1}{A}\right)K^2 \tag{46.17}$$

方程(46.14)的第二解在$s=0$处是奇异的，即$F\propto s^{-2p}$或$f(s)\propto s^{-p}$，因此可以弃去.

必须着重指出，到现在为止，J只不过是另一个缩写，并不一定要求它是整数，因此到此为止(46.17)式并不描述确定的能级. 然而我们还没有用到第二个边界条件. 在$s=1(\theta=0)$处，超几何级数(46.15)如果不中断，则$F\propto(1-s)^{-2q}$或$f\propto(1-s)^{-q}$将是奇异的. 要使级数中断只有(46.15)的第一个或第二个参数是负整数才行. 第一个参数按定义是正的，因此只有

$$p+q-J=-n,\quad n=1,\ 2,\ 3,\cdots \tag{46.18}$$

才行. 这将使F变为一个n阶多项式，并且波函数在所有物理角度都是有限的. 按照(46.12)式，$p+q$是一正整数，它或者等于$|K|$，或者等于$|M|$，这要看两者之中哪一个比较大而定，因此$J=n+p+q$是一个整数，并且它决不会小于$|K|$和$|M|$中较大的一个. 可以合理地认为J是陀螺的总角动量(到现在为止我们还没有证明这一点)，因为一个矢量决不会比它的任何分量还小. 仅仅是这些结果使(46.17)最终成为一个本征值公式.

J实际上是总角动量量子数，这一点很容易从经典表示式

$$T_{经典}=\frac{1}{2A}\left\{\boldsymbol{J}^2+\left(\frac{A}{C}-1\right)\boldsymbol{K}^2\right\}$$

看出来，自然，这个表示式是和(46.17)相对应的.

注 1 本征函数可用标准的符号表示为

$$\mathscr{D}^J_{MK}=\frac{1}{2\pi}\,e^{i(M\varphi+K\psi)}\,d^J_{MK}(\theta) \tag{46.19}$$

其中

$$d^J_{MK}=N^J_{MK}s^p(1-s)^q\,{}_2F_1(p+q+J+1,\ p+q-J,\ 2p+1;\ s). \tag{46.20}$$

它们分别满足如下的归一化条件：

$$\int_0^\pi d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{2\pi}d\psi\,|\mathscr{D}^J_{MK}|^2=1 \tag{46.21}$$

和

$$\int_0^\pi d\theta\sin\theta\,|d^J_{MK}|^2=1. \tag{46.22}$$

由上式可得

$$N^J_{MK}=\frac{\sqrt{2J+1}}{2(2p)!}\sqrt{\frac{(J+p+q)!\,(J+p-q)!}{(J-p+q)!\,(J-p-q)!}}. \tag{46.23}$$

从数学上看来，这些函数显然可以看成是矩阵 $\mathscr{D}^J$，而这些矩阵的矩阵元 $\mathscr{D}^J_{MK}$ 构成了三维空间转动群的 $2J+1$ 维表示. 也可参见问题 55.

注 2 建立算符 T[即(46.5)式]所用的方法，决不证明它可以应用于刚体，因为在问题 13 的讨论中只利用了质点组的广义坐标. 更为严重的是，在量子力学中不可能存在刚体，因为刚性意味着对于刚体组成部分的内部运动加以约束，这将导致一个无穷大的零点能. 只有将这些内部运动从系统的转动运动中正确地分离出来，才能解决这个问题. 在 S. Flügge 和A. Weiguny (Z. Physik, **171**, 171, 1963)的文章中已经做到了这一点①，文中完成了这种分离以及对于组成粒子在平衡位置附近作无限小振动的极限过程.

当然，表示式(46.5)和对称陀螺的量子理论早就已经有了，这方面的第一篇文章属于 F. Reiche, Z. Physik, **39**, 444(1926).

C. 角 动 量

问题 47 无 穷 小 转 动

试证明，在坐标系的无穷小转动下，标量函数 $f(\boldsymbol{r})$ 的变换可

① 这个问题首先由 H. Welker 着手[Z. Physik **101**,95 (1936)].

简单地用角动量算符表示.

解 坐标转动可表示为

$$\boldsymbol{r}'=R\boldsymbol{r};\quad R=1+A \tag{47.1a}$$

其中 R 是一个 3×3 的矩阵,而

$$A=\begin{pmatrix}0 & \varepsilon_z & -\varepsilon_y\\ -\varepsilon_z & 0 & \varepsilon_x\\ \varepsilon_y & -\varepsilon_x & 0\end{pmatrix}. \tag{47.1b}$$

三个无穷小量 ε_j 是对于三个轴 x, y, z 的转动角. 我们指出,逆变换可以通过改变所有三个 ε_j 的符号得到,也可以由转置矩阵 $\widetilde{A}$ 得到. 因此

$$\widetilde{A}=-A. \tag{47.1c}$$

在变换(47.1a—c)下,函数 $f(\boldsymbol{r})$ 将变为新坐标的函数 $f'(\boldsymbol{r}')$. 利用泰勒展开可以将函数 $f'(\boldsymbol{r}')$ 用原来的坐标 $\boldsymbol{r}$ 来表示:

$$f'(\boldsymbol{r}')=f'(\boldsymbol{r})+(\delta\boldsymbol{r}\cdot\nabla)f'(\boldsymbol{r}) \tag{47.2}$$

其中 $\delta\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}=A\boldsymbol{r}$,高阶微商的项都已略去. 由(47.1b)可得

$$A\boldsymbol{r}=\begin{pmatrix}\varepsilon_z y-\varepsilon_y z\\ -\varepsilon_z x+\varepsilon_x z\\ \varepsilon_y x-\varepsilon_x y\end{pmatrix} \tag{47.3}$$

因此(47.2)化为

$$f'(\boldsymbol{r}')=f'(\boldsymbol{r})+\left\{(\varepsilon_z y-\varepsilon_y z)\frac{\partial}{\partial x}+(-\varepsilon_z x+\varepsilon_x z)\frac{\partial}{\partial y}+(\varepsilon_y x-\varepsilon_x y)\frac{\partial}{\partial z}\right\}f'(\boldsymbol{r}).$$

引入矢量 $\boldsymbol{\varepsilon}=(\varepsilon_x,\ \varepsilon_y,\ \varepsilon_z)$ 及角动量算符

$$L_x=\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\quad \text{等循环表示式,} \tag{47.4}$$

将上式按 ε_j 的次序整理后可得

$$f'(\boldsymbol{r}')=f'(\boldsymbol{r})-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{L})f'(\boldsymbol{r}). \tag{47.5}$$

上式第二项是无穷小的,因此可以忽略 $f'(\boldsymbol{r})$ 和 $f'(\boldsymbol{r}')$ 的差别,而

将(47.5)式改写为

$$f'(\boldsymbol{r})=\left\{1+\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{L})\right\}f'(\boldsymbol{r}'). \tag{47.6}$$

至此，我们还没有用到 f 是标量函数这一性质，亦即它在坐标转动下保持不变的性质：

$$f'(\boldsymbol{r}')=f(\boldsymbol{r}) \tag{47.7}$$

以(47.7)式代入(47.6)式，最后得到用原始坐标表示的变换前后函数的关系

$$f'(\boldsymbol{r})=\left\{1+\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{L})\right\}f(\boldsymbol{r}). \tag{47.8}$$

问题 48　在球极坐标中角动量分量的表示式

利用上面问题中得到的结果，通过对 x, y, z 轴作无穷小转动的办法，试求角动量分量在球极坐标中的表示式.

解　用符号 ψ 代替 f'，(47.5)式可写为

$$\psi(\boldsymbol{r}')=\left\{1-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{L})\right\}\psi(\boldsymbol{r}). \tag{48.1}$$

首先我们将坐标系对 z 轴转动一个角度 $-\varepsilon_z$. 这相应于变换 $r'=r$, $\theta'=\theta$, $\varphi'=\varphi-\varepsilon_z$. 因此由泰勒展开可得

$$\psi(\boldsymbol{r}')=\psi(\boldsymbol{r})+(\varphi'-\varphi)\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}=\left\{1-\varepsilon_z\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}\psi(\boldsymbol{r}).$$

另一方面，按(48.1)式应有

$$\psi(\boldsymbol{r}')=\left\{1-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_z L_z\right\}\psi(\boldsymbol{r}).$$

比较这两个表示式，立即得到，

$$L_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{48.2}$$

现在将坐标系对 x 轴转动 ε_x 角度. 这时仍有 $r'=r$，但是 θ 和 φ 将改变为

$$\theta'=\theta+\delta\theta;\quad \varphi'=\varphi+\delta\varphi.$$

在直角坐标系中，按(47.1a, b)式，这个转动可表示为

$$x'=x;\quad y'=y+\varepsilon_x z;\quad z'=z-\varepsilon_x y.$$

现在

$$z=r\cos\theta;\quad y=r\sin\theta\sin\varphi$$

并且

$$z'=r\cos\theta'=r(\cos\theta-\delta\theta\sin\theta),$$

而另一方面，

$$z'=z-\varepsilon_x y=r(\cos\theta-\varepsilon_x\sin\theta\sin\varphi),$$

比较上面二式可得

$$\delta\theta=\varepsilon_x\sin\varphi. \tag{48.3}$$

利用同样的办法，一方面有

$$y'=r\sin\theta'\sin\varphi'=r(\sin\theta\sin\varphi-\delta\theta\cos\theta\sin\varphi+\delta\varphi\sin\theta\cos\varphi)$$

另一方面有，

$$y'=y+\varepsilon_x z=r(\sin\theta\sin\varphi+\varepsilon_x\cos\theta),$$

由以上二式得到

$$\delta\theta\cos\theta\sin\varphi+\delta\varphi\sin\theta\cos\varphi=\varepsilon_x\cos\theta.$$

将(48.3)式代入上式，则得

$$\delta\varphi=\varepsilon_x\cos\varphi\cot\theta. \tag{48.4}$$

由(48.3)式和(48.4)式，我们得到下面的泰勒展开

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}')&=\psi(\boldsymbol{r})+\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\delta\theta+\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\delta\varphi\\&=\psi(\boldsymbol{r})+\varepsilon_x\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

另外由(48.1)式有

$$\psi(\boldsymbol{r}')=\psi(\boldsymbol{r})-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_x L_x\psi(\boldsymbol{r}),$$

比较以上二式，得出

$$L_x=-\frac{\hbar}{i}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{48.5}$$

最后，我们将坐标系对于 y 轴转动一角度 ε_y，仍然用 $\delta\theta$ 和 $\delta\varphi$ 表示 θ 和 φ 的改变。当然这时的 $\delta\theta$ 和 $\delta\varphi$ 的表示式将与(48.3)式

和(48.4)式不同，而是

$$x'=r\sin\theta'\cos\varphi'=r(\sin\theta\cos\varphi+\delta\theta\cos\theta\cos\varphi-\delta\varphi\sin\theta\sin\varphi)$$
$$=x-\varepsilon_y z=r(\sin\theta\cos\varphi-\varepsilon_y\cos\theta) \tag{48.6a}$$

和

$$z'=r\cos\theta'=r(\cos\theta-\delta\theta\sin\theta)=z+\varepsilon_y x$$
$$=r(\cos\theta+\varepsilon_y\sin\theta\cos\varphi). \tag{48.6b}$$

由(48.6b)式得到

$$\delta\theta=-\varepsilon_y\cos\varphi \tag{48.7}$$

由(48.6a)式得到

$$\delta\varphi=\varepsilon_y\sin\varphi\cot\theta. \tag{48.8}$$

因此

$$\psi(\boldsymbol{r}')=\psi(\boldsymbol{r})+\varepsilon_y\left\{-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}\psi(\boldsymbol{r}),$$

按(48.1)式，上式应当和

$$\psi(\boldsymbol{r}')=\psi(\boldsymbol{r})-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_y L_y\psi(\boldsymbol{r})$$

一致，因此

$$L_y=-\frac{\hbar}{i}\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{48.9}$$

通常将(48.5)式和(48.9)式组合成更简便的表示式

$$L^+=L_x+iL_y=-\frac{\hbar}{i}e^{i\varphi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right); \tag{48.10a}$$

$$L^-=L_x-iL_y=-\frac{\hbar}{i}e^{-i\varphi}\left(i\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{48.10b}$$

(48.2)式以及(48.5)、(48.9)式[或者(48.10a, b)式]就是我们要求的解.

问题 49　角动量算符和拉普拉斯算符

试求算符 L^2 在球极坐标中的表示式，并与拉普拉斯算符以及动能算符相比较.

解　利用(48.10a, b)式所定义的算符 L^+ 和 L^-，可以将 L^2 算符写成

$$L^2=\frac{1}{2}(L^+L^-+L^-L^+)+L_z^2. \tag{49.1}$$

现在

$$L^+L^-=-\hbar^2e^{i\varphi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)e^{-i\varphi}\left(i\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

利用对易关系

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}\,e^{-i\varphi}=e^{-i\varphi}\left(-i+\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

可以消去指数函数，再利用

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\,\cot\theta=-\frac{1}{\sin^2\theta}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta},$$

则得

$$L^+L^-=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot^2\theta\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{49.2}$$

用同样的方法可得算符 L^-L^+ 的表示式，它和(49.2)式的唯一差别是最后一项中的 $+i$ 换成 $-i$. 以 L^+L^-, L^-L^+ 以及 L_z 的表示式(48.2)代入(49.1)式，则得

$$L^2=-\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}+(1+\cot^2\theta)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$

或

$$L^2=-\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}. \tag{49.3}$$

上式花括号中的表示式与拉普拉斯算符的角向部分相同. 因此

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{\hbar^2r^2}\,L^2. \tag{49.4}$$

在经典物理学中已经知道，粒子的动能可以写为

$$\frac{p^2}{2m}=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{L^2}{r^2}\right).$$

而在量子力学中，它应当变为相应的算符 $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$，利用(49.4)式，则得

$$p_r^2=-\hbar^2\nabla^2-\frac{L^2}{r^2}=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}\right), \tag{49.5}$$

这就是拉普拉斯算符的径向部分. 利用分解因子的办法, 由(49.5)式可以得到和经典径向动量相对应的算符是:

$$p_r=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right). \tag{49.6}$$

的确, 重复使用上述算符仍然给出(49.5)式. 可以证明算符 p_r 是厄密的(参见问题 59)并与 r 满足正则对易关系.

问题 50 希耳伯空间的变换

试证明, 在无穷小转动下, 任意量子力学算符 F 变换为

$$F'=UFU^{\dagger} \tag{50.1}$$

其中 U 是幺正算符

$$U=1-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{L}). \tag{50.2}$$

并由此推出 L_i 与 x_k, p_k, L_k 以及 L^2之间的对易关系.

解 由(48.1)式可知, 在无穷小转动下, 任意标量波函数 ψ 或 φ 的变换是 $\psi'=U\psi$, $\varphi'=U\varphi$, 而 U 由(50.2)式定义. 任意可观察量, 即一个算符 F 的任意矩阵元, 应当与坐标系的选择无关, 因此

$$\langle\psi'|F'|\varphi'\rangle=\langle\psi|F|\varphi\rangle. \tag{50.3}$$

将 $\psi'=U\psi$ 和 $\varphi'=U\varphi$ 代入上式左边, 则得

$$\langle\psi'|F'|\varphi'\rangle=\langle U\psi|F'|U\varphi\rangle=\langle\psi|U^{\dagger}F'U|\varphi\rangle, \tag{50.4}$$

与(50.3)式比较, 即得(50.1)式.

将(50.2)式代入(50.1)式, 由于 ε 是无穷小量, 略去 ε^2 项后, 得到

$$F'=F-\boldsymbol{\varepsilon}\cdot[\boldsymbol{L}, F] \tag{50.5}$$

其中用了标准的缩写记号

$$[a, b]=\frac{i}{\hbar}(ab-ba).$$

因此, 如果 F 是直角坐标 x, y, z, 则由(50.5)式可得

$$x'=x-\boldsymbol{\varepsilon}\cdot[\boldsymbol{L}, x];\ y'=y-\boldsymbol{\varepsilon}\cdot[\boldsymbol{L}, y];\ z'=z-\boldsymbol{\varepsilon}\cdot[\boldsymbol{L}, z], \tag{50.6}$$

但由(47.3)式,又有

$$x'=x+\varepsilon_z y-\varepsilon_y z;\quad y'=-\varepsilon_z x+y+\varepsilon_x z;\quad z'=\varepsilon_y x-\varepsilon_x y+z. \tag{50.7}$$

比较(50.6)式和(50.7)式,则得

$$\begin{aligned}&[L_x,\ x]=0;\quad [L_y,\ x]=+z;\quad [L_z,\ x]=-y;\\ &[L_x,\ y]=-z;\quad [L_y,\ y]=0;\quad [L_z,\ y]=+x;\\ &[L_x,\ z]=+y;\quad [L_y,\ z]=-x;\quad [L_z,\ z]=0.\end{aligned} \tag{50.8}$$

对于具有与(50.7)式相同的分量变换的每一个矢量,它与角动量分量的对易关系必定与(50.8)式的形式一样,例如

$$[L_x,\ p_x]=0;\quad [L_y,\ p_x]=p_z;\quad [L_z,\ p_x]=-p_y \text{ 等等.} \tag{50.9}$$

由于角动量本身也是一个矢量,因此分量之间必定存在着与(50.8),(50.9)形式相同的对易关系,即

$$[L_x,\ L_x]=0;\quad [L_y,\ L_x]=L_z;\quad [L_z,\ L_x]=-L_y \text{ 等等.} \tag{50.10}$$

另一方面,任意的标量算符在转动下是不变的,例如 $(L^2)'=L^2$,因此由(50.5)式可知,它和角动量的三个分量都是对易的:

$$[\boldsymbol{L},\ L^2]=0, \tag{50.11}$$

同样的方法可得

$$[\boldsymbol{L},\ r^2]=0;\quad [\boldsymbol{L},\ p^2]=0 \text{ 等等.} \tag{50.12}$$

问题 51　薛定谔表象中的对易子

试在薛定谔表象中直接验证,对于由 N 个粒子组成的一个体系,存在如下的对易关系:

$$[L_x,\ Y]=-Z;\quad [L_x,\ L_y]=-L_z \tag{51.1}$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 是整个体系的角动量,而 X, Y, Z 是体系的质心坐标.

解　按题意,有

$$\boldsymbol{L}=\sum_j \boldsymbol{L}_j;\quad X=\frac{1}{M}\sum_j m_j x_j;\quad j=1,\ 2,\ \cdots,\ N \tag{51.2}$$

其中 m_j 是粒子的质量，M 是体系的总质量．于是

$$[L_x,\ Y]=\frac{1}{M}\sum_j\sum_k m_k[L_{jx},\ y_k];$$

$$[L_x,\ L_y]=\sum_j\sum_k[L_{jx},\ L_{ky}].$$

算符 L_{jx}只作用在第 j 个粒子的坐标上，它和与其余粒子坐标相联系的所有算符对易，因此双重求和就化为单重求和：

$$[L_x,\ Y]=\frac{1}{M}\sum_k m_k[L_{kx},\ y_k]; \tag{51.3}$$

$$[L_x,\ L_y]=\sum_k[L_{kx},\ L_{ky}]. \tag{51.4}$$

按角动量算符的定义，(47.4)式，则有：

$$[L_{kx},\ y_k]\psi=\left(y_k\frac{\partial}{\partial z_k}-z_k\frac{\partial}{\partial y_k}\right)(y_k\psi)$$

$$-y_k\left(y_k\frac{\partial\psi}{\partial z_k}-z_k\frac{\partial\psi}{\partial y_k}\right)=-z_k\psi$$

和

$$[L_{kx},\ L_{ky}]\psi=\frac{\hbar}{i}\left\{\left(y_k\frac{\partial}{\partial z_k}-z_k\frac{\partial}{\partial y_k}\right)\left(z_k\frac{\partial\psi}{\partial x_k}-x_k\frac{\partial\psi}{\partial z_k}\right)\right.$$

$$\left.-\left(z_k\frac{\partial}{\partial x_k}-x_k\frac{\partial}{\partial z_k}\right)\left(y_k\frac{\partial\psi}{\partial z_k}-z_k\frac{\partial\psi}{\partial y_k}\right)\right\}$$

$$=\frac{\hbar}{i}\left(y_k\frac{\partial\psi}{\partial x_k}-x_k\frac{\partial\psi}{\partial y_k}\right)=-L_{kz}\psi.$$

将这些结果代入(51.3)及(51.4)式，最后得到

$$[L_x,\ Y]=-\frac{1}{M}\sum_k m_kz_k=-Z$$

$$[L_x,\ L_y]=-\sum_k L_{kz}=-L_z$$

这就证明了关系式(51.1)．

问题 52　自旋为 1 的粒子

利用无穷小坐标转动的办法，证明一个矢量场 ψ 适合于描述

自旋为 1 的粒子.

解 如果象在问题 47 中那样, 用

$$\boldsymbol{r}' = (1+A)\boldsymbol{r} \tag{52.1}$$

描述转动, 则矢量场的变换和 $\boldsymbol{r}$ 的变换相同, 即

$$\psi'(\boldsymbol{r}') = (1+A)\psi(\boldsymbol{r}). \tag{52.2}$$

另一方面, 由问题 47 的解可知, 对每一个分量 $\psi_i'(\boldsymbol{r}')$ 在 $\boldsymbol{r}$ 处作泰勒展开后, 可得

$$\psi_i'(\boldsymbol{r}') = \left\{1 - \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{L})\right\}\psi_i(\boldsymbol{r}). \tag{52.3}$$

比较上面两种表示式, 就可得到本题要证明的结果.

为此, 我们利用 (47.1b) 式给出的 A, 并将它分解为①

$$A = \varepsilon_x\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix} + \varepsilon_y\begin{pmatrix}0 & 0 & -1\\ 0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix} + \varepsilon_z\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix} \tag{52.4}$$

或写为更适当的形式

$$A = \frac{i}{\hbar}\sum_k \varepsilon_k S_k \tag{52.5}$$

其中

$$S_x = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix};\quad S_y = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0 & i\\ 0 & 0 & 0\\ -i & 0 & 0\end{pmatrix};\quad S_z = \hbar\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}. \tag{52.6}$$

这样一来, (52.2) 式化为

$$\psi'(\boldsymbol{r}') = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\sum_k \varepsilon_k S_k\right)\psi(\boldsymbol{r}). \tag{52.7}$$

比较 (52.3) 式和 (52.7) 式, 消去 $\psi'(\boldsymbol{r}')$, 则得:

$$\left\{1 - \frac{i}{\hbar}\sum_k \varepsilon_k L_k\right\}\psi'(\boldsymbol{r}) = \left\{1 + \frac{i}{\hbar}\sum_k \varepsilon_k S_k\right\}\psi(\boldsymbol{r})$$

① (52.4) 式中的三个 3×3 的矩阵是转动群 SO(3) 在三维表示中的生成元.

或

$$\psi'(\boldsymbol{r})=\left\{1+\frac{i}{\hbar}\sum_k \varepsilon_k J_k\right\}\psi(\boldsymbol{r}) \tag{52.8}$$

其中

$$J_k=L_k+S_k. \tag{52.9}$$

由此可见，三个矩阵 S_k 是自旋的三个分量，$\boldsymbol{J}$ 是总角动量，而 $\boldsymbol{L}$ 是轨道角动量. 通过直接计算不难证明，(52.6) 式中定义的三个 S_k 满足如下的角动量对易关系，

$$[S_j, S_k]=-S_l \quad (j, k, l=x, y, z \text{ 或它们的循环}).$$

(52.6) 式中的每一个矩阵的本征值都是 $+1$, 0, -1, 因为 S_k 和 2×2 的泡利矩阵 σ_y 的差别只在于 S_k 多嵌入了一行和一列的零(除了在 S_y 中相差一个符号外)，这等于在 σ_y 的本征值(是 $+1$ 和 -1)之外再加上一个本征值 0. 因此在任意方向的自旋分量具有本征值 $+\hbar$, 0, $-\hbar$. 由(52.6)式，三个分量的平方和是

$$S^2=S_x^2+S_y^2+S_z^2=\hbar^2\left\{\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}\right\}$$

或 $S^2=2\hbar^2$. 按照一般公式 $S^2=\hbar^2 s(s+1)$，这表明矢量场的自旋 $s=1$.

问题 53　角动量算符与张量算符的对易关系

利用无穷小坐标转动的办法确定角动量分量与对称张量之间的对易关系.

解　在问题 50 中已经证明，在无限小转动下，每个量子力学算符按下式变换：

$$F'=F-\boldsymbol{\varepsilon}\cdot[\boldsymbol{L}, F]. \tag{53.1}$$

坐标转动是由 $\boldsymbol{r}'=R\boldsymbol{r}$ 规定的，一个张量是由其分量的变换性质所定义的：

$$T'_{ik}=\sum_{\mu}\sum_{\nu}R_{i\mu}R_{k\nu}T_{\mu\nu}=(RT\widetilde{R})_{ik}, \tag{53.2}$$

在无穷小转动下 $R=\boldsymbol{I}+A$, $\widetilde{A}=-A$, 因此我们有

$$T'=(\boldsymbol{I}+A)T(\boldsymbol{I}-A)=T+(AT-TA). \tag{53.3}$$

与(53.1)式比较, 可得

$$\boldsymbol{\varepsilon}\cdot[\boldsymbol{L},\ T]=TA-AT \tag{53.4}$$

这是解决本问题的基本公式.

我们限于计算对于 x 轴的转动,

$$A=\varepsilon_x\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix}.$$

于是,

$$TA=\varepsilon_x\begin{pmatrix}0 & -T_{13} & T_{12}\\ 0 & -T_{23} & T_{22}\\ 0 & -T_{33} & T_{32}\end{pmatrix};\quad AT=\varepsilon_x\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ T_{31} & T_{32} & T_{33}\\ -T_{21} & -T_{22} & -T_{23}\end{pmatrix},$$

因此, 对于一个对称张量, 差

$$TA-AT=\varepsilon_x\begin{pmatrix}0; & -T_{13}; & T_{12}\\ -T_{13}; & -2T_{23}; & T_{22}-T_{33}\\ T_{12}; & T_{22}-T_{33}; & 2T_{23}\end{pmatrix} \tag{53.5}$$

仍然是对称的, 按(53.4)式, 它必须等于 $\varepsilon_x[L_1,\ T]$, 所以

$$\begin{aligned}&[L_1,\ T_{11}]=0; \quad [L_1,\ T_{12}]=-T_{13}; \quad [L_1,T_{13}]=T_{12};\\ &[L_1,T_{22}]=-2T_{23};[L_1,T_{23}]=T_{22}-T_{33};[L_1,T_{33}]=2T_{23}.\end{aligned} \tag{53.6}$$

同样的办法, 可以通过对 y 轴和 z 轴的转动得到 L_2 和 L_3 与 T 的对易关系, 但是更方便的办法是将(53.6)式中的指标进行循环排列, 即

$$\begin{aligned}&[L_2,\ T_{22}]=0; \quad [L_2,\ T_{23}]=-T_{12}; \quad [L_2,\ T_{12}]=T_{23};\\ &[L_2T_{33}]=-2T_{13};[L_2,\ T_{13}]=T_{33}-T_{11};\ [L_2,\ T_{11}]=2T_{13}\end{aligned} \tag{53.7}$$

和

$$[L_3, T_{33}]=0; \quad [L_3, T_{13}]=-T_{23}; \quad [L_3, T_{23}]-T_{13};$$
$$[L_3, T_{11}]=-2T_{12}; [L_3, T_{12}]=T_{11}-T_{22}; [L_3, T_{22}]-2T_{12}. \tag{53.8}$$

必须指出，所有三个 L_k 都和张量的迹对易：

$$[\boldsymbol{L}, \mathrm{tr}T]=0. \tag{53.9}$$

这一点可以这样来理解：一个对称张量可以作如下分解

$$T=\Theta+\frac{1}{3}(\mathrm{tr}T)\boldsymbol{1}$$

其中 $\mathrm{tr}\Theta=0$（即 Θ 是无迹张量）. 因此 $\mathrm{tr}T$ 是一个标量（张量不变量），而在问题 50 的末尾，我们已经证明标量总是和 L_k 对易的.

问题 54　四极张量·球谐函数

由下式定义的四极张量 Q 是一个迹为 0 的对称张量，

$$Q_{ik}=Q_{ki}=3x_ix_k-r^2\delta_{ik} \tag{54.1}$$

因此它有五个线性独立的分量. 它们可以表示为（除因子 r^2 外）五个二阶球谐函数的线性组合. 利用问题 53 中得到的对易子，试确定角动量算符和球谐函数的对易子.

解　球谐函数 $Y_{2m}(m=0, \pm1, \pm2)$ 可以用直角坐标表示如下[①]：

$$r^2Y_{2,0}=C(3z^2-r^2); \quad r^2Y_{2,\pm1}=\pm C\sqrt{6}\,(x\pm iy)z;$$
$$r^2Y_{2,\pm2}=C\frac{1}{2}\sqrt{6}\,(x\pm iy)^2; C=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}; \oint|Y_{2,m}|^2d\Omega=1. \tag{54 2}$$

利用这些熟知的定义，可以用四极张量的分量将球谐函数表示如下：

$$r^2Y_{2,0}=CQ_{33}; \quad r^2Y_{2,\pm1}=\pm C\sqrt{\frac{2}{3}}(Q_{13}\pm iQ_{23});$$
$$r^2Y_{2,\pm2}=C\sqrt{\frac{2}{3}}\left\{\frac{1}{2}(Q_{11}-Q_{22})\pm iQ_{12}\right\}. \tag{54.3}$$

① 前面的符号可以任意选择，但是取 $Y_{2,1}$ 和 $Y_{2,-1}$ 的符号相反，可以使最后的结果简化.

为了求得对易子，我们可以引用(53.6)—(53.8)式.

先利用(53.8)式，由于球谐函数以 z 为极轴，角动量对于这个轴的分量是 L_z.

$$r^2[L_z,\ Y_{2,0}]=C[L_3,\ Q_{33}]=0;$$

$$r^2[L_z,\ Y_{2,\pm1}]=C\sqrt{\frac{2}{3}}\{[L_3,\ Q_{13}]\pm i[L_3,\ Q_{33}]\}$$

$$=C\sqrt{\frac{2}{3}}(-Q_{23}\pm iQ_{13})=\pm ir^2Y_{2,\pm1};$$

$$r^2[L_z,\ Y_{2,\pm2}]=C\sqrt{\frac{2}{3}}\left\{\frac{1}{2}[L_3,Q_{11}]-\frac{1}{2}[L_3,\ Q_{22}]\pm i[L_3,Q_{12}]\right\}$$

$$=C\sqrt{\frac{2}{3}}\{-Q_{12}-Q_{12}\pm i(Q_{11}-Q_{22})\}=\pm 2ir^2Y_{2,\pm2}.$$

这三个对易子可以概括为一个公式

$$[L_z,\ Y_{2,m}]=imY_{2,m}. \tag{54.4}$$

这一结果在薛定谔表象中是显而易见的，因为 $L_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ 和 $Y_{2,m}\propto e^{im\varphi}$，因此

$$[L_z,\ e^{im\varphi}]=\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{im\varphi}-e^{im\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}=ime^{im\varphi}.$$

现在利用(53.6)式和(53.7)式来确定算符

$$L^+=L_x+iL_y \text{ 和 } L^-=L_x-iL_y$$

与张量分量之间的对易子，这时我们有

$$\left.\begin{aligned}
&[L^+,\ Q_{11}]=2iQ_{13}, && [L^-,Q_{11}]=-2iQ_{13},\\
&[L^+,\ Q_{12}]=-Q_{13}+iQ_{23}, && [L^-,Q_{12}]=-Q_{13}-iQ_{23},\\
&[L^+,\ Q_{13}]=Q_{12}+i(Q_{33}-Q_{11}), && [L^-,Q_{13}]=Q_{12}-i(Q_{33}-Q_{11}),\\
&[L^+,Q_{22}]=-2Q_{23}, && [L^-,\ Q_{22}]=-2Q_{23},\\
&[L^+,\ Q_{23}]=(Q_{22}-Q_{33})-iQ_{12}, && [L^-,Q_{23}]=(Q_{22}-Q_{33})+iQ_{12},\\
&[L^+,Q_{33}]=2(Q_{23}-iQ_{13}), && [L^-,\ Q_{33}]=2(Q_{23}+iQ_{13}).
\end{aligned}\right\} \tag{54.5}$$

直接应用(54.3)和(54.5)式，然后再应用(54.3)，就可以求得 $L^\pm$

和球谐函数之间的对易子，下面我们举几个典型的例子加以详细说明.

$$r^2[L^+, Y_{2,1}] = C\sqrt{\frac{2}{3}}\{[L^+, Q_{13}] + i[L^+, Q_{23}]\}$$

$$= C\sqrt{\frac{2}{3}}\{Q_{12} + i(Q_{33} - Q_{11}) + i(Q_{32} - Q_{33}) + Q_{12}\}$$

$$= -2iC\sqrt{\frac{2}{3}}\left\{\frac{1}{2}(Q_{11} - Q_{22}) + iQ_{12}\right\} = -2ir^2Y_{2,2}.$$

另一个典型的例子是

$$r^2[L^-, Y_{2,1}] = C\sqrt{\frac{2}{3}}\{[L^-, Q_{13}] + i[L^-, Q_{23}]\}$$

$$= C\sqrt{\frac{2}{3}}\{Q_{12} - i(Q_{33} - Q_{11}) + i(Q_{22} - Q_{33}) - Q_{12}\}$$

$$= C\sqrt{\frac{2}{3}}\, i(Q_{11} + Q_{22} - 2Q_{33}).$$

由于

$$\mathrm{tr}\, Q = Q_{11} + Q_{22} + Q_{33} = 0,$$

前式括号中的量化为 $-3Q_{33}$，于是得到

$$r^2[L^-, Y_{2,1}] = -3i\sqrt{\frac{2}{3}}r^2Y_{2,0} = -i\sqrt{6}\, r^2Y_{2,0}.$$

最后，在m取最大值时，下述对易子为零：

$$r^2[L^+, Y_{2,2}] = C\sqrt{\frac{2}{3}}\left\{\frac{1}{2}[L^+, Q_{11}] - \frac{1}{2}[L^+, Q_{22}] + i[L^+, Q_{12}]\right\}$$

$$= C\sqrt{\frac{2}{3}}\{iQ_{13} + Q_{23} - iQ_{13} - Q_{23}\} = 0,$$

所有这些结果可以概括为二个简单的公式：

$$[L^+, Y_{2,m}] = -i\sqrt{6 - m(m+1)}\, Y_{2,m+1} \qquad (54.6)$$

$$[L^-, Y_{2,m}] = -i\sqrt{6 - (m-1)m}\, Y_{2,m-1}. \qquad (54.7)$$

(54.4)、(54.6)和(54.7)式就是我们所要求的对易子的完全集合.

问题 55　球谐函数的变换

设坐标轴作一有限转动，它由三个欧勒角 α, β, γ 所确定. 试求在此有限转动下，波函数为球谐函数时的变换性质.

解　我们先按一般公认的方法定义欧勒角. 首先将初始坐标系 x, y, z 对 z 轴转动 α 角，而 $0\leqslant\alpha<2\pi$. 这样得到的坐标系 x_1, y_1, z_1 再对 y_1 轴转动 β 角 $(0\leqslant\beta<\pi)$. 这样又得到另一个中间(过渡的) 坐标系 x_2, y_2, z_2, 然后将这坐标系再对新的 z_2 轴转动 γ 角 $(0\leqslant\gamma<2\pi)$，最后过渡到坐标系 x', y', z'.

由(48.1)式，利用叠乘的办法，不难看出，在对轴 A 作有限角度 ε_A 的转动下，任意函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 满足如下的变换规则

$$\psi(\boldsymbol{r}')=D(\varepsilon_A)\psi(\boldsymbol{r})\quad\text{其中}\quad D(\varepsilon_A)=e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_A L_A}. \tag{55.1}$$

当依次完成三个欧勒转动时，三个如上的变换一个接着一个. 因此波函数的变换规则是

$$\psi(\boldsymbol{r}')=D(\alpha,\ \beta,\ \gamma)\psi(\boldsymbol{r}) \tag{55.2}$$

其中

$$D(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma L_{z_2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_{y_1}}e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}. \tag{55.3}$$

下面我们将把(55.3)中的绕三个不同坐标系的 z, y_1, z_2 轴的三个转动，表示为绕初始坐标轴的转动. 为了分解绕 y_1 轴转过 β 角的转动，我们利用图 32a，这时 z 和 z_1 是重合的，并且垂直于纸面，y 和 y_1 的夹角为 α. 我们可以用如下的办法来代替对 y_1 轴转动 β 角，即先将 x_1, y_1, z_1 绕 z 轴倒转 $-\alpha$，然后再对 y (代替 y_1 轴)转动 β，最后再将坐标系绕 z 轴转动 α 角而回复到原来的位置，即

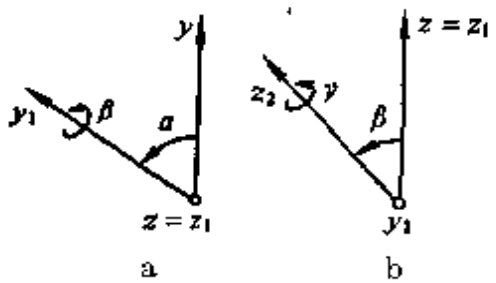


图 32a 和 b　坐标系的转动

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_{y_1}}=e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_y}\cdot e^{+\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}. \tag{55.4}$$

用类似的办法可将绕 z_2 轴转过 γ 角的转动(图 32b)分解如下：先绕 y_1 轴倒转 $-\beta$，然后绕 z 轴转动 γ 角，最后绕 y_1 转动 β 角，使 z_2 轴仍回复到原来的位置：

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma L_{z_2}}=e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_{y_1}}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma L_z}\cdot e^{+\frac{i}{\hbar}\beta L_{y_1}}. \tag{55.5}$$

将(55.4)和(55.5)式代入(55.3)式，则得

$$\begin{aligned}D(\alpha,\ \beta,\ \gamma)&=e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_{y_1}}e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma L_z}e^{\frac{i}{\hbar}\beta L_{y_1}}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_{y_1}}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}\\&=e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_y}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(\gamma+\alpha)L_z}\end{aligned}$$

$$D(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_y}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma L_z}. \tag{55.6}$$

这是一个很普通的纯几何的公式，现在我们将它应用于球谐函数. 函数 $Y_{L,M}$ 以 z 轴为极轴时是算符 L_z 的本征函数，其本征值为 $\hbar M$. 由问题 56 不难看出，算符 L_y 只能改变 M 而不会改变 L 的值. 因此，按照(55.2)式，在新坐标系 θ', φ' 中有

$$Y_{L,M}(\theta',\ \varphi')=D(\alpha,\ \beta,\ \gamma)Y_{L,M}(\theta,\ \varphi)=\sum_{M'=-L}^{+L}D^{L}_{M,M'}Y_{L,M'}(\theta,\ \varphi). \tag{55.7}$$

现在我们来计算系数

$$\begin{aligned}D^{L}_{M,M''}&=\oint d\Omega\, Y^{*}_{L,M''}(\theta,\ \varphi)Y_{L,M}(\theta',\ \varphi')\\&=\oint d\Omega\, Y^{*}_{LM''}\ (\theta,\ \varphi)D(\alpha,\ \beta,\ \gamma)Y_{L,M}(\theta,\ \varphi)\end{aligned}$$

或简写为

$$D^{L}_{M,M''}=\langle LM''|\,D(\alpha,\ \beta,\ \gamma)\,|LM\rangle \tag{55.8}$$

其中 $D(\alpha,\ \beta,\ \gamma)$ 是算符(55.6). 由于①

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma L_z}\,|LM\rangle=e^{-i\gamma M}|LM\rangle,$$

① 在左矢等式中的符号可能会引起怀疑. 由于 $Y^{*}_{LM''}\propto e^{-iM''\varphi}$ 以及 $L_zY^{*}_{L,M''}=-\hbar M''Y^{*}_{L,M''}$，我们有

$$\langle LM'|e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}=\langle e^{\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}Y_{LM''}|=\langle e^{i\alpha M''}Y_{LM''}|=e^{-i\alpha M''}\langle LM''|.$$

$$\langle LM''|e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}=e^{-i\alpha M''}\langle LM''|,$$

因此

$$D^L_{M,M''}=e^{-i(\alpha M''+\gamma M)}d^L_{M,M''}(\beta) \tag{55.9}$$

其中

$$d^L_{M,M''}(\beta)=\langle LM''|e^{-\frac{i}{\hbar}\beta L_y}|LM\rangle$$

是一个与自变量 β 有关的比较复杂的函数. 因此球谐函数按下述规律变换

$$Y_{L,M}(\theta',\ \varphi')=\sum_{M'=-L}^{+L}e^{-i(\alpha M'+\gamma M)}d^L_{M,M'}(\beta)Y_{L,M'}(\theta,\ \varphi). \tag{55.10}$$

问题 56　角动量分量的希耳伯空间的构成

设一个原子体系处于角动量量子数为 l 的状态，试构成分量算符 L_z 的希耳伯本征矢. 方法参见问题 31.

解　我们选择一个希耳伯坐标系，在这个坐标系中 L^2 是对角的，即(略去所有的因子 $\hbar$)对于所有要讨论的矢量均有

$$L^2=\frac{1}{2}(L^+L^-+L^-L^+)+L_z^2=l(l+1) \tag{56.1}$$

进一步假设 $|\psi_m\rangle$ 是 L_z 的具有(仍未确定的)本征值 m 的本征矢. 由于

$$L^+=L_x+iL_y \tag{56.2}$$

满足如下的刘易关系(参见问题 51)

$$L^+L_z-L_zL^+=-L^+. \tag{56.3}$$

由

$$L_z|\psi_m\rangle=m|\psi_m\rangle \tag{56.4}$$

以及(56.3)，可得

$$L^+L_z|\psi_m\rangle=(L_z-1)\,|L^+\psi_m\rangle=m|L^+\psi_m\rangle$$

或

$$L_z|L^+\psi_m\rangle=(m+1)\,|L^+\psi_m\rangle. \tag{56.5}$$

因此 $|L^+\psi_m\rangle$ 是本征值为 $m+1$ 的本征矢. 不过这个本征矢还没有归一化，标积

$$\langle L^+\psi_m|L^+\psi_m\rangle=\langle L^-L^+\psi_m|\psi_m\rangle \quad (\text{利用 } L^-=L^{+\dagger})$$

并不等于 1, 但由 (56.1) 和对易关系

$$L^+L^- - L^-L^+ = 2L_z \tag{56.6}$$

可得

$$L^-L^+ = L^2 - L_z^2 - L_z, \tag{56.7}$$

因此

$$\langle L^-L^+\psi_m | \psi_m\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]\langle\psi_m|\psi_m\rangle.$$

于是本征值为 $m+1$ 的归一化希耳伯矢量是

$$|\psi_{m+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}}|L^+\psi_m\rangle \tag{56.8}$$

这种构成法可以重复进行, 直至 $m=l$为止, 由于再进行一次就得出$L^+|\psi_l\rangle=0$, 因此这序列中断, 因而不存在$|\psi_{l+1}\rangle$.

除上述的上升序列外, 还可以重复应用厄密共轭算符

$$L^- = L_x - iL_y \tag{56.9}$$

来构成一个m的下降序列. 由于 L^- 满足

$$L^-L_z - L_zL^- = L^-. \tag{56.10}$$

将 L^- 作用于(56.4)式两边, 则得

$$L_z|L^-\psi_m\rangle = (m-1)|L^-\psi_m\rangle. \tag{56.11}$$

这时仍有归一化的问题, 由于

$$\begin{aligned}\langle L^-\psi_m | L^-\psi_m\rangle &= \langle L^+L^-\psi_m|\psi_m\rangle \\ &= \langle (L^2 - L_z^2 + L_z)\psi_m|\psi_m\rangle \\ &= [l(l+1) - m(m-1)]\langle\psi_m|\psi_m\rangle.\end{aligned}$$

因此归一化的希耳伯矢量是

$$|\psi_{m-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}}|L^-\psi_m\rangle. \tag{56.12}$$

重复应用 L^-, 就得到一个m的下降系列, 甚至m可以变为负的, 直到 $m=-l$ 为止. 这时再应用 L^-, 则得

$$L^-|\psi_{-l}\rangle = 0,$$

因此不存在矢量$|\psi_{-l-1}\rangle$.

注 1　从薛定谔理论我们知道, 除一个任意的相因子之外,

$$|\psi_m\rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{56.13}$$

是希耳伯矢量的一个归一化体现. 因此，除了这个相因子外(在常用的归一化中，相因子是$(-1)^m$)，(56.8)式和(56.12)式和球谐函数的递推公式：

$$\left.\begin{aligned} L^+Y_{l,m} &= -\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,Y_{l,m+1}, \\ L^-Y_{l,m} &= -\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,Y_{l,m-1}. \end{aligned}\right\} \quad (56.14)$$

相同.

注2 在上面的解中，已经隐含了 l 是整数这一假设，由于每用一次 L^+ 或 L^-，将使 m 改变 ± 1，从它的最大值 $m=+l$ 下降到它的最小值 $m=-l$，这两个极限值之差(即 $2l$)应为一整数. l 和 m 是半整数，与 l 和 m 是整数，同样满足这个要求. 因此角动量的对易规则容许半整数的量子化. 在由粒子运动导出的角动量中，还未出现这种情况，但是这并不排除理论上的可能性. 在第二卷中，我们将会看到，一旦计入粒子的自旋，则除"轨道"角动量之外，还会出现半整数值的角动量.

问题57 球谐函数的正交性

试证明由上问题导出的 L_z 的本征矢对给定 l 构成一个正交系统，并确定算符 L^+ 和 L^- 在这个希耳伯坐标系中的矩阵元.

解 由前题已知矢量 $|\psi_m\rangle$ 满足下列本征值关系

$$L^-L^+|\psi_m\rangle=[l(l+1)-m(m+1)]|\psi_m\rangle; \quad (57.1a)$$

$$L^+L^-|\psi_m\rangle=[l(l+1)-m(m-1)]|\psi_m\rangle. \quad (57.1b)$$

现在来构成如下两个相等的标积，即

$$\langle L^+\psi_{m'}|L^+\psi_m\rangle=\langle\psi_{m'}|L^-L^+\psi_m\rangle \quad (57.2a)$$

和

$$\langle L^+\psi_{m'}|L^+\psi_m\rangle=\langle L^-L^+\psi_{m'}|\psi_m\rangle. \quad (57.2b)$$

以(57.1a)代入上二式的右边，则分别得到两个表示式

$$[l(l+1)-m(m+1)]\langle\psi_{m'}|\psi_m\rangle$$

和

$$[l(l+1)-m'(m'+1)]\langle\psi_{m'}|\psi_m\rangle,$$

它们的差应为零：

$$[m(m+1)-m'(m'+1)]\langle\psi_{m'}|\psi_m\rangle=0. \quad (57.3)$$

因此上式中的第二个因子只有在第一个因子为零时才可能不为

零，即除 $m'=m$ 或 $m'=-m-1$ 两种情况外，证明了正交性．为了排除后一种可能性，将(57.1b)式用于相似的计算：

$$\begin{aligned}\langle L^-\psi_{m'}|L^-\psi_m\rangle &= \langle\psi_{m'}|L^+L^-\psi_m\rangle\\ &= [l(l+1)-m(m-1)]\langle\psi_{m'}|\psi_m\rangle\\ &= \langle L^+L^-\psi_{m'}|\psi_m\rangle\\ &= [l(l+1)-m'(m'-1)]\langle\psi_{m'}|\psi_m\rangle.\end{aligned}$$

仍取它们的差

$$[m(m-1)-m'(m'-1)]\langle\psi_{m'}|\psi_m\rangle=0, \qquad (57.4)$$

这时对 $m'=m$ 或 $m'=-m+1$ 第一个因子为零，但对 $m'=-m-1$ 第一个因子并不为零．同时考虑(57.3)和(57.4)式，则得到所要求的正交性

$$\langle\psi_{m'}|\psi_m\rangle=\delta_{mm'} \qquad (57.5)$$

其中态矢量按前题的方法归一化．

现在由(56.8)和(56.12)式容易求得 L^+，L^- 的矩阵元，采用(56.14)式中任意的符号习惯，则有：

$$\left.\begin{aligned}\langle\psi_{m+1}|L^+|\psi_m\rangle &= -\sqrt{l(l+1)-m(m+1)},\\ \langle\psi_{m-1}|L^-|\psi_m\rangle &= -\sqrt{l(l+1)-m(m-1)},\end{aligned}\right\} \qquad (57.6)$$

由于(57.5)式，其余的矩阵元均为零．

D. 球 对 称 势

a) 束 缚 态

为了便于求解有心力场（即只与 r 有关的势）的薛定谔方程，引入球极坐标(图 33)：

$$x=r\sin\theta\cos\varphi;\quad y=r\sin\theta\sin\varphi;\quad z=r\cos\theta. \qquad (a.1)$$

z 轴称为极轴，θ 是 $\boldsymbol{r}$ 与极轴之间的夹角 $(0\leqslant\theta\leqslant\pi)$，$\varphi$ 是 $\boldsymbol{r}$ 在 xy 平面上的投影与 x 轴之间的夹角$(0\leqslant\varphi\leqslant2\pi)$，它量度绕极轴的转动．在球极坐标中，拉普拉斯算符变为

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\mathscr{A} \tag{a.2}$$

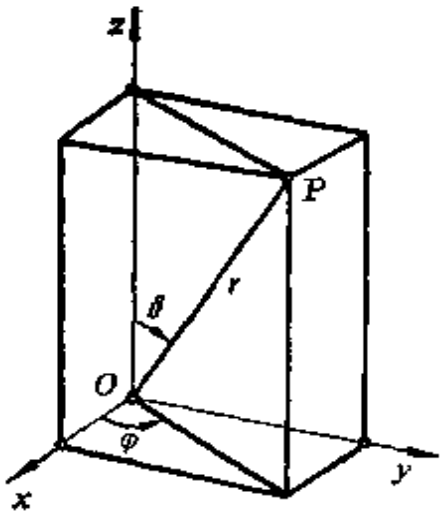


图 33　球极坐标

其中 $\mathscr{A}$ 是角向算符

$$\mathscr{A}=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{a.3}$$

这样一来，薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\mathscr{A}\right)\psi+V(r)\psi=E\psi \tag{a.4}$$

就可以分离变量：

$$\psi(r,\ \theta,\ \varphi)=\frac{1}{r}\chi_l(r)Y_{l,m}(\theta,\ \varphi) \tag{a.5}$$

其中径向波函数 $\chi_l(r)$ 满足下面的径向波动方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\chi_l}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\chi_l\right)+V(r)\chi_l=EX_l \tag{a.6}$$

而 $Y_{l,m}$ 满足球谐函数的微分方程

$$\mathscr{A}Y_{l,m}+l(l+1)Y_{l,m}=0. \tag{a.7}$$

在此，$l(l+1)$ 是作为径向和角向分离参数引入的，下面将证明，只有当 l 取整数值时（即 $l=0,\ 1,\ 2,\cdots,$）才能给出非奇异解．对每一个整数 l，还存在着 $2l+1$ 个(对应于 $m=-l,\ -l+1,\cdots l-1,\ l$) 非奇异的和唯一的解．

在下面的问题中，我们总是取球谐函数满足归一化条件

$$\oint|Y_{l,m}|^2d\Omega=1. \tag{a.8}$$

对 $m=0$，解为

$$Y_{l,0}(\vartheta)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta). \tag{a.9}$$

它只与 θ 相关，并称为带球谐函数．函数 P_l 的归一化使 $P_l(1)=1$，

P_l 是 $\cos\theta$ 的 l 阶多项式，称为勒让德多项式.

在球极坐标中，粒子的角动量分量算符可表示如下.

$$L^+ = L_x + iL_y = -\frac{\hbar}{i} e^{i\varphi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right);$$

$$L^- = L_x - iL_y = -\frac{\hbar}{i} e^{-i\varphi}\left(i\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right); \qquad \text{(a.10)}$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

角动量矢量绝对值平方的算符是

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = \frac{1}{2}(L^+L^- + L^-L^+) + L_z^2, \qquad \text{(a.11)}$$

显然可以写为

$$L^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} \qquad \text{(a.12)}$$

或，利用缩写(a.3)，可得

$$L^2 = -\hbar^2\mathscr{A}. \qquad \text{(a.13)}$$

由(a.7)式可见，$Y_{l,m}$ 是角动量平方算符 L^2 的本征函数，相应的本征值为 $\hbar^2 l(l+1)$. 由于 $Y_{l,m}$ 与 φ 的关系只出现在函数 $e^{im\varphi}$ 中，由(a.10)式可见，$Y_{l,m}$ 也是算符 L_z 的本征函数，相应的本征值为 $\hbar m$，其中 $|m| \leqslant l$. 在中心对称势场中波函数的这两个性质反映了经典的角动量守恒定律在量子力学中仍然成立.

当然，可以由(a.1)式利用坐标变换的办法导出(a.2)式和(a.10)式，这是一种直接的但较繁的方法. 比较简便的方法是利用角动量算符和坐标的无限小转动之间的关系，这在问题 47 到 49 中已经证明.

有关球谐函数的详细数学讨论，见本书的数学附录(在第二卷末).

问题 58 角动量的期待值

试讨论在以下两种情况中的角动量分量 L_x、L_y、L_z.

a) 一个粒子在辏力场中运动的波函数有和 $Y_{l,m}$ 相同的角度

依赖关系.

b) 对一给定的 l,波函数 $Y_{l,m}$ 和 $Y_{l,-m}$ 与 θ 的依赖关系相同. 由这两个简并解可以构成一个正比于 $\sin m\varphi$ 和 $\cos m\varphi$ 的线性组合,它们仍然是辏力场薛定谔方程的解.

解 a) 球谐函数 $Y_{l,m}$ 是 L^2 和 L_z 的本征函数, 相应的本征值是 $\hbar^2 l(l+1)$ 和 $\hbar m$. 因此在这个态中 L_z 具有确定值. 由于角动量分量的不可对易性 (见问题 50 和 51), 分量 L_x 和 L_y 在这个态中必然是不确定的. 这可用经典的图象解释如下. 对每一个单独的运动, $\boldsymbol{L}$ 的所有三个分量都具有确定值,即

$$L_x = L\sin\theta\cos\varphi; \quad L_y = L\sin\theta\sin\varphi; \quad L_z = L\cos\theta.$$

但是我们可用的是不完整的信息, 它可以精确地确定 L_z, 但完全不能确定"相"角 φ. 因此在任何单独的情况下, 我们只能确定 L_z 的相位平均值

$$\overline{L}_x = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi\, L_x \quad \text{等等}$$

由于 L_z 与 φ 无关, 因此它有确定值; 而 L_x 和 L_y 的相位平均值等于零. 事实上,经典力学和量子力学的差别在于,在经典力学中我们可能获得完整的信息,因而可以避免使用相位平均,而在量子力学中算符的不可对易性必然使信息不完整, 平均值是我们能够得到的最好结果.

在一定态中,代替相位平均值,量子力学允许计算期待值或态平均值

$$\langle L_x\rangle = \oint d\Omega\, Y^*_{l,m} L_x Y_{l,m} \quad \text{等等}$$

期待值描述对许多处于相同状态的系统进行大量独立测量所获得的平均结果. 如果所有这些测量给出相同的结果(对于 L_z 的情况正是如此),则这个测量值是确定的并且期待值变成一个本征值; 如果这些测量给出不同的结果, 则量子力学只能导出它们的平

均值.

为了计算分量的平均值，最好是利用它们的组合 L^+ 和 L^-. 将算符(a.10)作用于 $Y_{l,m}$ 给出[见附录和(56.14)式]

$$\left.\begin{aligned} L^+Y_{l,m} &= -\hbar\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\,Y_{l,m+1}, \\ L^-Y_{l,m} &= -\hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,Y_{l,m-1}. \end{aligned}\right\} \quad (58.1)$$

因此在 $\langle L^+\rangle$ 和 $\langle L^-\rangle$ 中只出现如下类型的积分

$$\oint d\Omega\, Y^*_{l,m}Y_{l,m\pm1},$$

由于正交性，上面的积分等于零. 因此，正如经典图象中的相位平均值为零那样，L_x 和 L_y 的期待值为零.

b) 所考虑的两个实的波函数是

$$u_+ = \frac{1}{2}(Y_{l,m}+Y_{l,-m}) \propto \cos m\varphi, \quad (58.2)$$

和

$$u_- = \frac{1}{2i}(Y_{l,m}-Y_{l,-m}) \propto \sin m\varphi.$$

两者都是 L^2 的本征函数，但不是 $\boldsymbol{L}$ 的任何分量的本征函数，因为

$$\left.\begin{aligned} L^\pm u_+ &= -\frac{\hbar}{2}\{\sqrt{(l\pm m+1)(l\mp m)}\,Y_{l,m\pm1} \\ &\quad +\sqrt{(l\mp m+1)(l\pm m)}\,Y_{l,-m\pm1}\}, \\ L^\pm u_- &= i\frac{\hbar}{2}\{\sqrt{(l\pm m+1)(l\mp m)}\,Y_{l,m\pm1} \\ &\quad -\sqrt{(l\mp m+1)(l\pm m)}\,Y_{l,-m\pm1}\}, \end{aligned}\right\} \quad (58.3)$$

$$L_z u_+ = \hbar m i u_-; \quad L_z u_- = -\hbar m i u_+. \quad (58.4)$$

因此，对于 $\boldsymbol{L}$ 的三个分量只能给出期待值. 对于 L_x 和 L_y(或 L^+ 和 L^-)，基本上是重复 a)的步骤，并且由于正交性，期待值等于零. 对于 L_z，按(58.4)式，期待值也是零. 因为

$$\langle L_z\rangle = \oint d\Omega\, u_+^* L_z u_+ = \pm\hbar m i \oint d\Omega\, u_1 u_\mp = 0$$

最后一步利用了 u_+ 和 u_- 的正交性. 这一正交性很容易由对 φ 的积分看出

$$\oint d\Omega\, u_+ u_- \propto \int_0^{2\pi} d\varphi \cos m\varphi \sin m\varphi = 0.$$

然而, 在 $\langle L_x\rangle$、$\langle L_y\rangle$ 等于零和$\langle L_z\rangle$等于零之间存在显著的差别. 在经典图象中, u_+ 和 u_- 仍然相应于所有相角 φ 都可能的状态[正如前面的情况 a)那样], 但是, 现在 θ 不象在情况 a)中那样被限制于只取一个确定值, 而是被限制于取两个可能值 $\theta_1=\theta$ 和 $\theta_2=\pi-\theta$, 这导致 $L_z=\pm L\cos\theta$, 以及

$$\overline{L}_z = L\cos\theta - L\cos\theta = 0.$$

在量子力学中, L_z 的期待值来自 $+\hbar m$ 和 $-\hbar m$ 两个态的等量的混合. 由(58.3)式和(58.4)式可见: 将 L_x 和 L_y 作用在 u_+ 和 u_- 上得到的是完全不同的函数; 而 L_z 的作用仅仅是使 u_+ 和 u_- 互换, 因此利用 u_+ 和 u_- 的线性组合, 我们仍可构成 L_z 的本征函数, 即

$$u_1 = u_+ + iu_- \quad \text{而} \quad L_z u_1 = \hbar m u_1$$

和

$$u_2 = u_+ - iu_- \quad \text{而} \quad L_z u_2 = -\hbar m u_2.$$

注 在量子化学中要用到(58.2)型的实线性组合, 在那里, 考虑分子中对于相邻原子的一个有利方向, 往往比角动量更为重要.

问题 59 径向动量算符的构成

试构成一个与径向坐标 r 相对应的正则共轭算符. 它在薛定谔理论中的表示式如何?

解 在经典力学中, 半径 r 的共轭动量 p_r 定义为矢量 $\boldsymbol{p}$ 在 $\boldsymbol{r}$ 方向上的投影:

$$p_r=\frac{1}{r}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}). \tag{59.1}$$

在量子力学中，由于 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 的分量不可对易，这个定义就变得含糊不清了．并且任意的线性组合

$$p_r=\lambda\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}+(1-\lambda)\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p} \tag{59.2}$$

都对应于经典表示式(59.1)．

现在，p_r 必须是一厄密算符，即 $p_r=p_r^{\dagger}$，这给出 $\lambda=1-\lambda$ 或 $\lambda=\frac{1}{2}$，

$$p_r=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right). \tag{59.3}$$

为了证明这个对称表示式的确是 r 的正则共轭算符，我们必须验证一下对易关系

$$p_r r-rp_r=\frac{\hbar}{i} \tag{59.4}$$

是否成立，如果它对于直角坐标分量成立的话．证明如下：利用直角坐标分量之间的对易关系，相加后则得

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}=3\frac{\hbar}{i}$$

因此，

$$\begin{aligned}p_r r-rp_r&=\frac{1}{2}\left\{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})+\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})r-r(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\frac{1}{r}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\right\}\\&=\frac{1}{2}\left\{3\frac{\hbar}{i}+\frac{1}{r}\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-3\frac{\hbar}{i}\right)r-r(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\frac{1}{r}\right\}\\&=\frac{1}{2r}\left\{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})-r^2(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\frac{1}{r^2}\right\}r.\end{aligned}$$

在最后一项中

$$r^2(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})=(x^2+y^2+z^2)(p_x x+p_y y+p_z z).$$

利用

$$x^2p_x=-2\frac{\hbar}{i}x+p_x x^2$$

等等关系式，可得

$$r^2(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})=-2\frac{\hbar}{i}r^2+(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})r^2.$$

于是得到

$$p_r r-rp_r=\frac{1}{2r}\left\{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})+\left[2\frac{\hbar}{i}r^2-(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})r^2\right]\frac{1}{r^2}\right\}r=\frac{\hbar}{i}$$

这就是(59.4)式.

为了找出在薛定谔理论中 p_r 的特殊表示式，我们将(59.3)式写成直角坐标分量的形式

$$p_r=\frac{1}{2}\left\{p_x\frac{x}{r}+p_y\frac{y}{r}+p_z\frac{z}{r}+\frac{x}{r}p_x+\frac{y}{r}p_y+\frac{z}{r}p_z\right\}.$$

其中 $p_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ 等等，因此有

$$\left(p_x\frac{x}{r}+\frac{x}{r}p_x\right)\psi=\frac{\hbar}{i}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x}{r}\psi\right)+\frac{x}{r}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\}$$

$$=\frac{\hbar}{i}\left\{2\frac{x}{r}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\left(\frac{1}{r}-\frac{x^2}{r^3}\right)\psi\right\}.$$

将这个表示式和对于 y, z 的类似表示式加在一起，考虑到

$$x\frac{\partial\psi}{\partial x}+y\frac{\partial\psi}{\partial y}+z\frac{\partial\psi}{\partial z}=(\boldsymbol{r}\cdot\nabla)\psi=r\frac{\partial\psi}{\partial r},$$

则最后得到(参见问题 49)

$$p_r=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right). \tag{59.5}$$

通过证明它的自轭性，即对于任意一对复函数 u 和 v 满足关系

$$\langle u|p_r v\rangle=\langle p_r u|v\rangle,$$

很容易验证 p_r 是一个厄密算符. 这里要求对于任意一对复函数 u 和 v，下列积分存在：

$$\langle u|p_r v\rangle - \int d\tau\, u^* \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial v}{\partial r}+\frac{1}{r}v\right);$$

$$\langle p_r u|v\rangle = \int d\tau \left\{\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{r}u\right)\right\}^* v = \int d\tau \left\{-\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial u^*}{\partial r}+\frac{1}{r}u^*\right)\right\} v.$$

要证明这两个积分相等，只要证明

$$\frac{\hbar}{i}\int d\tau \left\{u^*\frac{\partial v}{\partial r}+u^*\frac{1}{r}v+\frac{\partial u^*}{\partial r}v+u^*\frac{1}{r}v\right\}=0$$

或

$$\oint d\Omega \int_0^\infty dr r^2 \left\{\frac{\partial}{\partial r}(u^* v)+\frac{2}{r}u^* v\right\}=0.$$

上式中内部的积分可以改写为

$$\int_0^\infty dr \frac{\partial}{\partial r}(u^* v r^2) = [u^* v r^2]_0^\infty;$$

如果 u 和 v 在 $r=0$ 处保持有限，并在 $r\to\infty$ 时以指数形式趋于零，则上式的确等于零. 然而，必须指出，即使 u 和 v 在 $r=0$ 处具有 $\frac{1}{r}$ 的奇异性，归一化积分$\langle u|u\rangle$和$\langle v|v\rangle$仍然存在. 因此，仅仅依靠归一化条件并不总能保证排除没有物理意义的解，例如在球形势阱中 $l=0$ 的解.

问题 60　邻近本征函数的解

设有一半径为 a，深度为 V_0 的势阱，标志势阱大小的无量纲参数为

$$W^2=\frac{2m}{\hbar^2}V_0 a^2=9,$$

试画出 $l=0$，$ka=2.20; 2.28; 2.36$ 的波函数，k 是势阱内的波数. 所选的这些 ka 值与最低的本征值相当接近.

解　设势阱外的能量参数为

$$(\varkappa a)^2 = W^2 - (ka)^2, \tag{60.1}$$

则势阱内部的波函数是

$$u_i = \frac{1}{ka}\sin(kax), \tag{60.2a}$$

而在外部是

$$u_e = \frac{\cos ka}{\varkappa a}\sin h[\varkappa a(x-1)] + \frac{\sin ka}{ka}\cos h[\varkappa a(x-1)], \tag{60.2b}$$

其中

$$x = \frac{r}{a} \tag{60.3}$$

是用势阱半径作单位的无量纲径向坐标. 已经这样选择了归一化, 使得 u_i 在 $x=0$ 处满足边界条件 $u_i=0$ 和 $du_i/dx=1$. 而 $u_e(x)$ 的系数的选择使得 u 和 du/dx 在势阱表面 $x=1$ 处是连续的.

使(60.2b)中两个双曲函数的系数恰好是一个等于另一个的负值,

$$\frac{\cos ka}{\varkappa a} = -\frac{\sin ka}{ka},$$

就可以得到本征值. 以(60.1)式代入上式, 则得

$$\frac{\tan ka}{ka} = -\frac{1}{\sqrt{W^2-(ka)^2}}, \tag{60.4}$$

参见问题 25. 对于 $W^2=9$, 上式的解是

$$ka = 2.2789. \tag{60.5}$$

在图 34 中画出了用(60.2a, b) 式表示的波函数, 并附有一个势阱及其相应能级的简图, 如果能量选择得低于(60.5)式, 例如取 $ka=2.20$, 则势阱内的波长太长而波函数在势阱表面处的下降陡度不足以使它的振幅在无穷远处渐近地降为零; 这样一来, 波函数在大距离上仍然上升. 另一方面, 如果能量选择得高于(60.5)式,

例如 $ka=2.36$，因此势阱内部波长太短，而波函数在势阱表面处下降太快，以致在有限距离处就下降到零，在此距离之外，波函数按指数规律增加，但振幅是负的．对于非常接近本征值(60.5)的中间值 $ka=2.28$，波函数差不多趋向于零．由于能量仍然比应取的本征值 (60.5) 稍大一些，波函数在大距离上仍有一个很慢的上升(振幅是负的)，对于正确的本征值(60.5)，波函数在无穷远处应当为零．

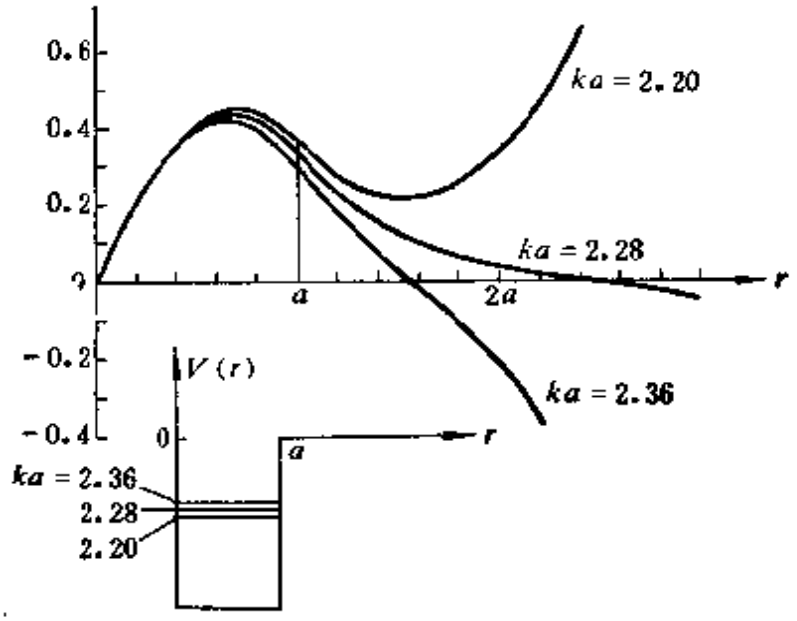


图 34　与一个本征值非常接近的能级的波函数

问题 61　四　极　矩

试确定球对称势情况下角动量本征态的四极矩．

解　角动量的本征函数具有如下形式

$$u=\frac{1}{r}\chi_l(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi); \tag{61.1}$$

在问题 54 中已经定义四极矩张量为

$$Q_{ik}=3x_ix_k-r^2\delta_{ik}. \tag{61.2}$$

我们必须计算它在 u 态中的平均值

$$\langle Q_{ik}\rangle=\int_0^\infty dr\,|\chi_l(r)|^2\oint d\Omega Q_{ik}|Y_{l,m}|^2. \tag{61.3}$$

Q_{ik}的非对角元与角度φ的关系分别是$\cos\varphi\sin\varphi$, $\cos\varphi$, $\sin\varphi$, 由于$|Y_{l,m}|^2$与φ无关, 因此相应的积分为零. 在对角元中

$$Q_{xx}=r^2(3\sin^2\theta\cos^2\varphi-1),$$
$$Q_{yy}=r^2(3\sin^2\theta\sin^2\varphi-1),$$
$$Q_{zz}=r^2(3\cos^2\theta-1),$$

对φ的积分给出$\cos^2\varphi$和$\sin^2\varphi$的平均值都是$\frac{1}{2}$. 由于

$$\frac{3}{2}\sin^2\theta-1=-\frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1),$$

积分$\langle Q_{xx}\rangle$和$\langle Q_{yy}\rangle$可以约化为$\langle Q_{zz}\rangle$:

$$\langle Q_{xx}\rangle=\langle Q_{yy}\rangle=-\frac{1}{2}\langle Q_{zz}\rangle. \tag{61.4}$$

如果采用缩写

$$\langle r^2\rangle=\int_0^\infty dr\,r^2|\chi_l(r)|^2, \tag{61.5}$$

则有

$$Q_{zz}=\langle r^2\rangle\oint d\Omega(3\cos^2\theta-1)|Y_{l,m}|^2. \tag{61.6}$$

为了计算积分(61.6), 利用一般关系式

$$\cos\theta Y_{l,m}(\theta,\ \varphi)=a_{l,m}Y_{l+1,m}+a_{l-1,m}Y_{l-1,m}$$

其中

$$a_{l,m}=\sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}}. \tag{61.7}$$

再利用球谐函数的正交性, 则由(61.6)式得到

$$Q_{zz}=\langle r^2\rangle[3(a_{l,m}^2+a_{l-1,m}^2)-1].$$

将$a_{l,m}$的具体表示式代入化简后, 最后得到

$$Q_{zz}=\langle r^2\rangle\cdot\frac{2l(l+1)-6m^2}{(2l-1)(2l+3)}. \tag{61.8}$$

只有S态①($l=0$, $m=0$)没有四极矩. 这与S态的球对称性相合. 例如, 对于P态, 有

① 对于$l=3$, $m=2$的态, 四极矩也等于零, 但是至少到$l=16$为止, 这是唯一的例外.

$$Q_{zz}=\frac{4}{5}\langle r^2\rangle\left(1-\frac{3}{2}m^2\right),$$

即 $m=0$ 的态的 Q_{zz} 为正，这对应于一个长椭球；$m=\pm1$ 态的 Q_{zz} 是负的，其大小是 $m=0$ 的 Q_{zz} 的一半，显然它对应于一个扁椭球．这是十分合理的，因为将所有这三个态叠加起来给出一个球对称的构形(闭合壳层构形)．的确，这种闭合壳层效应对任意 l 值成立．如果我们对整个壳层求和，就得到

$$\sum_{m=-l}^{+l}Q_{zz}=\frac{2\langle r^2\rangle}{(2l-1)(2l+3)}\sum_{m=-l}^{+l}[l(l+1)-3m^2]$$

由于

$$\sum_{m=-l}^{+l}m^2=\frac{1}{3}l(l+1)(2l+1).$$

因此 $\sum\limits_{m=-l}^{+l}Q_{zz}=0$.

问题 62　关闭在球内的粒子

设一个粒子被关闭在势为零的球内，并且在半径为 R 的球面上势为无穷大，试确定粒子的能级．

解　薛定谔方程可以分离变量，因此解可以写为

$$u(r,\ \theta,\ \varphi)=\frac{1}{r}\chi_l(r)Y_{l,\ m}(\theta,\ \varphi)\qquad(62.1)$$

$\chi_l(r)$ 在球内 $(0\leqslant r\leqslant R)$ 满足径向方程

$$\chi_l''+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0;\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}\qquad(62.2)$$

而在球外等于零．如果引入新变量 $z=kr$，并令

$$\chi_l=z^{\frac{1}{2}}\varphi(z),$$

则(62.2)式可约化为

$$\varphi''+\frac{1}{z}\varphi'+\left\{1-\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{z^2}\right\}\varphi=0,$$

这是一个贝塞耳方程，它的解是 $J_{\pm\left(l+\frac{1}{2}\right)}(z)$. 因此(62.2)式的完全解是

$$\chi_l(r)=\sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\{C_1J_{l+\frac{1}{2}}(kr)+C_2J_{-\left(l+\frac{1}{2}\right)}(kr)\}. \quad (62.3)$$

通常引入所谓球贝塞耳函数

$$\left.\begin{aligned} j_l(z)&=\sqrt{\frac{\pi z}{2}}\,J_{l+\frac{1}{2}}(z),\\ n_l(z)&=(-1)^{l+1}\sqrt{\frac{\pi z}{2}}\,J_{-\left(l+\frac{1}{2}\right)}(z)\end{aligned}\right\} \quad (62.4)$$

对大的正 z 值，它们的渐近行为是：

$$j_l(z)\to\sin\left(z-\frac{l\pi}{2}\right);\quad n_l(z)\to-\cos\left(z-\frac{l\pi}{2}\right) \quad (62.5)$$

对于 $|z|\ll l+\frac{1}{2}$，只取每个函数在原点附近的幂级数的第一项，则有

$$j_l(z)=\frac{2^l l!}{(2l+1)!}z^{l+1};\quad n_l(z)=-\frac{(2l)!}{2^l l!}z^{-l}. \quad (62.6)$$

(62.3) 式解的第二项在 $r=0$ 处给出 $\chi_l(r)\propto r^{-l}$，因而 $u\propto r^{-l-1}$. 因此除非(62.3)式中的 $C_2=0$，否则归一化积分

$$\int d\tau|u|^2=\int_0^\infty dr|\chi_l|^2=1, \quad (62.7)$$

不会存在. 但是这一结论不适用于 $l=0$ 的情形. 因为这时 u 的奇异性不足以使积分在 $r=0$ 处发散. 然而即使在这种情况下，奇异解还是要弃去，因为它将使能量积分①

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\int d\tau(\nabla u)^2 \quad (62.8)$$

在原点发散(参见问题 65). 因此，可归一化的解只能是

① 对于 $l=0$ 和小的 r，这个解将变成 $u\sim\frac{1}{r}$，而动能积分变成 $E\sim\int\frac{dr}{r^2}$.

$$\chi_l(r) = Cj_l(kr). \tag{62.9}$$

从这一系列解中我们用条件

$$j_l(kR) = 0 \tag{62.10a}$$

或

$$J_{l+\frac{1}{2}}(kR) = 0 \tag{62.10b}$$

选择本征函数. 由于对每一个给定的 $l+\frac{1}{2}$ 值，贝塞耳函数有无穷多个零点，我们得到无穷多个 $k_{n_r,l}$ 的值和无穷多个能级

$$E_{n_r,l} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{n_r,l}^2 \tag{62.11}$$

对于每一个 l 值，$n_r = 1, 2, 3, \cdots$ 是标志零点数目的径向量子数.

对最低的一些 l 值，球贝塞耳函数是

$$\left.\begin{aligned} j_0(z) &= \sin z; \qquad j_1(z) = \frac{\sin z}{z} - \cos z; \\ j_2(z) &= -3\frac{\cos z}{z} + \left(\frac{3}{z^2} - 1\right)\sin z, \end{aligned}\right\} \tag{62.12}$$

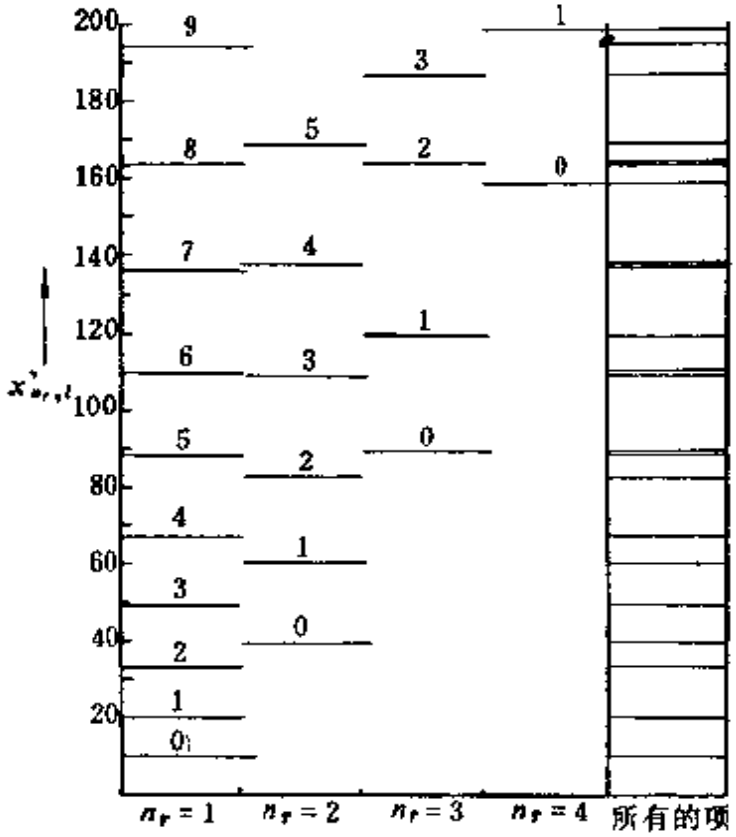


图 35　一个关闭在球中的粒子的能级

对较大的 l 值，则可由下面的递推公式求出

$$j_l(z)=\frac{l}{z}\,j_{l-1}(z)-j'_{l-1}(z). \tag{62.13}$$

它们的零点可以由简单的超越方程解出：

$$\left.\begin{aligned} &j_0(z)=0 \quad \text{如果 } \sin z=0 \text{ 或 } z=n_r\pi;\\ &j_1(z)=0 \quad \text{如果 } \tan z=z;\\ &j_2(z)=0 \quad \text{如果 } \tan z=\frac{3z}{3-z^2} \text{ 等等} \end{aligned}\right\} \tag{62.14}$$

对于偶的 l，这些零点趋近于 $n\pi$，而对于奇的 l，则趋近于 $\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$. 在图 35 中，用 $\frac{\hbar^2}{2mR^2}$ 作单位，画出最低的一些能量值，参量

$$\chi_{n_r,l}=k_{n_r,l}R, \tag{62.15}$$

它的数值(在 15 以下)已全部列在附表中。

$\chi_{n_r,l}$ 的数值表

l	n_r			
	1	2	3	4
0	3.142	6.283	9.425	12.566
1	4.493	7.725	10.904	14.066
2	5.764	9.095	12.323	
3	6.988	10.417	13.698	
4	8.183	11.705		
5	9.356	12.967		
6	10.513	14.207		
7	11.657			
8	12.791			
9	13.916			

注　本题是和问题 18 中讨论过的较简单的一维问题密切相关的. 这里 $l=0$ 的解恰好对应于一维问题的反对称波函数。

问题 63　有限深方势阱

试确定在方势阱

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & r<R,\\ 0 & r>R\end{cases} \tag{63.1}$$

中，$l=0,1,2$ 的束缚态的本征值．然后求出“势阱大小”$\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2}=100$ 时的数值结果．

解　利用缩写

$$\frac{2m|E|}{\hbar^2}=\varkappa^2;\quad \frac{2mV_0}{\hbar^2}=k_0^2;\quad \frac{2m(V_0-|E|)}{\hbar^2}=k^2 \tag{63.2}$$

薛定谔方程的径向部分变为(对于束缚态)

$$\chi_l''+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi_l=0\quad r<R \tag{63.3a}$$

和

$$\chi_l''+\left(-\varkappa^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi_l=0\quad r>R \tag{63.3b}$$

在明显的边界条件 $\chi_l(0)=0$ 下，(63.3a)式的解是球贝塞耳函数，

$$\chi_l(r)=Aj_l(kr)\quad r<R; \tag{63.4a}$$

在大距离上象 $e^{-\varkappa r}$ 一样下降的 (63.3b) 式的解是虚自变量的球汉克耳函数

$$\chi_l(r)=Bh_l^{(1)}(i\varkappa r)\quad r>R. \tag{63.4b}$$

这里的常数 A, B 仍然要由连续性条件和归一化条件决定．利用在势阱表面 $r=R$ 上波函数的对数微商的连续性条件可得

$$i\varkappa R\,\frac{h_l^{(1)\prime}(i\varkappa R)}{h_l^{(1)}(i\varkappa R)}=kR\,\frac{j_l'(kR)}{j_l(kR)} \tag{63.5}$$

上式中用撇表示对于相应自变量的微分．由于 (63.5) 式将 $\varkappa$ 与 k 联系起来，因此按(63.2)式，它决定了在任何给定势阱中能量的本征值．

(63.5)式中的函数,对最低的一些 l 值的具体表示式如下:

$$\left.\begin{aligned} &j_0(z)=\sin z, && h_0^{(1)}(z)=-ie^{iz},\\ &j_1(z)=\frac{\sin z}{z}-\cos z && h_1^{(1)}(z)=\left(-\frac{i}{z}-1\right)e^{iz},\\ &j_2(z)=\left(\frac{3}{z^2}-1\right)\sin z-\frac{3}{z}\cos z, && h_2^{(1)}(z)=\left(-\frac{3i}{z^2}-\frac{3}{z}+i\right)e^{iz}. \end{aligned}\right\} \tag{63.6}$$

对于较高的 l 值,可以由下面的递推公式确定

$$\left.\begin{aligned} j_{l+1}(z)&=\frac{2l+1}{z}j_l(z)-j_{l-1}(z);\\ h_{l+1}^{(1)}(z)&=\frac{2l+1}{z}h_l^{(1)}(z)-h_{l-1}^{(1)}(z). \end{aligned}\right\} \tag{63.7}$$

再引用缩写

$$kR=x;\quad k_0R=x_0;\quad k/k_0=\xi;\quad \varkappa R=x_0\sqrt{1-\xi^2} \tag{63.8}$$

其中 x_0^2 就是上面定义的"势阱大小". 经过相当长的基本运算后,可以将(63.5)式化为下列本征值方程

$$\tan(x_0\xi)=f_l(x_0,\ \xi) \tag{63.9}$$

其中

$$f_0(x_0,\ \xi)=-\frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}; \tag{63.10a}$$

$$f_1(x_0,\ \xi)=\frac{x_0\xi}{1+\dfrac{\xi^2}{1-\xi^2}(1+x_0\sqrt{1-\xi^2})}; \tag{63.10b}$$

$$f_2(x_0,\ \xi)=x_0\xi\cdot\frac{1+x_0\sqrt{1-\xi^2}+\dfrac{1}{3}x_0^2\xi^2(1-\xi^2)}{1+x_0\sqrt{1-\xi^2}\left[1-\dfrac{1}{3}x_0^2\xi^2(1-\xi^2)\right]}. \tag{63.10c}$$

为了求出满足这些方程的 ξ 值(或 x 值),最简单的办法是利用图解法,在图 36 中,对于 $x_0=10$ 画出了函数 $\tan x_0\xi$ 在物理间隔 $0<\xi<1$ 中的图形. 它和函数 $f_l(\xi)$ 的交点就是所要求的 ξ 值,利用最接近交点处的函数表,可以使定出的 ξ 值精确到四位

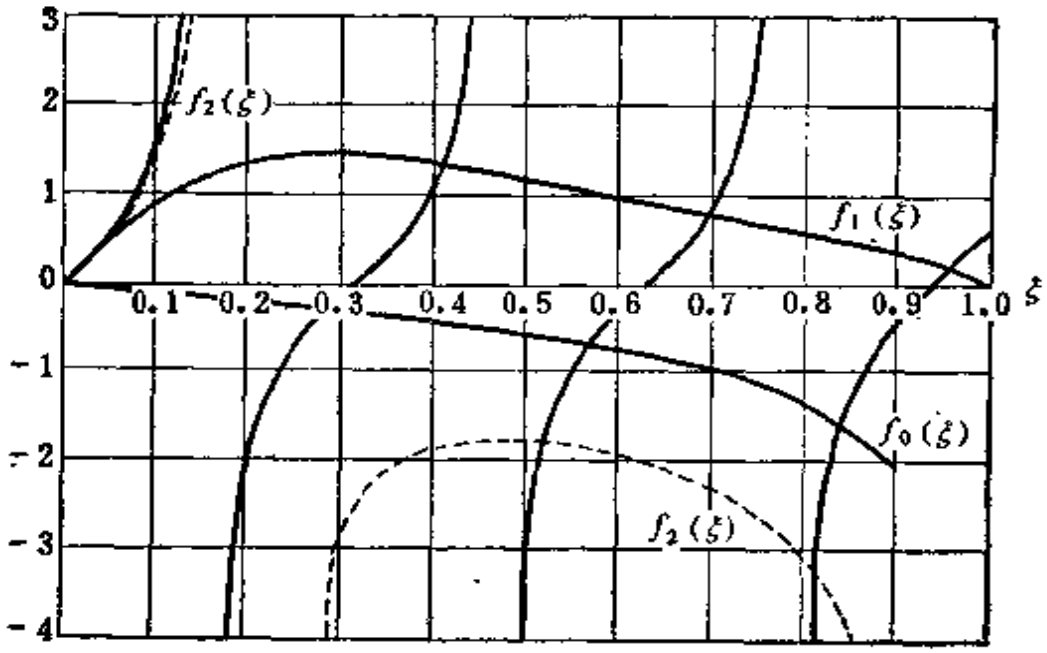


图 36　方势阱中本征值的图解确定法

有效数字. 在附表中我们列举了对于 $x_0=10$ 的结果, 并与上一问题中无限深方势阱的结果作了比较. 必须指出, 所有能级的位置都比无限深势阱的情况为低, 因此, 从前题所给出的 l 较大时的 x 值, 可以预料, 在这里所讨论的例子中, 至少到 $l=5$ 还可以出现束缚态.

有限深势阱的 x 值			无限深势阱的 x 值		
$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=0$	$l=1$	$l=2$
2.853	4.070	5.226	3.142	4.493	5.764
5.679	6.958	8.124	6.283	7.725	9.095
8.422	9.625		9.425	10.904	

注　本题和问题 25 中较简单的一维问题密切相关, 那里的反对称解对应于本题的 $l=0$ 的解.

问题 64. 伍德-萨克松 (Wood-Saxon) 势

设有一球对称势阱

$$V(r)=-\frac{V_0}{1+e^{\frac{r-R}{a}}} \tag{64.1}$$

其中 $a\ll R$. 试确定在此势阱中 $l=0$ 的束缚态.

注　这个势已用于描述中子与重核的相互作用. 参数 R 是核半径,并且参数 a 确定表面层的厚度,在这表面层中,势从外部的 $V=0$ 下降到核内的 $V=-V_0$(图 37). 对于 $a=0$,给出一个在表面上发生势跃变的简单势阱.

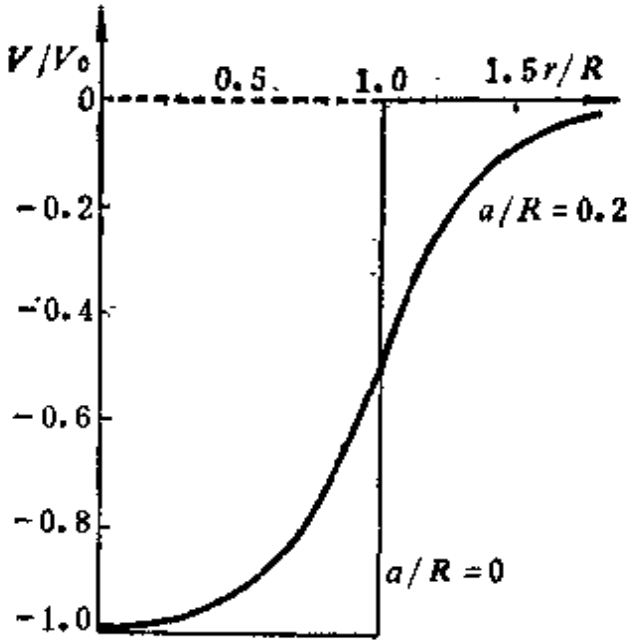


图 37　$a/R=0.2$ 时的伍德-萨克松势. 直角阱对应于 $a/R=0$

解　采用记号

$$u(r)=\frac{1}{r}\chi(r);\ \frac{2mE}{\hbar^2}a^2=-\beta^2;\ \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2=\gamma^2 \tag{64.2}$$

薛定谔方程

$$\frac{d^2u}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{du}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)u=0$$

在引入新变量

$$y=\frac{1}{1+e^{\frac{r-R}{a}}} \tag{64.3}$$

之后,可以化为

$$y(1-y)\frac{d^2\chi}{dy^2}+(1-2y)\frac{d\chi}{dy}+\frac{-\beta^2+\gamma^2y}{y(1-y)}\chi=0.$$

求解此方程的边界条件是

当 $y=0(r=\infty)$ 时和 $y\simeq 1-e^{-R/a}\simeq 1(r=0)$ 时 $\chi=0$. (64.4)

设

$$\chi(y)=y^{\nu}(1-y)^{\mu}f(y), \tag{64.5}$$

代入上面的微分方程,则得

$$\begin{aligned}&y(1-y)f''+[(2\nu+1)-y(2\nu+2\mu+2)]f'\\&+\left[\nu(\nu-1)\frac{1-y}{y}+\mu(\mu-1)\frac{y}{1-y}-2\mu\nu+\nu\frac{1-2y}{y}\right.\\&\left.-\mu\frac{1-2y}{1-y}+\frac{-\beta^2+\gamma^2y}{y(1-y)}\right]f=0.\end{aligned} \tag{64.6}$$

如果选择参数 μ 和 ν,使

$$\nu=\beta;\quad \mu^2=\beta^2-\gamma^2, \tag{64.7}$$

则(64.6)式中 f 前面的系数将与 y 无关,于是方程(64.6)就变成超几何微分方程:

$$\begin{aligned}&y(1-y)f''+[(2\nu+1)-y(2\nu+2\mu+2)]f'\\&-(\nu+\mu)(\nu+\mu+1)f=0\end{aligned} \tag{64.8}$$

它的(未归一化)解是

$$\chi=y^{\nu}(1-y)^{\mu}\ {}_2F_1(\mu+\nu,\ \mu+\nu+1,\ 2\nu+1;y) \tag{64.9}$$

将 ν 换成 $-\nu$ 就可以得到另一个独立的解,但是这个解不满足(64.4)式的第一个边界条件. 对于大的 r 值 $(y\to 0)$,(64.9) 式给出

$$\chi\simeq y^{\nu};\quad y\propto\exp\left(-\frac{r-R}{a}\right);\quad \chi\propto e^{-\beta R/a}\exp\left(-\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}\,r\right).$$

这个渐近行为是合乎物理要求的.

在(或接近)$y=1$ 处的另一个边界条件没有这样容易满足. 为了描述(64.9)式在 $y=1$ 邻域内的行为,利用关系式

$$\begin{aligned}&{}_2F_1(\mu+\nu,\ \mu+\nu+1,\ 2\nu+1;y)\\&=\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu+1)\Gamma(\nu-\mu)}\ {}_2F_1(\nu+\mu,\nu+\mu+1,2\mu+1;1-y)\end{aligned}$$

$$+\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\nu+\mu+1)\Gamma(\nu+\mu)}(1-y)^{-2\mu}{}_2F_1(\nu-\mu,\ \nu-\mu+1,$$
$$-2\mu+1;1-y)$$

这给出

$$\chi\simeq\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu+1)\Gamma(\nu-\mu)}(1-y)^{\mu}$$
$$+\frac{\Gamma(2\nu+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\nu+\mu+1)\Gamma(\nu+\mu)}(1-y)^{-\mu} \qquad (64.10)$$

为了讨论这个表示式，我们首先指出 $\gamma>\beta$，因此，按照(64.7)式，μ 将是虚数：

$$\mu=i\lambda;\qquad \lambda=\sqrt{\gamma^2-\beta^2}. \qquad (64.11)$$

于是(64.10)式可改写为

$$\chi\simeq\frac{\Gamma(2\beta+1)\Gamma(-2i\lambda)}{\Gamma(\beta+1-i\lambda)\Gamma(\beta-i\lambda)}\left\{(1-y)^{i\lambda}\right.$$
$$\left.+\frac{\Gamma(2i\lambda)\Gamma(\beta+1-i\lambda)\Gamma(\beta-i\lambda)}{\Gamma(-2i\lambda)\Gamma(\beta+1+i\lambda)\Gamma(\beta+i\lambda)}(1-y)^{-i\lambda}\right\}. \qquad (64.12)$$

在 $r=0$ 附近，(64.3)式中的指数远小于1，因此近似地有

$$1-y=e^{-R/a} \qquad (64.13)$$

我们进一步定义

$$\varphi=\arg\Gamma(\beta+i\lambda);\quad \psi=\arg\Gamma(2i\lambda). \qquad (64.14)$$

现在如果略去(64.12)式中花括号前面的系数(由于函数尚未归一化)并用(64.13)式代替(64.12)式中的$(1-y)$，则边界条件给出

$$e^{-i\frac{\lambda R}{a}}+\exp(2i\psi-4i\varphi-2i\tan^{-1}\lambda/\beta)e^{i\frac{\lambda R}{a}}=0.$$

由此得到本征值条件

$$\exp\{i(\psi-2\varphi-\tan^{-1}\lambda/\beta)\}\cos\left(\frac{\lambda R}{a}+\psi-2\varphi-\tan^{-1}\lambda/\beta\right)=0$$

或

$$\frac{\lambda R}{a}+\psi-2\varphi-\tan^{-1}\frac{\lambda}{\beta}=(2n-1)\frac{\pi}{2};\quad n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots$$
$$(64.15)$$

对于给定的参数 R 和 a，上式的确给出 β 和 λ 之间的关系，因而给出 E 和 V_0 之间的关系.

(64.15)式仍然不太适宜于实际计算，我们最好求出 Γ 函数的幅角 φ 和 ψ 的表示式，为此利用展开式①

$$\Gamma(x+iy)=\xi e^{i\eta}$$

$$\eta=y\left\{-C+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{n}-\frac{1}{y}\tan^{-1}\frac{y}{x+n-1}\right)\right\},$$

其中 $C=0.5772\cdots$ 是欧勒常数. 于是我们得到

$$\psi=-\frac{\pi}{2}+2\lambda\left\{-C+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{n}-\frac{1}{2\lambda}\tan^{-1}\frac{2\lambda}{n}\right)\right\};$$

$$\varphi=-\tan^{-1}\frac{\lambda}{\beta}+\lambda\left\{-C+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{n}-\frac{1}{\lambda}\tan^{-1}\frac{\lambda}{n+\beta}\right)\right\}.$$

将这些表示式代入(64.15)式，则得

$$\frac{\lambda R}{a}-\sum_{n=1}^{\infty}\left(\tan^{-1}\frac{2\lambda}{n}-2\tan^{-1}\frac{\lambda}{n+\beta}\right)+\tan^{-1}\frac{\lambda}{\beta}=n\pi. \tag{64.16}$$

为讨论方便起见，引入参数

$$\left.\begin{aligned}&k=\frac{\lambda}{a}=\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-|E|)\right]^{\frac{1}{2}};\quad \varkappa=\frac{\beta}{a}=\left[\frac{2m}{\hbar^2}|E|\right]^{\frac{1}{2}};\\&k_0=\frac{1}{a}\sqrt{\lambda^2+\beta^2}=\left[\frac{2m}{\hbar^2}V_0\right]^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\right\} \tag{64.17}$$

这些参数与表面层的厚度 a 无关，因而它们在 $a\to 0$ 的极限下仍然有意义. 利用这些参数可以将(64.16)式写成

$$\frac{kR}{\varkappa R}=-\tan\left\{kR-\sum_{n=1}^{\infty}\left(\tan^{-1}\frac{2ka}{n}-2\tan^{-1}\frac{ka}{n+\varkappa a}\right)\right\}. \tag{64.18}$$

对于 $a\to 0$，上式中的求和项为零，我们又回到方势阱的本征值条

① 这个展开式很容易由标准公式导出，参见常用的数学用表，如 Jahnke-Emde-Losch 或 Magnus-Oberhettinger.

件，

$$\frac{kR}{\varkappa R}=-\tan kR.$$

引入小参数

$$\alpha=a/R \tag{64.19}$$

及缩写 $kR=x$, $\varkappa R=y$, 将(64.18)式展开为 α 的幂级数，最后得到

$$-\frac{x}{y}=\tan\{x-2\alpha^2x[\zeta(2)y-\alpha\zeta(3)(x^2+y^2)+\alpha^2\zeta(4)(y^2-x^2y)$$
$$-\alpha^3\zeta(5)(y^4-2x^2y^2-3x^4)+\alpha^4\zeta(6)(y^5-\frac{10}{3}x^2y^3+x^4y)$$
$$-\alpha^5\zeta(7)(y^6-5x^2y^4+3x^4y^2+9x^6)\cdots]\}.$$

问题65 球谐振子

试在球极坐标中利用分离变量法对于球谐振子势

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{65.1}$$

求解薛定谔方程.

解： 利用通常的分离变量法，令

$$u(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{r}\chi_l(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{65.2}$$

可得径向微分方程

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2}+\left[\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}r^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0. \tag{65.3}$$

对于 $l=0$, 上式化为线性谐振子方程(参见问题30)；对于 $l\neq0$, 离心力将粒子向外推，因此将得到不同的解.

利用缩写

$$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2;\quad \frac{m\omega}{\hbar}=\lambda;\quad \frac{k^2}{2\lambda}=\frac{E}{\hbar\omega}=\mu, \tag{65.4}$$

可将方程(65.3)改写为标准形式

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2}+\left[k^2-\lambda^2r^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0. \tag{65.5}$$

在 $r=0$ 处，解的行为取决于离心项$\left(\text{即 } -\frac{l(l+1)}{r^2}\right)$，而在 $r\to\infty$ 时解的渐近行为则取决于振子项(即 $-\lambda^2 r^2$)，由此我们可以设

$$\chi_l = r^{l+1}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}v(r), \tag{65.6}$$

并且类似于线性谐振子的情况，不用 r，而用变量

$$t=\lambda r^2. \tag{65.7}$$

这时函数 v 满足下列微分方程

$$t\frac{d^2v}{dt^2}+\left[\left(l+\frac{3}{2}\right)-t\right]\frac{dv}{dt}-\left[\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}\right)-\frac{1}{2}\mu\right]v=0,$$

这就是库末方程，它的完全解是

$$v=C_1\ {}_1F_1\left[\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}-\mu\right),\ l+\frac{3}{2};\ \lambda r^2\right]$$
$$+C_2\, r^{-(2l+1)}{}_1F_1\left[\frac{1}{2}\left(-l+\frac{1}{2}-\mu\right),\ -l+\frac{1}{2};\ \lambda r^2\right]. \tag{65.8}$$

在 $r=0$ 处，(65.8)式的第二项与归一化是不相容的①，因此 $C_2=0$. 这一点显然和线性谐振子不同，在后一情况下，在原点不存在边界条件.

合流超几何级数在自变量取大的正值时的渐近行为是

$${}_1F_1(a,\ c;z)\longrightarrow\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}e^z z^{a-c};$$

以之代入(65.8)和(65.6)式，得到的表示式

$$\chi_l\propto r^{l+1}e^{-\frac{1}{2}\lambda r^2}\cdot e^{\lambda r^2}r^{-\left(l+\frac{3}{2}+\mu\right)}$$

是指数发散的. 为了避免发散，必须令参数 $a=-n_r$ 并且 $n_r=0$, 1, 2, …；这样一来，就使级数截断为一个 n 次的多项式. 因此

$$\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}-\mu\right)=-n_r \tag{65.9a}$$

或者，利用(65.4)式，得到能级

① 对于 $l=0$，(65.8)式第二项虽然可以归一化，但是能量积分仍然是发散的，参见问题 62.

$$E=\hbar\omega\left(2n_r+l+\frac{3}{2}\right);\quad n_r=0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{65.9b}$$

其中 n_r 可以称为径向量子数. 能级从零点能 $\frac{3}{2}\hbar\omega$ (对应于问题的三个自由度)开始,并且与线性振子一样,能级是等间隔的:

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right) \tag{65.10}$$

其中

$$n=2n_r+l. \tag{65.11}$$

将(65.6)、(65.8)和(65.9a)式综合在一起,可将完全的本征函数写成

$$u(r,\ \theta,\ \varphi)=Cr^l e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}{}_1F_1\left(-n_r;\ l+\frac{3}{2};\ \lambda r^2\right)Y_{l,m}(\theta,\ \varphi) \tag{65.12}$$

其中 C 仍然由归一化条件决定.

除基态 $n=0$ 外,能级是简并的,因为对于偶的 n,按照(65.11)式,有 $\frac{n}{2}+1$ 种不同的组合成 n 的方式,而对于奇的 n,有 $\frac{1}{2}(n+1)$ 种. 由于对每一个 l 值,还有 $2l+1$ 个不同的 m 值(从 $-l$ 到 $+l$). 因此简并度还要乘上这个因子.

注 应将这个问题和问题 42 的圆谐振子相比较.

问题 66 球谐振子的简并度

试证明 $l=2$, $m=0$, $n_r=1$ 的球谐振子本征函数可以写成在直角坐标中分离变量得到的简并解的线性组合.

解 在直角坐标中球谐振子的薛定谔方程可以写为

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+(k_1^2-\lambda^2x^2)u\right]+\left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+(k_2^2-\lambda^2y^2)u\right]$$
$$+\left[\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+(k_3^2-\lambda^2z^2)u\right]=0 \tag{66.1}$$

其中

$$k_1^2+k_2^2+k_3^2=k^2$$

并且 k^2 和 λ 的定义仍和(65.4)式一样，令

$$u(x,\ y,\ z)=f(x)\,g(y)\,h(z) \tag{66.2}$$

我们得到在 x, y, z 方向的三个简单的振子方程，例如，其中第一个是

$$\frac{d^2f}{dx^2}+(k_2^1-\lambda^2x^2)f=0. \tag{66.3}$$

n_1	n_2	n_3	直角坐标本征函数 (不包括指数因子)	相乘的系数
0	0	4	$1-4\lambda z^2+\frac{4}{3}\lambda^2z^4$	$-6/28\lambda$
0	1	3	$yz\left(1-\frac{2}{3}\lambda z^2\right)$	0
0	2	2	$(1-2\lambda y^2)(1-2\lambda z^2)$	$-1/28\lambda$
0	3	1	$yz\left(1-\frac{2}{3}\lambda y^2\right)$	0
0	4	0	$1-4\lambda y^2+\frac{4}{3}\lambda^2y^4$	$+3/28\lambda$
1	0	3	$xz\left(1-\frac{2}{3}\lambda z^2\right)$	0
1	1	2	$xy(1-2\lambda z^2)$	0
1	2	1	$xz(1-2\lambda y^2)$	0
1	3	0	$xy\left(1-\frac{2}{3}\lambda y^2\right)$	0
2	0	2	$(1-2\lambda x^2)(1-2\lambda z^2)$	$-1/28\lambda$
2	1	1	$yz(1-2\lambda x^2)$	0
2	2	0	$(1-2\lambda x^2)(1-2\lambda y^2)$	$+2/28\lambda$
3	0	1	$xz\left(1-\frac{2}{3}\lambda x^2\right)$	0
3	1	0	$xy\left(1-\frac{2}{3}\lambda x^2\right)$	0
4	0	0	$1-4\lambda x^2+\frac{4}{3}\lambda^2x^4$	$+3/28\lambda$

注 试与问题42平面圆谐振子的简并情况相比较。

它的本征值是 $\hbar\omega\left(n_1+\frac{1}{2}\right)$，$n_1$ 是一个非负整数．在问题 30 中已经证明，(66.3)式的(未归一化)本征函数对于偶的 $n_1=2n$，是

$$f_{2n}(x)=e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}\ {}_1F_1\left(-n,\frac{1}{2};\ \lambda x^2\right) \tag{66.4a}$$

对于奇的 $n_1=2n+1$，是

$$f_{2n+1}(x)=e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}x\ {}_1F_1\left(-n,\frac{3}{2};\ \lambda x^2\right). \tag{66.4b}$$

这个结果对于量子数为 n_2 的 $g(y)$ 和量子数为 n_3 的 $h(z)$ 同样适用．因此总能量变成

$$E_{n_1,\,n_2,\,n_3}=\hbar\omega\left(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}\right). \tag{66.5}$$

另一方面，在球坐标中我们已经得到

$$E_{n_r l,\,m}=\hbar\omega\left(2n_r+l+\frac{3}{2}\right) \tag{66.6}$$

因此 $l=2$，$m=0$，$n_r=1$ 的态属于 $2n_r+l=4$；它的本征函数，按照(65.12)式，是

$$u=r^2e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}\ {}_1F_1\left(-1,\frac{7}{2};\ \lambda r^2\right)P_2(\cos\theta). \tag{66.7}$$

现在的问题是将(66.7)式的 u，用直角坐标表示，并写成属于

$$n_1+n_2+n_3=4 \tag{66.8}$$

的所有解 $f_{n_1}(x)g_{n_2}(x)h_{n_3}(z)$ 的线性组合．由(66.7)式，我们有

$$\begin{aligned}u&=e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}\left(1-\frac{2}{7}\lambda r^2\right)\left(\frac{3}{2}z^2-\frac{1}{2}r^2\right)\\&=e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}\left\{\frac{\lambda}{7}x^4+\frac{\lambda}{7}y^4-\frac{2\lambda}{7}z^4+\frac{2\lambda}{7}x^2y^2\right.\\&\left.-\frac{\lambda}{7}y^2z^2-\frac{\lambda}{7}x^2z^2-\frac{1}{2}x^2-\frac{1}{2}y^2+z^2\right\}.\end{aligned} \tag{66.9}$$

在每一个 fgh 乘积中有一个同样的指数因子 $e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}$，因此在比较这两种表示式时可以略去这一因子．由于 $n_1\leqslant 4$，按照(66.4a, b)式，合流超几何级数的第一个参数(n)不会超过 2．当然，这一结论对

于 $g(y)$ 和 $h(z)$ 中的合流超几何级数同样成立. 所以只会出现如下一些多项式

$$\left.\begin{aligned} &{}_1F_1\left(0,\ \frac{1}{2};\ \lambda x^2\right)=1, \quad x\,{}_1F_1\left(0,\ \frac{3}{2};\ \lambda x^2\right)=x,\\ &\qquad x\,{}_1F_1\left(-1,\frac{3}{2};\ \lambda x^2\right)=x\left(1-\frac{2}{3}\lambda x^2\right),\\ &{}_1F_1\left(-1,\frac{1}{2};\ \lambda x^2\right)=1-2\lambda x^2,\\ &{}_1F_1\left(-2,\frac{1}{2};\ \lambda x^2\right)=1-4\lambda x^2+\frac{4}{3}\lambda^2x^4. \end{aligned}\right\}(66.10)$$

按照(66.8)式，将 4 分解为三个整数共有 15 种不同的分法，具体的分解见下表. 由于在多项式(66.9)中只出现 x, y, z, 的偶次方项，下表中含有 x, y, z 的奇次方项(即在 n_1, n_2, n_3 中至少有一个是奇数的那些项)的 9 个直角坐标函数的乘积，不可能对所求的线性组合有贡献. 现在只剩下 6 项可用来线性组合成(66.9)式，但是在(66.9)式中有10 项，因此，为了确证这个线性组合与(66.9)式恒等，有四个可调节的系数. 下表中最后一列就是组合系数.

问题 67　开普勒问题

对于一个有无限大质量和电荷 Ze(当 $Z=1$ 时，这是氢原子的理论)的点原子核场，解薛定谔方程求电子的束缚态.

解　利用缩写

$$\frac{2mE}{\hbar^2}=-\gamma^2;\quad \varkappa=\frac{Ze^2m}{\gamma\hbar^2}=Z\frac{e^2}{\hbar c}\sqrt{-\frac{mc^2}{2E}}, \tag{67.1}$$

并用通常的方法把解分解为因子:

$$u=\frac{1}{r}\chi_l(r)Y_{l,m}(\theta,\ \varphi), \tag{67.2}$$

得到径向微分方程

$$\chi_l''+\left(-\gamma^2+\frac{2\gamma\varkappa}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi_l=0. \tag{67.3}$$

此方程在 $r=0$ 处有一正则奇点，在 $r=\infty$ 时有一非正则奇点．在 $r=0$ 的附近可以用幂级数来求解，此幂级数与 r^{l+1} 或 r^{-l} 成比例．在 $r=\infty$ 处，解的行为类似 $e^{\pm\gamma r}$．只有那些在 $r\to 0$ 时具有 r^{l+1} 的行为，同时在 $r\to\infty$ 时具有 $e^{-\gamma r}$ 行为的解，才能按下式归一化①

$$\int_0^\infty \chi_l^2(r)\,dr=1. \tag{67.4}$$

因此可写出

$$\chi_l=r^{l+1}e^{-\gamma r}f(r). \tag{67.5}$$

用无量纲变量 z

$$z=2\gamma r \tag{67.6}$$

代替 r，则得微分方程

$$zf''+(2l+2-z)f'-(l+1-\varkappa)f=0. \tag{67.7}$$

这是一库末方程，对于此方程，我们仅需考虑在原点是正则的解

$$f={}_1F_1(l+1-\varkappa,\ 2l+2;\ z), \tag{67.8}$$

因为在(67.5)式中，解在 $r=0$ 和 $r=\infty$ 的行为已经包含在 $f(r)$ 前面的两个因子中．当 z 取很大值时，合流级数(67.8)的发散行为是 e^{2z}，因此破坏了归一化，除非

$$l+1-\varkappa=-n_r\quad(n_r=0,\ 1,\ 2,\ \cdots), \tag{67.9}$$

这时级数变成一个多项式．由于(67.1)式的 $\varkappa$ 和能量有关，因此(67.9)式确定了能量本征值．若设主量子数

$$n=n_r+l+1, \tag{67.10}$$

则得 $\varkappa=n$，或

$$E_n=-\frac{Z^2}{2n^2}\cdot\frac{me^4}{\hbar^2}. \tag{67.11}$$

对应于 $n>1$ 的每一个能级有几个本征函数：

① 对于 $l=0$，虽然解 r^{-l} 也可以归一化，但是动能积分并不存在，因此解 r^{-l} 可排除．参考问题 62．

$$u_{n,l,m}=Cr^l e^{-\gamma r}\,{}_1F_1(l+1-n,\ 2l+2;\ 2r\gamma)Y_{l,m}(\theta,\ \varphi), \quad (67.12)$$

所以 $n>1$ 的能级是简并的. 对于一个给定的 n, 角动量量子数 l 可取 n 个值($l=0,\ 1,\ \cdots,\ n-1$); 磁量子数 m 从 $m=-l$ 取到 $m=+l$, 共取 $2l+1$ 个值, 因此对于每一个 n 值存在

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2 \quad (67.13)$$

个本征函数. 只有 $n=1$ 的基态, 由于 $l=0$, $m=0$, 不是简并的.

在下表中, 给出了 $n=1$, 2 和 3 的本征函数, 其径向部分满足归一化条件(67.4)式. 采用已用过的原子单位 $m=1$, $e=1$, $\hbar=1$, 则

$$E_n=-\frac{Z^2}{2n^2};\ \varkappa=\frac{Z}{\gamma};\quad \gamma=\frac{Z}{n}. \quad (67.14)$$

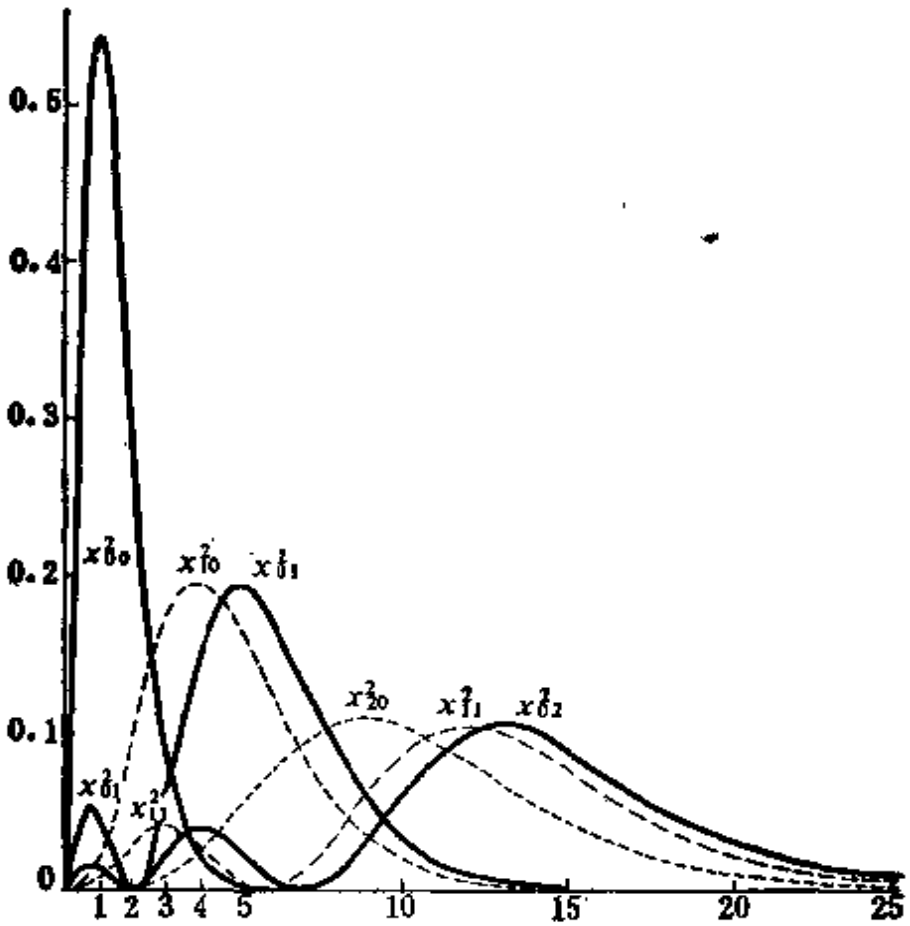


图 38 用 $|\chi_{l,n_r}|^2$ 表示的氢原中电子的径向密度

在图 38 中给出了$|\chi_{l,n_r}|^2$的图示. 球谐函数满足归一化条件

$$\oint d\Omega |Y_{l,m}|^2 = 1.$$

注　关于原子核和电子绕着它们的质量中心运动的问题，可参考问题 150. —在问题 202 和 203 中讨论了相对论效应和附加的精细结构—在问题 154ff 中以类氢波函数为基础讨论了两个或更多电子的原子结构.

类氢本征函数 $u_{n,l,m}=\frac{1}{r}\chi_{l,n_r}(r)\,Y_{l,m}(\theta,\varphi)$的表

a) $n=1, 2, 3, 4$ 的径向部分

n	l	n_r	符号	$\chi_{l,n_r}(r)$
1	0	0	$1s$	$2Z^{\frac{1}{2}}re^{-Zr}$
2	0	1	$2s$	$\frac{1}{\sqrt{2}}Z^{\frac{3}{2}}re^{-\frac{Z}{2}r}\left(1-\frac{1}{2}Zr\right)$
	1	0	$2p$	$\frac{1}{\sqrt{24}}Z^{\frac{5}{2}}r^2e^{-\frac{Z}{2}r}$
3	0	2	$3s$	$3\frac{2}{\sqrt{3}}Z^{\frac{1}{2}}re^{-\frac{Z}{3}r}\left(1-\frac{2}{3}Zr+\frac{2}{27}Z^2r^2\right)$
	1	1	$3p$	$\frac{4}{27}\sqrt{\frac{2}{3}}Z^{\frac{5}{2}}r^2e^{-\frac{Z}{3}}\left(1-\frac{1}{6}Zr\right)$
	2	0	$3d$	$\frac{4}{81\sqrt{30}}Z^{\frac{7}{2}}r^3e^{-\frac{Z}{3}r}$
4	0	3	$4s$	$\frac{1}{4}Z^{\frac{3}{2}}re^{-\frac{Z}{4}r}\left(1-\frac{3}{4}Zr+\frac{1}{8}Z^2r^2-\frac{1}{192}Z^3r^3\right)$
	1	2	$4p$	$\frac{1}{16}\sqrt{\frac{5}{3}}Z^{\frac{5}{2}}r^2e^{-\frac{Z}{4}r}\left(1-\frac{1}{4}Zr+\frac{1}{80}Z^2r^2\right)$
	2	1	$4d$	$\frac{1}{64\sqrt{5}}Z^{\frac{7}{2}}r^3e^{-\frac{Z}{4}r}\left(1-\frac{1}{12}Zr\right)$
	3	0	$4f$	$\frac{1}{768\sqrt{35}}Z^{\frac{9}{2}}r^4e^{-\frac{Z}{4}r}$

b) $l=0, 1, 2, 3$ 的角向部分

l	m	$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
	±1	$\pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta-\frac{1}{2}\right)$
	±1	$\pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi}$
	±2	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}$
3	0	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta)$
	±1	$\pm\frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{\pm i\varphi}$
	±2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}\sin^2\theta\cos\theta e^{\pm 2i\varphi}$
	±3	$\pm\frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\sin^3\theta e^{\pm 3i\varphi}$

问题 68　胡尔森(Hulthén)势

在 $l=0$ 的情况下对胡尔森势

$$V(r)=-V_0\frac{e^{-r/a}}{1-e^{-r/a}} \tag{68.1}$$

求解薛定谔方程,并确定能量本征值.

解　采用无量纲变量

$$x=r/a, \tag{68.2a}$$

并引入缩写

$$\alpha^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}a^2>0; \qquad \beta^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2>0, \tag{68.2b}$$

其中取 $\alpha>0$, $\beta>0$. 于是 $\chi(r)=r\psi(r)$ 满足径向微分方程

$$\frac{d^2\chi}{dx^2}+\left(-\alpha^2+\beta^2\frac{e^{-x}}{1-e^{-x}}\right)\chi=0. \tag{68.3}$$

利用变换

$$y=e^{-x} \tag{68.4}$$

使系数函数变为有理的,

$$y^2\frac{d^2\chi}{dy^2}+y\frac{d\chi}{dy}+\left(-\alpha^2+\beta^2\frac{y}{1-y}\right)\chi=0. \tag{68.5}$$

解此方程的边界条件是

$$\chi=0 \quad 在\ y=0\ (r\to\infty); \tag{68.6a}$$

$$\chi=0 \quad 在\ y=1\ (r=0). \tag{68.6b}$$

因此可以设

$$\chi=y^{\alpha}(1-\ )w(y) \tag{68.7}$$

把它代入(68.5)式,则 $w(y)$ 满足如下的超几何方程,

$$\begin{aligned}&y(1-y)w''+[(2\alpha+1)-(2\alpha+3)y]w'\\&-(2\alpha+1-\beta^2)w=0\end{aligned} \tag{68.8}$$

此方程的完全解可写为下式:

$$\begin{aligned}w(y)=&A\ {}_2F_1(\alpha+1+\gamma,\ \alpha+1-\gamma,\ 2\alpha+1;y)\\&+By^{-2\alpha}\ {}_2F_1(-\alpha+1+\gamma,\ -\alpha+1-\gamma,\\&-2\alpha+1;y)\end{aligned} \tag{68.9}$$

其中 $\gamma=\sqrt{\alpha^2+\beta^2}$.

由第一个边界条件(68.6a)式和 $\alpha>0$ 得到 $B=0$. 第二个边界条件需要对 $y=1$ 的附近进行仔细的研究,利用下列恒等式容易做到这一点:

$$\begin{aligned}&{}_2F_1(\alpha+1+\gamma,\ \alpha+1-\gamma,\ 2\alpha'+1;y)\\&=\frac{\Gamma(2\alpha'+1)\Gamma(\varepsilon-1)}{\Gamma(\alpha-\gamma+\varepsilon)\Gamma(\alpha+\gamma+\varepsilon)}\\&\quad\times{}_2F_1(\alpha+1+\gamma,\ \alpha+1-\gamma,\ 2\alpha'+1;1-y)\\&\quad+(1-y)^{\varepsilon-1}\frac{\Gamma(2\alpha'+1)\Gamma(1-\varepsilon)}{\Gamma(\alpha+1+\gamma)\Gamma(\alpha+1-\gamma)}\end{aligned}$$

$$\times {}_2F_1(\alpha-\gamma+\varepsilon,\ \alpha+\gamma+\varepsilon,\ \varepsilon;1-y)$$

其中 $\varepsilon=2(\alpha'-\alpha)$. 此外

$${}_2F_1(a,\ b,\ \varepsilon;1-y)-1\div\frac{ab}{\varepsilon}(1-y)+\cdots,$$

当取 $\varepsilon\to0$ 的极限时，上式第一项在 $y=1$ 处变为

$$\frac{\Gamma(2\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+\gamma)}\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\Gamma(\varepsilon-1)}{\Gamma(\alpha-\gamma+\varepsilon)},$$

此式为有限值的充分和必要条件是

$$\alpha-\gamma=-n;\quad n=0,\ 1,\ 2,\ 3\cdots$$

因为

$$\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\Gamma(\varepsilon-1)}{\Gamma(\varepsilon-n)}=(-1)^{n+1}n!.$$

然而对于恒等式右边的第二项，分母中的因子 $\Gamma(\alpha+1-\gamma)=(-n)!\to\infty$，因此这项变为零，除非 $\alpha-\gamma=0$. 但这时此项变为

$$(1-y)^{-1}\frac{\Gamma(2\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1+\gamma)}\lim_{\varepsilon\to0}\left\{1+\frac{\varepsilon(\alpha+\gamma+\varepsilon)}{\varepsilon}(1-y)+\cdots\right\}\propto(1-y)^{-1},$$

即 $y\to1$ 时上式发散. 因此我们断定当 $n=0$ 时，边界条件(68.6b)是不满足了，因此本征值由下式确定

$$\alpha-\gamma=-n;\quad n=1,\ 2,\ 3\cdots \tag{68.10}$$

相应的(未归一化的)波函数为

$$\chi=e^{-\alpha x}(1-e^{-x})\,{}_2F_1(2\alpha+1+n,\ 1-n,\ 2\alpha+1;e^{-x}). \tag{68.11}$$

在这种情况下，超几何级数退化为变量 e^{-x} 的多项式.

从(68.10)式，得到

$$\alpha=\frac{\beta^2-n^2}{2n} \tag{68.12}$$

因为 $\alpha>0$，所以必须有

$$\beta^2>n^2, \tag{68.13}$$

也就是说，存在一个最小值的势阱，只有超过这个最小值的势阱才

能有能量本征值，即 $\beta^2=1$. 更精确地说，在给定大小的势阱中，(68.13)确定了本征值的数目. 利用(68.2b)式，本征值条件(68.12)式可以写为下列形式

$$E_n=-V_0\left(\frac{\beta^2-n^2}{2n\beta}\right)^2. \tag{68.14}$$

胡尔森势在 r 很小时象库仑势 $V_c=-V_0a/r$，而在 r 很大处势能指数地减小. 因此它对束缚态的"容量"比库仑势 V_c 小. 两个势的比较见图 39(取 $\beta^2=30$)，库仑势画在图的左边，胡尔森势画在右边. 图 39 表明，库仑势中的能级总是低于胡尔森势中相应的能级. 胡尔森势仅能容纳有限数目的能级. 在我们的例子中有五个能级.

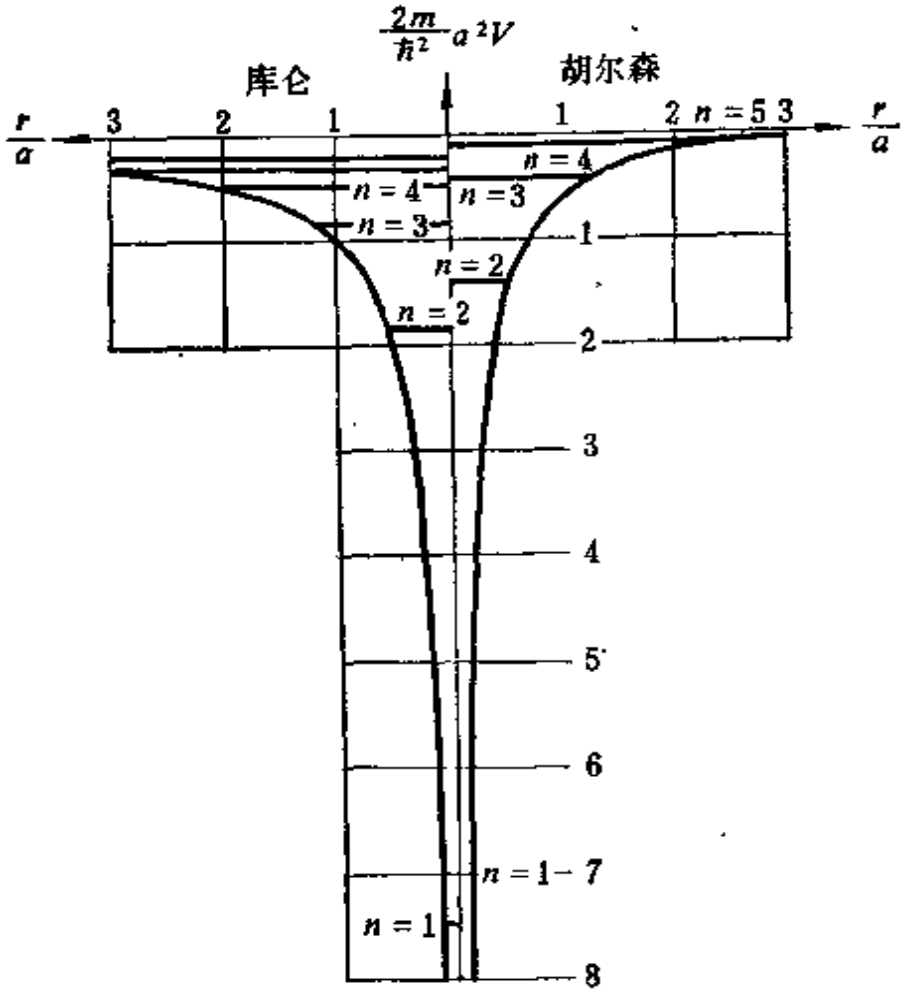


图 39　具有同样奇异性的库仑势和胡尔森势的比较，注意能级的移动

问题 69　克拉策尔(Kratzer)分子势

为了研究双原子分子的转动-振动谱，克拉策尔曾采用具有最小值 $V(a)=-D$ (图 40)的势

$$V(r)=-2D\left(\frac{a}{r}-\frac{1}{2}\frac{a^2}{r^2}\right). \tag{69.1}$$

设两个原子中的一个比另一个重得多(例如在 HI 中)，因此它可被认为是静止的，并选为坐标中心．(否则就必须解等价的单体问题，参考问题 150.)

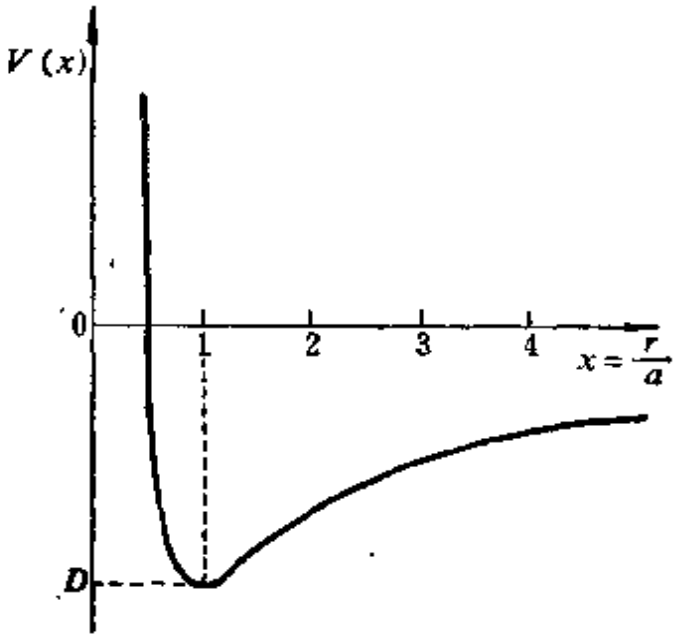


图 40　克拉策尔的分子势

解　质量为 m 的轻原子的运动满足薛定谔方程

$$\nabla^2 u+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E+2D\left(\frac{a}{r}-\frac{1}{2}\frac{a^2}{r^2}\right)\right]u=0. \tag{69.2}$$

它的解可以分解为

$$u=\frac{1}{r}\chi_l(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi). \tag{69.3}$$

利用无量纲缩写

$$x=\frac{r}{a};\quad \beta^2=-\frac{2ma^2}{\hbar^2}E;\quad \gamma^2=\frac{2ma^2}{\hbar^2}D \tag{69.4}$$

其中 $\gamma>0$，对于束缚态，实数 $\beta>0$，我们得到径向函数 χ_l 所满足的微分方程为

$$\frac{d^2\chi_l}{dx^2}+\left[-\beta^2+\frac{2\gamma^2}{x}-\frac{\gamma^2+l(l+1)}{x^2}\right]\chi_l=0. \qquad (69.5)$$

此微分方程在 $x=\infty$ 处具有非正则奇点，在那里束缚态的归一化解具有 $e^{-\beta x}$ 的行为．此外方程在 $x=0$ 处具有奇点，那里 $\chi_l\propto x^\lambda$，指数 λ 由下列特征方程确定

$$\lambda(\lambda-1)=\gamma^2+l(l+1).$$

在这个二次方程的两个解中，我们需要正的那一个：

$$\lambda=\frac{1}{2}+\sqrt{\gamma^2+\left(l+\frac{1}{2}\right)^2} \qquad (69.6)$$

而排除另一个(根号前有负号的)．当 $\lambda>1$ 时，波函数在 $r=0$ 处为零，相当于在两原子之间有强的排斥力(图 40)．因此可以合理地设

$$\chi_l(r)=x^\lambda e^{-\beta x}f(x). \qquad (69.7)$$

把(69.7)式代入(69.5)式得到

$$xf''+(2\lambda-2\beta x)f'+(-2\lambda\beta+2\gamma^2)f=0 \qquad (69.8)$$

用变量 $z=2\beta x$ 代替 x，上式化为库末方程，它的解是合流超几何级数

$$f={}_1F_1\left(\lambda-\frac{\gamma^2}{\beta},\ 2\lambda;\ 2\beta x\right). \qquad (69.9)$$

现在对负能量、正能量两种情况分别进行讨论．

a) **负能量** 对于束缚态，$\beta>0$，任意归一化的解是

$$\chi_l=x^\lambda e^{-\beta x}\ {}_1F_1\left(\lambda-\frac{\gamma^2}{\beta},\ 2\lambda;\ 2\beta x\right). \qquad (69.10)$$

当 x 值较大时，此合流级数和 $e^{2\beta x}$ 成比例，因此若级数 ${}_1F_1$ 没有中断，则当 $x\to\infty$ 时 χ_l 将指数地发散．若 ${}_1F_1$ 中断成多项式，则在 $x\to\infty$ 时，$\chi_l\to 0$，χ_l 就变成可归一化了．因此必须有

$$\lambda-\frac{\gamma^2}{\beta}=-v;\quad v=0,\ 1,\ 2,\cdots \qquad (69.11)$$

此关系确定了分立本征值 β，从而给出分立能级

$$E=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{\gamma^4}{(v+\lambda)^2}.$$

或利用(69.6)式，写成

$$E=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\gamma^4\left\{v+\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\gamma^2}\right\}^{-2}. \quad (69.12)$$

附带对能级公式作一简要的讨论. 因为对大多数分子来说参数 $\gamma\gg1$，所以我们可以把(69.12)式用 $1/\gamma$ 的幂来展开. 这样得到

$$E=D\left[-1+\frac{2\left(v+\frac{1}{2}\right)}{\gamma}+\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^2}-\frac{3\left(v+\frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^3}\right.$$
$$\left.-\frac{3\left(v+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^3}\cdots\right]. \quad (69.13)$$

若把(69.1)式的 $V(r)$ 在 $r=a$ 处的最小值附近展开

$$V(r)=D\frac{(r-a)^2}{a^2}-D, \quad (69.14)$$

则得到小的谐振动的经典频率为

$$\omega=\sqrt{\frac{2D}{ma^2}}. \quad (69.15)$$

用 ω 和转动惯量

$$\Theta=ma^2 \quad (69.16)$$

代替(69.13)式中的 D 和 γ，得到

$$E=-\frac{1}{2}\Theta\omega^2+\hbar\omega\left(v+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2}{2\Theta}\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$$
$$-\frac{3\hbar^2}{2\Theta}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2-\frac{3\hbar^3}{2\Theta^2\omega}\left(v+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\cdots \quad (69.17)$$

第一项是常数项，并不直接由谱线的频率揭示出来，但是从这些频率可以计算出这一项. 第二项描写谐振动，其中 v 是振动量子数. 第三项中，因为 $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2=l(l+1)+\frac{1}{4}$，所以除去常数项 $\frac{1}{4}\frac{\hbar^2}{2\Theta}$

外，它描写转动惯量为常量的转动．第四项表示势的非谐性所引起的振动能级的降低．第五项表示振动与转动的耦合，也是由势的非谐性引起的．当然，对于较高的量子数，特别是 v，此展开式将变坏，因而不能用于离解点($v\to\infty$)；不过，在那里，此模型在任何情况下都失效，因为在 r 很大和很小时这模型的行为没有物理意义．

最后，由(69.17)式，取 $v=0$，$l=0$，则得分子的离解能

$$E_{\text{离解}}=\frac{1}{2}\Theta\omega^2-\frac{1}{2}\hbar\omega+\frac{\hbar^2}{4\Theta}+\frac{3\hbar^3}{16\Theta^2\omega}\cdots \tag{69.18}$$

b) 正能量 在这种情况下，β 不再是实数，而是纯虚数．用波数 k 表示时，可以写出 $\beta=-ika$，因此 $\beta x=-ikr$．于是，代替解(69.10)式，得到

$$\chi_l=r^{\lambda}e^{ikr}{}_1F_1\left(\lambda-i\frac{\gamma^2}{ka},\ 2\lambda,\ -2ikr\right). \tag{69.19}$$

它也是任意归一化的，并且在 $r=0$ 处也等于零．它的渐近式可以由熟知的公式

$${}_1F_1(a,\ c,\ z)\to e^{-i\pi a}\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)}z^{-a}+\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}a^zz^{a-c}$$

来确定．对于沿着正虚轴割开的整个复 z 平面，上式成立．将此式应用于(69.19)式，通过一些冗长的计算得到

$$\chi_l\to C_l\cos\left(kr+\frac{\gamma^2}{ka}\log 2kr-\frac{\lambda\pi}{2}-\eta_l\right) \tag{69.20}$$

其中相角 η_l 满足下式

$$e^{2i\eta_l}=\frac{\Gamma\left(\lambda+i\frac{\gamma^2}{ka}\right)}{\Gamma\left(\lambda-i\frac{\gamma^2}{ka}\right)} \tag{69.21}$$

C_l 是一个不大重要的归一化因子．

当两个原子之间的距离很大时，径向波函数(69.20)中除对数项外，是周期性的．此对数项是由于势(69.1)在大距离上渐近于

库仑势的结果(参见问题 111). 如果将克拉策尔势理解为两个离子之间的相互作用，每一个离子的电荷为 e，则 $2Da=e^2$ 并且 $\gamma^2/ka=e^2/\hbar v$(v 是速度). 因而(69.20)中的对数项的确和库仑场中的对数项一致.

注 克拉策尔势即使对于 $l>0$ 也能得出精确解，因此，在量子力学的早期阶段，它曾起过相当大的作用. 然而它比起莫尔斯(Morse)势来物理思想太少了. 莫尔斯势更简单些，但足够给出现象的概观. 下面两个问题将讨论莫尔斯势. 至少对于束缚态，结果可以与克拉策尔势的相比较.

文献 Kratzer, A: Z. Physik **3** 289(1920)(经典的处理)——Fues. E.: Ann. Physik **80** 367(1926)(量子力学处理).

问题 70 莫尔斯(Morse)势

莫尔斯势

$$V(r)=D(e^{-2\alpha x}-2e^{-\alpha x});\qquad x=\frac{r-r_0}{r_0} \tag{70.1}$$

极好地描述了二原子分子的振动. 试解薛定谔方程求 $l=0$ 的束缚态. 下表列出的三种典型分子的数据，可用来进行定量的讨论. M 是两个原子的约化质量. 为了和光谱学的习惯一致，用 cm^{-1} 作为能量单位.

分　子	$\frac{\hbar^2}{2Mr_0^2}$ cm^{-1}	D cm^{-1}	α
H_2	60.8296	38292	1.440
HCl	10.5930	37244	2.380
I_2	0.0374	12550	4.954

$$E(\mathrm{eV})=E(\mathrm{cm}^{-1})\times 1.2398\times 10^{-4}$$

解 我们首先对莫尔斯势(见图 41)作一简短的评论.

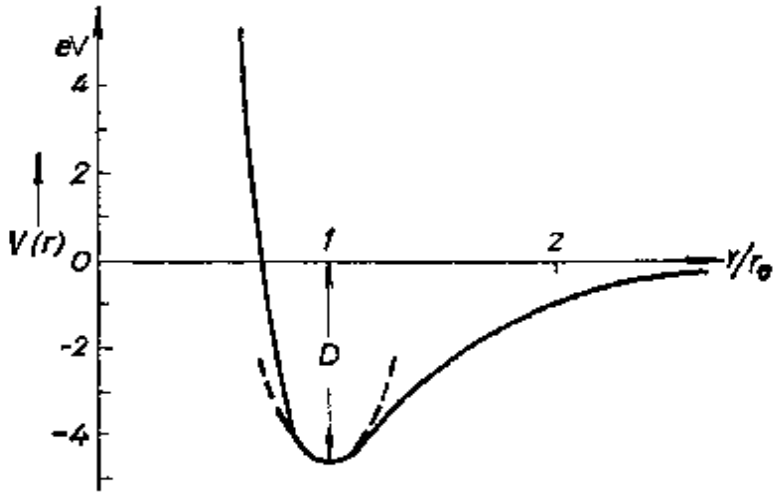


图 41　HCl 的莫尔斯势．折线：密切抛物线

在大距离处是吸引力，在 $x=0$ 或 $r=r_0$ 处达到最小值 $-D$，但是当两原子核更接近时就产生一个强的排斥力．在 $x=0$ 的附近，势可以作级数展开

$$V(r)=D(-1+\alpha^2x^2\cdots)=-D+\frac{1}{2}M\omega^2(r-r_0)^2+\cdots$$

其中

$$\omega^2=\frac{2D\alpha^2}{Mr_0^2}. \tag{70.2}$$

因此，对于低能的振动，可以预料能谱和谐振子的差不太多．

$$E(v)=-D+\hbar\omega\left(v+\frac{1}{2}\right);\quad v=0,\ 1,\ 2,\cdots \tag{70.3}$$

其中 v 是振动量子数，如果计及(70.2)式中略去的非简谐项，则能级只是近似等距离的，并且随着能量的增加而越来越密．

现在写出 $l=0$ 的薛定谔径向方程，用变量 x 代替 r，并采用缩写

$$\beta^2=-\frac{2MEr_0^2}{\hbar^2}>0;\quad \gamma^2=\frac{2MDr_0^2}{\hbar^2} \tag{70.4}$$

规定 $\beta>0$，$\gamma>0$．于是得到

$$\frac{d^2\chi_0}{dx^2}+(-\beta^2+2\gamma^2e^{-\alpha x}-\gamma^2e^{-2\alpha x})\chi_0=0. \tag{70.5}$$

为了使微分方程中的系数是有理函数，必须用 $e^{-\alpha x}$ 的某个简单函数作为变数．如果采用

$$y=\zeta e^{-\alpha x};\qquad \zeta=\frac{2\gamma}{\alpha} \tag{70.6}$$

则方程变得特别简单

$$y^2\chi_0''+y\chi_0'+\left(-\frac{\beta^2}{\alpha^2}+\frac{\gamma}{\alpha}y-\frac{1}{4}y^2\right)\chi_0=0$$

它在 $y=0$ 和 $y=\infty$ 处有奇点；由上式可得，在 $y=0$ 的附近，χ_0 和 y^λ 成比例，并且 $\lambda=\pm\beta/\alpha$，而在 $y=\infty$ 处，$\chi_0\sim e^{\pm y/2}$. 因此若设

$$\chi_0=y^{\beta/\alpha}e^{-\frac{1}{2}y}F(y)$$

并采用两个参数

$$c=2\beta/\alpha+1;\quad a=c/2-\gamma/\alpha, \tag{70.7}$$

则 $F(y)$ 所满足的正是标准形式的库末合流超几何微分方程，因此(70.5)式的完全解变为

$$\chi_0=y^{\beta/\alpha}e^{-\frac{1}{2}y}\{A_1\,{}_1F_1(a,\ c;y)+A_2y^{1-c}{}_1F_1(a-c+1,\ 2-c;y)\}. \tag{70.8}$$

为了满足 $r\to\infty$ 或 $y=0$ 时 $\chi_0=0$ 的边界条件，常数 A_2 必须为零，因为 y 的指数为

$$\frac{\beta}{\alpha}+1-c=-\frac{\beta}{\alpha}$$

是负的. 常数 A_1 由归一化来确定.

由第二个边界条件，即在 $r=0$ 处 $\chi_0=0$，亦即在 $x=-1$ 或者在

$$y=y_0=\zeta e^{\alpha} \tag{70.9}$$

处 $\chi_0=0$，得出一个确定能量本征值的关系式：

$${}_1F_1(a,\ c;y_0)=0. \tag{70.10}$$

这是一个复杂的超越方程，一看就知道精确求解是很困难的，但是对于一切实际的分子，参数 α 和 γ 的特殊数值，允许得到一个非常简单而又很好的近似.

在附表中，列出三种典型分子的一些数值，它们是从上面给出的数据导出的. 在所有的情况中 $y_0\gg1$. 为了利用合流函数(70.10)式的渐近级数，$|y_0|$ 必须比参数 $|a|$ 和 $|c|$ 都大. 按照

	γ	a	ζ	y_0	y_0/ζ	G
H_2	25.09	1.440	34.9	147	4.22	5.6
HCl	59.30	2.380	49.8	539	10.80	270
I_2	579.51	4.954	234	33200	142	31240

(70.7)式，a 和 c 都与 β 有关，也就是说都依赖于能量的本征值，而能量本征值到目前为止还没有被确定．然而，我们知道

$$-D<E<0 \text{ 或 } 0<\beta<\gamma, \tag{70.11}$$

因为在束缚态中能量必定是负的，而且不能低于势能的最小值．这个条件使参数 a 和 c 被限制在下面的间隔中

$$1<c<1+\zeta \quad 和 \quad \frac{1}{2}(1-\zeta)<a<\frac{1}{2} \tag{70.12}$$

正如上表所示，ζ 总是比 y_0 小很多，即使在最不利的氢分子的情况下，也是如此．因此完全可以取适用于实数 y_0 的渐近展开式：

$${}_1F_1(a,\ c;\ y_0)=e^{-i\pi a}\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)}y_0^{-a}+\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}e^{y_0}y_0^{a-c}=0 \tag{70.13}$$

将 $c=\zeta+2a$ 和 $y_0=\zeta e^{\alpha}$ 代入(70.13)中，上式可以写为

$${}_1F_1(a,\ \zeta+2a;\ \zeta e^{\alpha})=\Gamma(\zeta+2a)e^{-a(\alpha+\log\zeta)}\left\{\frac{e^{-i\pi a}}{\Gamma(\zeta+a)}\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\Gamma(a)}e^{\zeta(e^{\alpha}-\alpha-\log\zeta)}\right\}=0$$

或

$$\Gamma(a)=-e^{i\pi a}\Gamma(a+\zeta)e^{\zeta(e^{\alpha}-\alpha-\log\zeta)} \tag{70.14}$$

现在 $a+\zeta>\frac{1}{2}(1+\zeta)>\frac{1}{2}$．根据上面的表，即使对于氢 ζ 也是如此之大，以致 $a+\zeta>17.95$．因此我们能够对 $\Gamma\left(\frac{1}{2}(1+\zeta)\right)$ 应用斯特令公式，得到

$$|\Gamma(a)|>\sqrt{2\pi}\,e^{G}, \tag{70.15}$$

其中

$$G=\frac{1}{2}\zeta\log\left[\frac{1}{2}(1+\zeta)\right]-\frac{1}{2}(1+\zeta)+\zeta(e^{\alpha}-\alpha-\log\zeta)$$

这个量可以计算出来，而与本征值的任何进一步的知识无关，并且已经在上表的最后一行中给出．即使在最不利的氢分子的情况下，此 G 值也给出 $|\Gamma(a)|>675$．因此，在所有情况下 $|\Gamma(a)|$ 都很大，并且接近于在负整数处 Γ 函数 $\left(\text{因为 } a<\frac{1}{2}\right)$ 的奇点之一，

$$a=-v;\quad v=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{70.16}$$

然而，它不是 v 的无穷系列，因为条件 $a>\frac{1}{2}(1-\zeta)$ 使得 v 有一个上限

$$v<\frac{1}{2}(\zeta-1). \tag{70.17}$$

从(70.16)和(70.7)，现在得到，

$$-\beta^2=-\gamma^2+2\gamma\alpha\left(v+\frac{1}{2}\right)-\alpha^2\left(v+\frac{1}{2}\right)^2,$$

因此，能量用振动量子数 v 表示为

$$E(v)=-D+\frac{\hbar^2}{2Mr_0^2}\left\{2\alpha\gamma\left(v+\frac{1}{2}\right)-\alpha^2\left(v+\frac{1}{2}\right)^2\right\}. \tag{70.18}$$

上式的头两项和谐振子的公式(70.3)完全一样，因为

$$\frac{\hbar^2}{2Mr_0^2}\cdot 2\,\alpha\gamma=\hbar\omega.$$

最后一项反映了非谐修正．若此公式写成

$$E(v)=-D+\hbar\omega\left\{\left(v+\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{\zeta}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2\right\} \tag{70.19}$$

则条件(70.17)表明非谐项不可能超过简谐项．

文献　这个势首先被 Morse, P. M. 采用; Phys. Rev. **34**, 57(1929)．也可看下一个问题的末尾．

问题 71　莫尔斯公式的转动修正

分子的转动能比起振动能来小得多，因此，在前一问题中略去转动能．如要计及转动能，则可以用微扰论来处理或者用一个近

似势来代替离心势，在近似势中要包含前一问题的常数β和γ而又不会引入新的严重的数学困难.下面研究后面这种简单的方法.

解 若$l\neq 0$，在径向薛定谔方程的势上，必须加上离心势

$$V'=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \tag{71.1}$$

利用上题的符号，可将它写成

$$V'(r)=\frac{l(l+1)}{\gamma^2}D(r_0/r)^2, \tag{71.2}$$

对于在数值上与r_0相近的r，只要l本身不是大得不合理，则$V'(r)$比D小得多.即使在氢分子这种不利的情况下，γ也只比25稍大一些，这时只要l比25小就行；因此，在所有实际情况中，可以把离心势看作很小的修正.

此外，原子核之间的距离当然不是一个常量，但是，正如详细研究本征函数(70.8)所表明的，即使对于较高的振动能级，r偏离平衡位置r_0也不很远(经典的反向点在$x^2=(2v+1)/\gamma\alpha^2\ll 1$处).因此，如果将(71.1)式在$r=r_0$附近展成$x=(r-r_0)/r_0$的幂级数，也就是说

$$\begin{aligned}V'&=\frac{l(l+1)}{\gamma^2}D\frac{1}{(1+x)^2}\\&=\frac{l(l+1)}{\gamma^2}D(1-2x+3x^2-4x^3+\cdots),\end{aligned} \tag{71.3}$$

则取前几项已经足够.我们现在用下面的势来代替$V'(r)$

$$\tilde{V}'(r)=\frac{l(l+1)}{\gamma^2}D(C_0+C_1e^{-\alpha x}+C_2e^{-2\alpha x}) \tag{71.4}$$

其中

$$C_0=1-\frac{3}{\alpha}+\frac{3}{\alpha^2};\quad C_1=\frac{4}{\alpha}-\frac{6}{\alpha^2};\quad C_2=-\frac{1}{\alpha}+\frac{3}{\alpha^2}. \tag{71.5}$$

这两个表示式(71.3)和(71.4)仅在x^3项才开始有差别，因为展开(71.4)得到下列级数

$$\overline{V}' = \frac{l(l+1)}{\gamma^3} D\left\{1-2x+3x^2-\left(3\alpha-\frac{2}{3}\alpha^2\right)x^3+\cdots\right\}.$$

用势 $\overline{V}'$ 代替真实的离心势 V' 时，$l\neq 0$ 的径向薛定谔方程变为

$$\frac{d^2\chi_l}{dx^2}+(-\beta_1^2+2\gamma_1^2 e^{-\alpha x}-\gamma_2^2 e^{-2\alpha x})\chi_l=0 \qquad (71.6)$$

其中

$$\begin{aligned}\beta_1^2&=\beta^2+l(l+1)C_0;\\ \gamma_1^2&=\gamma^2-\frac{1}{2}l(l+1)C_1;\\ \gamma_2^2&=\gamma^2+l(l+1)C_2.\end{aligned} \qquad (71.7)$$

此微分方程差不多和(70.5)式相同，只是 β_1 替换了 β，γ_1、γ_2 替换了 γ. 因此，可用同样的步骤来解这个方程. 引入新变量

$$y=\zeta_2 e^{-\alpha x};\quad \zeta_2=\frac{2\gamma_2}{\alpha} \qquad (71.8)$$

和常数

$$\tilde{c}=\frac{2\beta_1}{\alpha}+1;\quad \tilde{a}=\frac{1}{2}\tilde{c}-\frac{\gamma_1^2}{\alpha\gamma_2}, \qquad (71.9)$$

得到解

$$\chi_l=y^{\beta_1/\alpha}e^{-\frac{1}{2}y}{}_1F_1(\tilde{a},\ \tilde{c};\ y) \qquad (71.10)$$

以及确定本征值的方程

$${}_1F_1(\tilde{a},\ \tilde{c};\ \tilde{y}_0)=0 \qquad \text{其中 } \tilde{y}_0=\zeta_2 e^{\alpha}. \qquad (71.11)$$

所有关于上题方程 (70.10) 的近似处理的定性考虑，在此仍旧有效，因为常数 $\tilde{a}$、$\tilde{c}$ 和 a、o 仅差一个很小的修正. 因此，

$$\tilde{a}=-v;\quad v=0,\ 1,\ 2,\ 3,\cdots \qquad (71.12)$$

并且按(71.9)式，有

$$-\beta_1^2=-\left[\frac{\gamma_1^2}{\gamma_2}-\alpha\left(v+\frac{1}{\alpha}\right)\right]^2. \qquad (71.13)$$

于是能量公式中的 γ 必须用下式替换

$$\frac{\gamma_1^2}{\gamma_2}\simeq\gamma\left[1-l(l+1)\ \frac{C_1+C_2}{2\gamma^2}\right],$$

并且在(71.13)式的左边必须用 β_1^2 代替 β^2. 根据(71.7)式,得到结果:

$$\begin{aligned}-\beta^2=&-\gamma^2+2\alpha\gamma\left(v+\frac{1}{2}\right)-\alpha^2\left(v+\frac{1}{2}\right)^2\\&+l(l+1)(C_0+C_1+C_2)-\frac{\alpha}{\gamma}\left(C_1+C_2\right)\left(v+\frac{1}{2}\right)l(l+1)\\&-\frac{(C_1+C_2)^2}{4\gamma^2}l^2(l+1)^2.\end{aligned}$$

利用(71.5)给出的、用 α 来表示的三个 C_i,最后得到能量公式为

$$\begin{aligned}E=\frac{\hbar^2}{2Mr_0^2}\Big\{&-\gamma^2+2\alpha\gamma\left(v+\frac{1}{2}\right)-\alpha^2\left(v+\frac{1}{2}\right)^2\\&+l(l+1)-\frac{3(\alpha-1)}{\alpha\gamma}\left(v+\frac{1}{2}\right)l(l+1)\\&-\frac{9(\alpha-1)^2}{4\alpha^4\gamma^2}l^2(l+1)^2\Big\}.\end{aligned}\qquad(71.14)$$

此公式第一行中的三项和前一问题中导出的完全一样:势深($-D$),简谐的和非简谐的振动项. 第二行由三个附加项组成:第一项是原子核距离固定为 r_0 时的转动能,第二项是转动和振动的耦合能,它是负的,因为对于较高的振动量子数,势的非谐性使原子核的平均距离增加而超过 r_0,最后一项也是负的,因为即使与振动无关,但较大的转动量子数会使平均距离增大.

注 Flügge, S., Walger, P., Weiguny, A., 曾经讨论过莫尔斯势的推广和它对双原子分子振动的实际应用,参见: J. Molec. Spectrosc. **23**, 243 (1967).

问题 72 汤川势阱

设两粒子(例如两核子)之间的作用是汤川型的吸引势,

$$V(r)=-V_0\frac{e^{-r/a}}{r/a},\qquad(72.1)$$

对于 $l=0$，试用带有里兹参数 α 的近似波函数

$$u=\frac{1}{r}\chi(r) \quad \text{其中} \quad \chi=Cre^{-\alpha r} \tag{72.2}$$

通过变分步骤求最优解. 使束缚态可能存在的最小势阱值是多少？（在质心系中，可以应用约化质量为 m^* 的单粒子薛定谔方程，参见问题 150）.

解 首先确定常数 C. 由归一化条件

$$\int_0^\infty dr\,\chi^2=1.$$

得到

$$C=2\alpha^{\frac{3}{2}}. \tag{72.3}$$

可以算出能量 E 为下面两个积分之和

$$E_{动}=\frac{\hbar^2}{2m^*}\int_0^\infty dr\left(\frac{d\chi}{dr}\right)^2;$$

$$E_{势}=-V_0\int_0^\infty dr\,\frac{e^{-r/a}}{r/a}\chi^2. \tag{72.4}$$

利用欧勒积分，得出

$$E=\frac{\hbar^2}{2m^*}\alpha^2-V_0\frac{4a^3\alpha^3}{(1+2a\alpha)^2}. \tag{72.5}$$

引入无量纲的缩写

$$2a\alpha=p; \quad \frac{2m^*a^2}{\hbar^2}V_0=K \tag{72.6}$$

上面第一式给出势阱的平均半径和波函数之比，而另一式表示阱的大小. 于是方程(72.5)式可以写为

$$\frac{E}{V_0}=\frac{1}{4K}p^2-\frac{p^3}{2(1+p)^2}. \tag{72.7}$$

用 p 代替 α 作为变分参数，最优解可从

$$\frac{dE}{dp}=0 \quad 或 \quad K=\frac{(1+p)^3}{p(p+3)} \tag{72.8}$$

得到. 将(72.8)代入(72.7)式，得到最适能量值为

$$E=-V_0\frac{p^3(p-1)}{4(p+1)^3} \tag{72.9}$$

因为按定义 p 是正数，所以束缚态仅在 $p>1$ 或根据 (72.8) 式，$K>2$ 时存在. 因此在近似情况下，这是存在束缚态所必需的最小势阱值.

根据(72.8)和(72.9)式计算得到下列数值.

p	K	$-E/V_0$	p	K	$-E/V_0$
1.00	2.000	0	1.50	2.32	0.0270
1.05	2.025	0.0017	1.60	2.39	0.0349
1.10	2.050	0.0036	1.70	2.46	0.0438
1.15	2.08	0.0058	1.80	2.54	0.0532
1.20	2.11	0.0081	1.90	2.62	0.0633
1.30	2.18	0.0135	2.00	2.70	0.0740
1.40	2.24	0.0198	2.50	3.12	0.1364

注　如果用稍复杂一些的函数

$$\chi'=C'r^2e^{-\alpha r};\quad C'^2=\frac{4}{3}\alpha^2$$

来代替试探函数(72.2)，则近似程度更好. 用与前面同样的推导方法得出

$$K=\frac{2(p+1)^5}{3p^3(p+5)}\quad 和\quad E=-V_0\frac{p^5(p-3)}{8(p+1)^5}.$$

于是束缚态显然仅对于 $p>3$ 亦即 $K>\left(\frac{4}{3}\right)^4=3.16$ 时存在.

问题 73　X 射线的同位素移动

在重原子中，K 电子轨道的均方根半径约比核半径 R 大 100 倍. 因此，它的能量由于原子核的有限大小将有一个很小的改变. 试对于电荷均匀分布的原子核计算此微扰能. 并利用核半径的公式

$$R=r_0A^{1/3};\quad r_0=1.2\times10^{-13}\text{cm} \tag{73.1}$$

对于铊(Z=81)的两个原子量为 $A=203$ 和 $A=205$ 的同位素，确定

其 X 射线 K 边的同位素移动，计算中可忽略 K 电子的屏蔽.

解 在原子核场中一个电子的势能为

$$V(r)=\begin{cases}-\dfrac{Ze^2}{r} & r>R,\\ \dfrac{Ze^2}{R}\left(\dfrac{r^2}{2R^2}-\dfrac{3}{2}\right) & r<R.\end{cases} \tag{73.2}$$

首先对于点原子核($R=0$)的非微扰问题有：

$$V_0=-\frac{Ze^2}{r}\quad \text{遍及整个空间}$$

$$u_0=\frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi}}e^{-\gamma r};\quad \gamma=Z\ \frac{me^2}{\hbar^2};\quad E_0=-\frac{1}{2}Z^2\frac{me^4}{\hbar^2} \tag{73.3}$$

其中 $u_0(r)$和 E_0是开普勒问题(看问题 67)中的基态波函数和能量. 于是微扰势为差

$$V-V_0=\begin{cases}0 & r>R,\\ \dfrac{Ze^2}{R}\left(\dfrac{r^2}{2R^2}-\dfrac{3}{2}+\dfrac{R}{r}\right) & r<R.\end{cases} \tag{73.4}$$

因此能量改变为：

$$\begin{aligned}\Delta E=E-E_0&=\int d\tau\, u_0^2(V-V_0)\\ &=4\pi\int_0^R dr\, r^2\,\frac{\gamma^3}{\pi}e^{-2\gamma r}\,\frac{Ze^2}{R}\left(\frac{r^2}{2R^2}-\frac{3}{2}+\frac{R}{r}\right).\end{aligned} \tag{73.5}$$

指数函数的变量 $2\gamma r$ 在积分范围内始终小于 $2\gamma R\simeq 0.02$，因此在(73.5)式中可取 $e^{-2\gamma r}\simeq 1$. 用 r/R 作积分变量，通过初等运算可得如下简单结果：

$$\begin{aligned}\Delta E&=\frac{2}{5}\gamma^3 Ze^2R^2=\frac{2}{5}Z^4\frac{e^2}{a_0}\left(\frac{R}{a_0}\right)^3\\ &=\frac{4}{5}Z^2|E_0|\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\end{aligned} \tag{73.6}$$

其中 $a_0=\hbar^2/(me^2)$是玻尔半径.

对于 $Z=81$，方程(73.3)给出

$$E_0 = -Z^2 \cdot 13.60\text{eV} = -88.3\text{keV} \tag{73.7}$$

根据(73.1)和(73.6)式，得出对于 $A=203$ 的总的改变 ΔE 是

$$\Delta E = |E_0| \cdot 0.935 \times 10^{-4} = 8.25\text{eV}. \tag{73.8}$$

同位素移动，即 $A=203$ 和 $A+\Delta A=205$ 的两个 ΔE 之差，可通过微分得到：

$$S = \frac{d\Delta E}{dR} \cdot \frac{dR}{dA} \cdot \Delta A = \frac{2}{3} \frac{\Delta A}{A} \Delta E.$$

对于现在的例子，上式给出

$$S = 0.00656\,\Delta E = 6.14 \times 10^{-7} |E_0| \tag{73.9}$$

虽然根据(73.8)式，K壳层能量的绝对值向较长波长的方向有一个约为 $\Delta E/E \sim 10^{-4}$ 的显著的移动，但根据(73.9)式，两个相邻同位素的差值效应 S/E (若足够大，可由X射线 K 谱线的分裂观测到)却变得小于百万分之一.

注　当然，屏蔽效应比这些能量改变要大得多，不过它对两个同位素是一样的. 实际上，铊(Tl)的 K 边的位置在 6310 里德伯或 85.9 keV 处，而不是(73.7)式的非屏蔽的值. 同位素分裂几乎和这个修正无关.

问题 74　μ 子原子的基态

对于和前题中一样的原子核($Z=81$)，试计算处在 $1s$ 态的 μ 子原子的结合能. a)为什么同样的微扰方法不能用于 μ 子原子的情况？ b)代替它的将是变分法，尝试波函数选为

$$u = C(1+\alpha\gamma)e^{-\alpha\gamma}, \tag{74.1}$$

其中 α 是里兹参数.

解　a) μ 子的质量 μ 为电子质量 m 的 207 倍. 因此，代替电子原子的长度和能量单位

$$a_1 = \frac{\hbar^2}{m e^2} = 5.29 \times 10^{-9}\text{ cm}; \quad E_1 = \frac{m e^4}{\hbar^2} = 27.2\text{eV},$$

我们得到 μ 子原子的单位为

$$\tilde{a}_1=\frac{m}{\mu}a_1=2.56\times10^{-11}\,\mathrm{cm};\quad \tilde{E}_1=\frac{\mu}{m}E_1=5.63\,\mathrm{keV} \tag{74.2}$$

在无微扰的情况下(点原子核),电子轨道的平均半径是 a_1/Z,而 μ 子原子轨道的平均半径为 $\tilde{a}_1/Z$,即在各自的单位中,两者都是 $1/Z=1.236\times10^{-2}$. 另一方面,原子核的半径 $R=7.05\times10^{-13}\,\mathrm{cm}$,在电子单位中变成 1.33×10^{-4},在 μ 子单位中变成 2.75×10^{-3}. 这样一来,电子轨道半径比原子核半径约大 100 倍,而 μ 子轨道半径约为原子核半径的 1/2. 因此 μ 子将主要地停留在核内,而电子则在核外,μ 子波函数由核内的振子势决定,而电子波函数(如前一问题中用于微扰计算的)由核外的库仑势决定.

这种几何尺寸大小的情况在能量值上反映出来. 对于电子,比值 $\Delta E/|E_0|=\frac{4}{5}Z^2(R/a_1)^2=0.935\times10^{-4}$ [见方程(73.8)],对于 μ 子则必须用 $\frac{4}{5}Z^2(R/\tilde{a}_1)^2=3.98$ 来代替,因此能量的"微扰"不再比无微扰时的能量小很多,而是大得多.

b) 在原子核内,是谐振子势

$$V_0(r)=\frac{Ze^2}{2R^3}(r^2-3R^2), \tag{74.3}$$

它的基态波函数(参见问题 65)为

$$u_0(r)=\left(\frac{\mu\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2} \tag{74.4a}$$

其中

$$\omega^2=\frac{Ze^2}{\mu R^3} \tag{74.4b}$$

并且能量为

$$E_0=\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{3Ze^2}{2R}. \tag{74.4c}$$

解(74.4a)对于小的 r 值是近似正确的,这时它可展为级数,

$$u_0=\left(\frac{\mu\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\left(1-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2+\cdots\right). \tag{74.5}$$

另一方面，对于大的 r 值，实际的势趋于零，而不是象(74.3)那样变成无穷大，因此正确的波函数由下列因子控制：

$$e^{-\varkappa r} \quad \text{其中} \quad \varkappa^2=\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}, \tag{74.6}$$

这个因子的减小比(74.4b)慢得多．现在将尝试函数(74.1)展开，得到

$$u=C\left(1-\frac{\alpha^2}{2}r^2+\cdots\right),$$

与(74.5)式比较，可以预期，只要 α^2 值在 $\mu\omega/\hbar$ 附近，这种选择就是可能的．另一方面，替代(74.6)式，在尝试函数中有如 $e^{-\alpha r}$ 的渐近行为．这肯定比(74.4a)更接近于真实的波函数，但是只有当 $\alpha\simeq\varkappa$ 时，这才是一个合理的近似．

在 μ 子单位中，由 (74.4b, c) 式，我们得到 $\omega=1.98\times10^3$ 和 $E_0=-1.46\times10^3$，因此根据(74.6)式，$\varkappa=54$．假如，为了使函数(74.4a)和(74.1)在 r 很小时一致，取 $\alpha^2=\mu\omega/\hbar$，则在 μ 子单位中我们得到 $\alpha=\sqrt{\omega}=44.5$．此值与 $\varkappa=54$ 相差不大．因此可以预期尝试函数(74.1)式与真实波函数相当接近．

可以指出，下面导出的 α^2 的最优值是 $\alpha\simeq64$ 和 $\varkappa\simeq60$.

从现在起采用 μ 子单位($\mu=1$, $\hbar=1$, $e=1$)来计算近似能量．由(74.1)式的归一化得到

$$C^2=\frac{\alpha^3}{7\pi}. \tag{74.7}$$

动能的期待值为

$$E_{动}=-\frac{1}{2}\int d\tau u\nabla^2u=\frac{3}{14}\alpha^2. \tag{74.8}$$

势能

$$E_{势}=4\pi\int_0^R dr\ r^2u^2\frac{Z}{2R}\left(\frac{r^2}{R^2}-3\right)-4\pi\int_R^\infty dr r^2u^2\frac{Z}{r}$$

的计算稍微麻烦一些．然而采用无量纲的量

$$2\alpha r=x;\quad 2\alpha R=\lambda \tag{74.9}$$

并借助广义欧勒积分

$$\int_\lambda^\infty dx\, x^n e^{-x} = n! e^\lambda \left(1+\lambda+\frac{1}{2!}\lambda^2+\cdots+\frac{1}{n!}\lambda^n\right),$$

就可以用很基本的方法算出势能积分，结果是

$$E = \frac{3}{56R^3}\left[\lambda^2 + ZRf(\lambda)\right] \tag{74.10}$$

其中

$$f(\lambda) = \left(\frac{216}{\lambda^3}-28\right) - e^{-\lambda}\left(\frac{216}{\lambda^3}+\frac{216}{\lambda}+80+14\lambda+\lambda^2\right). \tag{74.11}$$

里兹条件

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0$$

给出

$$\left.\begin{aligned} &\frac{1}{ZR} = \frac{e^{-\lambda}}{\lambda^4}\left[216e^\lambda - \varphi(\lambda)\right] \\ &\text{其中} \\ &\varphi(\lambda) = 216+216\lambda+108\lambda^2+33\lambda^3+6\lambda^4+\frac{1}{2}\lambda^5. \end{aligned}\right\} \tag{74.12}$$

从 (74.12) 式可确定 λ，当 $ZR=2.23$ 时，得到 $\lambda\simeq 3.5$，这时能量最小值约为 $E=-1808\,\mu$ 子单位或 $E=-10.18\,\mathrm{MeV}$.

文献 这个问题和较好的修正，曾经由 Flügge, S., Zickendraht, W. 作过较详细的讨论: Z. Physik **143** 1 (1955).

问题 75 氘核的有心力模型

设想中子-质子相互作用为有心力势

$$V(r) = -Ae^{-r/a}. \tag{75.1}$$

试对于 $l=0$ 的束缚态(氘核)解等效单体问题的薛定谔方程(参见问题 150). 正如实验所确定的，仅存在一个结合能为

$$E = -2.23\,\mathrm{MeV}$$

的束缚态，试在 $a=2\,\mathrm{fm}$ ($1\,\mathrm{fm}=10^{-13}\,\mathrm{cm}$) 附近求给出此 E 值的 A 与 a 之间的关系. 试用下列三种方法来求这关系:

a）薛定谔方程的精确解

b）利用波函数

$$\tilde{u}=\frac{C}{r}\ (e^{-\gamma r}-e^{-2\gamma r})$$

通过适当选择 γ 使它对于大 r 值具有正确的渐近行为

c）利用单参数的指数函数组的简化里兹方法

a）精确解 对于 $l=0$ 设

$$u=\frac{1}{r}\ \chi(r) \tag{75.2}$$

等效单体问题的薛定谔方程为

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{2m^*}{\hbar^2}\ (E+Ae^{-r/a})\chi=0 \tag{75.3}$$

这里 $m^*=\frac{1}{2}m$ 是约化质量(假设两个核子的质量相等) 利用新变量

$$y=e^{-r/2a} \tag{75.4}$$

得到

$$\frac{d^2\chi}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d\chi}{dy}+\left(c^2-\frac{q^2}{y^2}\right)\chi=0 \tag{75.5}$$

其中缩写

$$c^2=\frac{8m^*}{\hbar^2}Aa^2;\quad q^2=-\frac{8m^*}{\hbar^2}Ea^2>0. \tag{75.6}$$

方程(75.5)是贝塞耳微分方程,其通解为

$$\chi=C_1J_q(cy)+C_2J_{-q}(cy). \tag{75.7}$$

根据(75.4)式, $y=0$ 相当于 $r=\infty$, 这时 χ 必须是零. 因此 $C_2=0$, 波函数变成

$$u=\frac{C_1}{r}\ J_q(ce^{-r/2a}). \tag{75.8}$$

另一方面, $y=1$ 相当于 $r=0$, 这时 u 必须是有限的,因此给出

$$J_q(c)=0 \tag{75.9}$$

现在由给定的 m^* 和 E 的数值，从(75.6)式得到

$$q=0.458a;\quad A=2.23c^2/q^2 \tag{75.10}$$

这里 a 的单位是费米 (fm)，A 的单位是 MeV. 对于任何给定的 a 值，从(75.10)式可以确定 q 的值. 然后从 (75.9) 式求得 c，最后，再从(75.10)得到势深 A. 在(75.9)中必须取 J_q 的最小的零点，因为它将给出最小的 A 值，亦即给出只具有一个束缚态的势阱. A 和 a 的数值列在附表中①.

q	a	c	A
0.2	0.436	2.707	409
0.4	0.873	2.999	125
0.6	1.310	3.283	67.0
0.8	1.747	3.560	44.5
0.9	1.963	3.696	37.5
1.0	2.180	3.832	32.7
1.1	2.40	3.966	28.1
1.2	2.62	4.099	26.1
1.4	3.05	4.363	21.7

b) 近似解　波函数

$$\tilde{u}=\frac{C}{r}\left(e^{-\frac{qr}{2a}}-e^{-\frac{qr}{a}}\right) \tag{75.11}$$

在 $r=0$ 处有有限值

$$u(0)=C\frac{q}{2a},$$

对于大的 r 值，$\tilde{u}$ 指数下降：

$$\exp\left(-\frac{qr}{2a}\right)=\exp\left(-r\sqrt{\frac{2m^*\ E}{\hbar^2}}\right),$$

并具有正确的衰减长度. 从

$$4\pi\int_0^\infty dr\,r^2\tilde{u}(r)^2=1$$

① 方程(75.9)的解取自 Jahnke-Emde-Lösch: 函数表.

求得归一化常数 C:

$$C=\sqrt{\frac{3q}{2\pi a}}. \tag{75.12}$$

现在利用薛定谔的变分原理(参见问题 2),用这个波函数来确定能量的期待值:

$$E=4\pi\int_0^\infty dr\, r^2\left\{\frac{\hbar^2}{2m^*}(du/dr)^2-Ae^{-r/a}u^2\right\}. \tag{75.13}$$

将(75.8)式的精确解代入(75.13)式的积分中,就得到精确的本征值 E. 若用(75.11)式的近似函数 $\tilde{u}$ 代入,则得到近似本征值 $\tilde{E}$. 根据一般规则,$\tilde{E}$ 值稍高于精确值.

将(75.11)式代入(75.13)式,基本的计算给出

$$E=\frac{\hbar^2}{4m^*a^2}q^2-6A\left\{\frac{1}{1+\frac{1}{q}}-\frac{2}{\frac{3}{2}+\frac{1}{q}}+\frac{1}{2+\frac{1}{q}}\right\} \tag{75.14}$$

以上面得到的 $a=2.18$fm 和 $A=32.7$MeV 为例,得到 $\tilde{E}=-2.18$ MeV即比正确的本征值 $E=-2.23$MeV 高约 2.5%. 另一方面,若要由 (75.14) 式 (取 $q=1$, $a=2.18$) 得到正确值 $E=-2.23$ MeV, 则必须选取 $\tilde{A}=33.5$MeV, 即需要取比势深 $A=32.7$MeV 较深一些的 $\tilde{A}$ 值.

c) 里兹近似 我们采用具有里兹参数 α 的归一化尝试波函数

$$\bar{u}=\sqrt{\frac{\alpha^3}{8\pi a^3}}e^{-\frac{\alpha r}{2a}} \tag{75.15}$$

参数 α 的确定是使 (75.13) 式的 E 取极小值. 将 (75.15) 代入 (75.13), 经初等积分计算得到

$$\bar{E}=\frac{\hbar^2}{8m^*a^2}\alpha^2-\frac{A}{(1+\alpha)^3}\alpha^3 \tag{75.16}$$

$\bar{E}$ 取极小值的条件是

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial \alpha}=\frac{\hbar^2}{4m^*a^2}\alpha-\frac{3A}{\alpha^3\left(1+\dfrac{1}{\alpha}\right)^4}=0$$

或

$$\frac{(\alpha+1)^4}{\alpha}=\frac{12m^*a^2A}{\hbar^2} \tag{75.17}$$

当 $a=2.18\,\mathrm{fm}$ 和 $A=32.7\,\mathrm{MeV}$ 时，(75.17) 式的右边等于 22.3，这给出 $\alpha=1.34$，按照 (75.16) 式，并以 $\hbar^2/8m^*a^2=2.21\,\mathrm{MeV}$ 代入，得到：

$$\bar{E}=3.97\,\mathrm{MeV}-6.15\,\mathrm{MeV}=-2.18\,\mathrm{MeV},$$

这再次表明，近似值高于精确值。

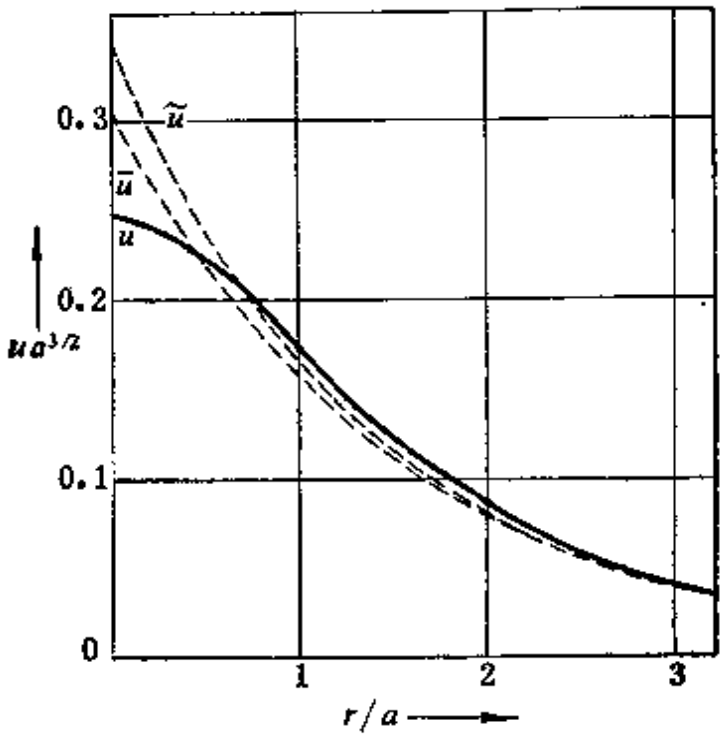


图 42　有心力氘核模型的精确波函数和两个近似波函数

图 42 中示出具有正确归一化的三个波函数 u（精确的），$\tilde{u}$ 和 $\bar{u}$（对于 u，归一化系数只能用数值计算法来求）。在小 r 值处，两个近似波函数对精确的波函数有大的偏离。然而，这对归一化和能量积分的影响相当小，因为在体积元中的 r^2 因子通过积分消去了。在大的 r 值处，这个偏离，由于 $\tilde{u}$ 和 $\bar{u}$ 的值比 u 小而得到补

偿. 这三条曲线之间的渐近行为差别不大:

$$ua^{3/2}\simeq\bar{u}a^{3/2}\to 0.308\,e^{-x}/x;\quad \tilde{u}a^{3/2}\to 0.346\,e^{-x}/x$$

其中 $x=r/(2a)$.

问题 76 有心力势的动量空间波函数

证明: 在寻常空间波函数中的球谐函数的分离, 允许在动量空间中作同样的变量分离.

解 在傅里叶变换

$$u(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3k\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}f(\boldsymbol{k}), \tag{76.1}$$

$$f(\boldsymbol{k})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u(\boldsymbol{r}) \tag{76.2}$$

中, 假定 u 是可以分离变量的:

$$u(\boldsymbol{r})=\frac{1}{r}\chi_l(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi). \tag{76.3}$$

为了从(76.2)式求得 $u(\boldsymbol{r})$的傅里叶变换, 我们将指数部分展开成角度 γ 的球谐函数, 此 γ 角是在 θ, φ 方向上的矢量 $\boldsymbol{r}$ 和在 Θ, Φ 方向上的矢量 $\boldsymbol{k}$ 之间的夹角(参见问题 81):

$$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=\sum_{\lambda=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2\lambda+1)}\,i^{-\lambda}\frac{j_\lambda(kr)}{kr}Y^*_{\lambda,0}(\cos\gamma). \tag{76.4}$$

利用球谐函数的加法定理

$$Y_{\lambda,0}(\cos\gamma)=\sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}}\sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda}Y^*_{\lambda,\mu}(\Theta,\Phi)Y_{\lambda,\mu}(\theta,\varphi) \tag{76.5}$$

可用 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 的极角来表示 $Y_{\lambda,0}(\cos\gamma)$, 把 (76.5) 式代入 (76.4) 式, 再把由此得到的结果和(76.3)式代入(76.2)中, 得到

$$f(\boldsymbol{k})=\frac{4\pi}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int_0^\infty dr\,r^2\oint d\Omega_r\sum_{\lambda\mu}i^{-\lambda}\frac{j_\lambda(kr)}{kr}$$

$$\times Y_{\lambda\mu}(\Theta,\Phi)Y^*_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\frac{\chi_l}{r}Y_{l,m}(\theta,\varphi).$$

对矢量 $\boldsymbol{r}$ 的所有方向求积分，得到：

$$\oint d\Omega_r Y^*_{\lambda,\mu}(\theta,\ \varphi) Y_{l,m}(\theta,\ \varphi) = \delta_{l,\lambda}\delta_{m\mu},$$

因此，两个求和号仅留下一项 $(l,\ m)$：

$$kf(\boldsymbol{k}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, i^{-l}\int_0^\infty dr\, j_l(kr)\,\chi_l(r) Y_{l,m}(\Theta,\ \Phi).$$

亦即动量空间函数 $f(\boldsymbol{k})$ 可以分离变量为

$$f(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{k} g_l(k) Y_{lm}(\Theta,\ \Phi), \tag{76.6}$$

其中

$$g_l(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, i^{-l}\int_0^\infty dr\, j_l(kr)\,\chi_l(r) \tag{76.7}$$

因此径向部分 $g_l(k)$ 和 $i^{-l}\chi_l(r)$ 互为汉克尔积分变换，(76.7) 式的逆变换是

$$\chi_l(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, i^{l}\int_0^\infty dk j_l(kr)\, g_l(k) \tag{76.8}$$

假如根据几率解释用通常方法把空间函数 u 归一化，则

$$\int_0^\infty dr\,|\chi_l(r)|^2 = 1, \tag{76.9}$$

把(76.8)代入(76.9)，得到

$$\frac{2}{\pi}\int_0^\infty dr\int_0^\infty dk\int_0^\infty dk' j_l(kr)\, g_l(k)\, j_l(k'r)\, g_l^*(k') = 1.$$

先对 r 求积分，

$$\int_0^\infty dr\, j_l(kr) j_l(k'r) = \frac{\pi}{2}\delta(k-k'), \tag{76.10}$$

因此得到

$$\int_0^\infty dk\,|g_l(k)|^2 = 1, \tag{76.11}$$

也就是说，同样的几率解释在动量空间中存在：在所考虑的量子态中，发现粒子动量的绝对值处在 k 和 $k+dk$ 之间的几率是

$|g_l(k)|^2dk$.

问题 77　有心力势的动量空间积分方程

在问题 14 中已建立了动量空间波函数的一般积分方程. 试证明对于有心力场,解可以分离变量为

$$f(\boldsymbol{k})=\frac{1}{k}g_l(k)Y_{l,m}(\Theta,\Phi). \tag{77.1}$$

然后对于氢原子导出 $g_l(k)$的积分方程.

解　积分方程(14.6)用原子单位可写为

$$\left(\frac{1}{2}k^2-E\right)f(\boldsymbol{k})=-\int d^3k'W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')f(\boldsymbol{k}') \tag{77.2}$$

其中

$$W(\boldsymbol{k})=\frac{1}{8\pi^3}\int d^3x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r}). \tag{77.3}$$

若 $V(\boldsymbol{r})$ 仅与矢量 $\boldsymbol{r}$ 的绝对值 r 有关, 则(77.2)式可简化为 $g_l(k)$ 的径向方程. 在这种情况下,(77.3)可以对立体角积分,结果仅与矢量 $\boldsymbol{k}$ 的绝对值有关:

$$W(k)=\frac{4\pi}{8\pi^3}\int_0^\infty dr\,r^2V(r)\frac{\sin kr}{kr}. \tag{77.4}$$

于是积分方程的核变为下列变量的函数

$$(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')^2=k^2+k'^2-2kk'\cos\gamma, \tag{77.5}$$

其中 γ 是矢量 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}'$ 之间的夹角. 于是函数 W 可展开为勒让德多项式的级数,

$$W(|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(k,k')P_n(\cos\gamma) \tag{77.6}$$

其系数 a_n 仅与绝对值 k, k' 有关. 这是使分离变量成为可能的主要之点.

利用(77.1)式的 $f(\boldsymbol{k})$,积分方程(77.2)现在变为

$$\left(\frac{1}{2}k^2-E\right)\frac{1}{k}g_l(k)Y_{l,m}(\Theta,\ \Phi)$$

$$=-\sum_n\int_0^\infty dk'\,k'^2a_n(k,\ k')\frac{1}{k'}\,g_l(k')\oint d\Omega'\,P_n(\cos\gamma)Y_{l,\ m}(\Theta',\ \Phi').$$

应用加法定理

$$P_n(\cos\gamma)=\frac{4\pi}{2n+1}\sum_{\mu=-n}^{n}Y^*_{n,\mu}(\Theta',\ \Phi')\,Y_{n,\mu}(\Theta,\ \Phi)$$

可以求得角部分的积分，它使得求和项中仅留下 $n=l$, $\mu=m$ 的一项：

$$\left(\frac{1}{2}k^2-E\right)\frac{1}{k}\,g_l(k)\,Y_{lm}(\Theta,\Phi)$$

$$=-\frac{4\pi}{2l+1}\int_0^\infty dk'\,k'\,a_l(k,\ k')\,g_l(k')Y_{l,m}(\Theta,\ \Phi).$$

上式对于极角部分是一个恒等式，这表明分离变量 (77.1) 式是正确的. 余下的部分是径向积分方程

$$\frac{1}{2}(k^2-E)g_l(k)=-\frac{4\pi k}{2l+1}\int_0^\infty dk'\,k'a_l(k,\ k')\,g_l(k') \qquad (77.7)$$

若有心力是氢原子的库仑吸力

$$V(r)=-\frac{1}{r}, \qquad (77.8)$$

则代入(77.4)式，利用极限关系①

$$\lim_{\alpha\to0}\int_0^\infty dx\,e^{-\alpha x}\sin x=1,$$

可以求得

$$W(k)=-\frac{1}{2\pi^2k^2}, \qquad (77.9)$$

按照(77.5)式

$$W(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')=-\frac{1}{2\pi^2|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2}=-\frac{1}{4\pi^2k\,k'(z-\cos\gamma)}$$

其中

① 势的傅里叶变换(77.3)式本质上是玻恩振幅，它的收敛性受 r 值很大时的库仑势行为的限制，参见问题 105 .

$$z=\frac{k^2+k'^2}{2k\,k'}. \tag{77.10}$$

设 $\cos\gamma=t$, 则(77.6)式就是熟知的 $\frac{1}{z-t}$ 的展开式

$$\frac{1}{z-t}=\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)Q_n(z)\,P_n(t) \tag{77.11}$$

其中系数

$$Q_n(z)=\frac{1}{z}\int_{-1}^{+1}\frac{dtP_n(t)}{z-t} \tag{77.12}$$

是第二类勒让德函数. 因此我们得到

$$a_n(k,\,k')=-\frac{1}{4\pi^2kk'}(2n+1)Q_n\left(\frac{k^2+k'^2}{2kk'}\right)P_n(\cos\gamma) \tag{77.13}$$

因此最后得到径向积分方程

$$\left(\frac{1}{2}k^2-E\right)g_l(k)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}dk'\,Q\left(\frac{k^2+k'^2}{2kk'}\right)g_l(k') \tag{77.14}$$

文献 积分方程(77.14)式已由 Fock. V. 解过: Z. Physik **98**, 145 (1935). 这种方法意味着动量空间本征函数的确定不需要求助于坐标空间函数. 然而,后一种方法对于库仑场较简单,将在下一个问题中给出.

问题 78 氢原子的动量空间波函数

试确定氢原子的最低能级 ($1s$, $2s$, $2p$) 的动量空间波函数.

解 因为在问题 76 中已经证明, 在有心力场中, 一个可分离变量的坐标波函数

$$u(r)=\frac{1}{r}\chi_l(r)\,Y_{l,m}(\theta,\,p) \tag{78.1}$$

导致一个可分离变量的动量空间波函数

$$f(\boldsymbol{k})=\frac{1}{k}g_l(k)\,Y_{l,m}(\Theta,\,\Phi), \tag{78.2}$$

我们只需要确定径向部分 $g_l(k)$, 它由 $\chi_l(r)$的汉克尔变换给出:

$$g_l(k)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,i^{-l}\int_0^\infty dr\,j_l(kr)\,\chi_l(r). \tag{78.3}$$

在原子单位中，对于所选的三个态有：

$1s$: $\chi_{10}(r)=2re^{-r}$,

$$g_{10}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,2\int_0^\infty dr\,r\sin kre^{-r};$$

$2s$: $\chi_{20}(r)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(r-\frac{1}{2}r^2\right)e^{-\frac{r}{2}}$,

$$g_{20}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty dr\left(r-\frac{1}{2}r^2\right)\sin kre^{-\frac{r}{2}};$$

$2p$: $\chi_{21}(r)=\frac{1}{\sqrt{24}}r^2e^{-\frac{r}{2}}$,

$$g_{21}=-i\frac{1}{\sqrt{12\pi}}\int_0^\infty dr\,r^2\left(\frac{\sin kr}{kr}-\cos kr\right)e^{-\frac{r}{2}}.$$

求这些积分值是不难的，但稍微麻烦一些．结果是

$$g_{10}(k)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{4k}{(1+k^2)^2}; \tag{78.4a}$$

$$g_{20}(k)=\frac{32}{\sqrt{\pi}}\frac{k(1-4k^2)}{(1+4k^2)^3}; \tag{78.4b}$$

$$g_{21}(k)=-i\frac{128}{\sqrt{3\pi}}\frac{k^2}{(1+4k^2)^3} \tag{78.4c}$$

所有三种情况都满足下列归一化条件：

$$\int_0^\infty dk\,|g_{nl}(k)|^2=1, \tag{78.5}$$

对于(78.4a–c)的每一个函数都可以直接检验上式，但也可以从一般的理论得到上式，参见(76.11)式．

问题 79　三维转子的斯塔克效应

对于一个具有电偶极矩 p 的三维自由转子，用二级微扰近似

来计算斯塔克效应.

解 以球谐函数为解的无微扰的薛定谔方程是:

$$\frac{\hbar^2}{2\Theta} L^2 Y_{l,m} = E_l Y_{l,m} \tag{79.1}$$

其本征值是

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta}. \tag{79.2}$$

对于一个沿任意方向的电场 $\mathscr{E}$，微扰能量是

$$V = -p(\mathscr{E}_x \sin\theta\cos\varphi + \mathscr{E}_y \sin\theta\sin\varphi + \mathscr{E}_z \cos\theta). \tag{79.3}$$

为了求得 V 的矩阵元

$$\langle l',\ m'|V|l,\ m\rangle = \oint d\Omega\, Y^*_{l'm'} V(\theta,\ \varphi)\, Y_{l,m}, \tag{79.4}$$

利用关系式①

$$\begin{aligned}
&\sin\theta e^{i\varphi} Y_{l,m} = a_{l,m} Y_{l+1,m+1} - a_{l-1,-m-1} Y_{l-1,m+1},\\
&\sin\theta e^{-i\varphi} Y_{l,m} = -a_{l,-m} Y_{l+1,m-1} + a_{l-1,m-1} Y_{l-1,m-1},\\
&\cos\theta Y_{l,m} = b_{l,m} Y_{l+1,m} + b_{l-1,m} Y_{l-1,m}
\end{aligned} \tag{79.5}$$

其中缩写

$$\begin{aligned}
a_{l,m} &= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}};\\
b_{l,m} &= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}
\end{aligned} \tag{79.6}$$

然后，利用球谐函数的正交归一化规则，我们发现对于任意给定的一对量子数 l, m 只有六个矩阵元不为零，即

$$\langle l+1,\ m+1|V|l,\ m\rangle = -\frac{1}{2}(\mathscr{E}_x - i\mathscr{E}_y) p a_{l,m},$$

$$\langle l-1,\ m+1|V|l,\ m\rangle = +\frac{1}{2}(\mathscr{E}_x - i\mathscr{E}_y) p a_{l-1,-m-1},$$

① 参见 Bethe, H. A., Salpeter, E. E.; p. 422, *Encyclopedia of Physics*, Vol.35, Berlin-Göttingen-Heidelberg; Springer 1957.

$$\langle l+1,\ m-1|V|l,\ m\rangle = +\frac{1}{2}(\mathscr{E}_x+i\mathscr{E}_y)pa_{l,-m},$$
$$\langle l-1,\ m-1|V|l,\ m\rangle = -\frac{1}{2}(\mathscr{E}_x+i\mathscr{E}_y)pa_{l-1,m-1} \tag{79.7}$$
$$\langle l+1,\ m|V|l,\ m\rangle = -\mathscr{E}_z pb_{l,m},$$
$$\langle l-1,\ m|V|l,\ m\rangle = -\mathscr{E}_z pb_{l-1,m}.$$

在这些矩阵元中间不存在对角元 $l=l'$. 这表示一级微扰为零，因此我们得不到线性斯塔克效应：

$$\Delta_1 E_l = \langle l,\ m\ V|l,\ m\rangle = 0. \tag{79.8}$$

不仅如此，甚至矩阵元 $\langle l,\ m'|V|l,\ m\rangle$ 也等于零，所以不存在 l 相等 m 不同的简并函数的混合. 因此我们不需要从球谐函数的线性组合出发.

二级斯塔克效应来自二级微扰

$$\Delta_2 E_{l,m} = \sum_{l'm'} \frac{|\langle l',\ m'\ V|l,\ m\rangle|^2}{E_l - E_{l'}}. \tag{79.9}$$

这是一个包括六项的求和，按照 (79.7) 式，其中分母用 (79.2) 代入，则得

$$\Delta_2 E_{l,m} = p^2\frac{2\Theta}{\hbar^2}\left\{\frac{1}{4}(\mathscr{E}_x^2+\mathscr{E}_y^2)\left[\frac{a_{l,m}^2+a_{l,-m}^2}{l(l+1)-(l+1)(l+2)}\right.\right.$$
$$\left.+\frac{a_{l-1,-m-1}^2+a_{l-1,m-1}^2}{l(l+1)-(l-1)l}\right]+\mathscr{E}_z^2\left[\frac{b_{l,m}^2}{l(l+1)-(l+1)(l+2)}\right.$$
$$\left.\left.+\frac{b_{l-1,m}^2}{l(l+1)-(l-1)l}\right]\right\}. \tag{79.10}$$

利用(79.6)式，把几项直接加起来，最后结果为：

$$\Delta_2 E_{l,m} = \frac{p^2\Theta}{2\hbar^2}(2\mathscr{E}_z^2-\mathscr{E}_x^2-\mathscr{E}_y^2)\frac{l(l+1)-3m^2}{(2l+3)(2l-1)l(l+1)} \tag{79.11}$$

这个公式不包含 $l=0$. 这是明显的，由于本征函数 Y_{00} 是各向同性的，因此微扰能量简单地和 $\mathscr{E}^2$ 成正比. 与上述的计算类似，

(79.7) 式的六个矩阵元中只有三个矩阵元 $\langle 1, m'|V|0, 0\rangle$, $m'=+1, 0, -1$ 不等于零. 最后结果变成

$$\Delta_2 E_{0,0}=-\frac{p^2\Theta}{3\hbar^2}\mathscr{E}^2. \tag{79.12}$$

文献 Meyenn, K. Z. Physik **231** 154(1970). 文中讨论了强度更高的场, 并给出二级微扰理论的适用范围.

b) 弹性散射问题

问题 80 入射波和散射波的干涉

散射问题的波函数必须满足渐近的边界条件 (所谓索末菲辐射条件).

$$u\to e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\qquad \text{当 } kr\to\infty \text{ 时.} \tag{80.1}$$

试证明, 在远离散射体处, 此条件导致入射流和散射流的迭加, 而没有显著干涉. 并推导散射振幅和截面之间的关系.

解 可将(80.1)式的波函数代入流密度公式

$$\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{2im}N(u^*\nabla u-u\nabla u^*), \tag{80.2}$$

其中归一化常数 N 确定流的绝对强度. 在球极坐标中, 梯度的分量为

$$\nabla_r=\frac{\partial}{\partial r};\qquad \nabla_\theta=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta};\qquad \nabla_\varphi=\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

因为 u 与 φ 无关, 所以 $s_\varphi=0$ (这是明显的结果). 通过简单计算, 由(80.2)式得到 $\boldsymbol{s}$ 的其他两个分量为:

$$\begin{aligned}s_r=&\frac{\hbar k}{m}N\left(\cos\theta+\frac{|f|^2}{r^2}\right)\\&+\frac{\hbar}{2m}N\left\{f\left[kr\,(1+\cos\theta)+i\right]\frac{e^{ik(r-z)}}{r^2}\right.\\&\left.+f^*\left[kr(1+\cos\theta)-i\right]\frac{e^{ik(z-r)}}{r^2}\right\};\end{aligned}$$

$$s_\theta = -\frac{\hbar k}{m} N \sin\theta + \frac{\hbar}{2mi} N\left\{(f' - ikr\sin\theta f)\frac{e^{ik(r-z)}}{r^2} - (f^{*\prime} + ikr\sin\theta f^*)\frac{e^{ik(z-r)}}{r^2}\right\} + \frac{\hbar}{2mir^3} N(f' f^* - f f^{*\prime}).$$

这里的"′"表示对 θ 的微分. 因为这公式只对 $kr \to \infty$ 渐近地成立, 所以, 比起与 r^{-2} 成正比的散射强度来, 可以略去与 r^{-3} 成正比的最后一项. 在干涉项的花括号中, 只取具有 kr 的项. 因此, 进一步来讨论余下的较简单的表示式:

$$s_r = \frac{\hbar k}{m} N\left\{\cos\theta + \frac{|f|^2}{r^2} + \frac{1+\cos\theta}{2r}(f e^{ik(r-z)} + f^* e^{ik(z-r)})\right\};$$

$$s_\theta = \frac{\hbar k}{m} N\left\{-\sin\theta - \frac{\sin\theta}{2r}(f e^{ik(r-z)} + f^* e^{ik(z-r)})\right\}. \qquad (80.3)$$

这些公式中的第一项是与 r 无关的. 他们表示在 z 方向上流密度为 $s_0 = \hbar k N/m$ 的平面波的贡献分解成 r 和 θ 分量. 因为 $\hbar k/m = v$ 是粒子速度, 所以 N 是入射流中单位体积元内的粒子数. s_r 的第二项是径向流, 可以认为它相当于散射强度. 在任何观测中, 为了获得有限强度, 我们必须在距离 r 处利用一个其立体角 $d\Omega$ 虽小然而是有限的探测器, 每秒将有数目为

$$\delta S = \int_{\delta\Omega} \frac{\hbar k}{m} N \frac{|f|^2}{r^2} r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} N \int_{\delta\Omega} |f|^2 d\Omega \qquad (80.4)$$

的散射粒子流通过探测器的表面 $r^2\delta\Omega$, 并被计数. 假如这个流用每秒每平方厘米为 $(\hbar k/m)N$ 个粒子的平面波流密度来除, 则得到一个与原来的强度无关、因而表征散射相互作用特性的量

$$\delta\sigma = \int_{\delta\Omega} |f(\theta)|^2 d\Omega \simeq |f(\theta)|^2 \delta\Omega. \qquad (80.5)$$

这个比值具有面积的量纲, 因此称为散射到立体角 $\delta\Omega$ 内的微分

截面. 由此推得总散射截面

$$\sigma=\oint|f(\theta)|^2\,d\Omega \tag{80.6}$$

再来看(80.3)式中的干涉项,它们与 $1/r$ 成正比,初看起来似乎它们比散射强度还重要. 这些项是由随角度缓慢变化和迅速变化的因子组成的. 若它们之中的任何一个对一个虽有限但很小的立体角 $\delta\Omega$ 积分,变化慢的因子(如 $\sin\theta$)可视为常数. 因此,剩下的只是下列类型的积分

$$\int_{\delta\Omega}d\Omega\cos k(r-z)\quad\text{或}\quad\int_{\delta\Omega}d\Omega\sin k(r-z). \tag{80.7}$$

若 kr 非常大,自变量

$$k(r-z)=kr(1-\cos\theta)$$

将使(80.7)中的周期函数,即使对适中的间隔 $\delta\Omega$ 进行积分,也作很多次振荡. 因此,这些积分实际上为零(至少它们的贡献不与 $\delta\Omega$ 成正比). 所以干涉项在 kr 很大的极限情况下完全可以略去,并且入射波流和散射波流可以独立地进行讨论.

关于这点或许应当指出,kr 就是 $2\pi r/\lambda$,其中 λ 是德布罗意波长.后者一般是原子大小的(或者核大小的)数量级,即 10^{-8}cm,然而 r 是在实验室装置中的宏观距离,其数量级至少是 10cm.在这种情况下,我们就有 $kr=6\times10^9$,这的确是非常之大.

问题 81　平面波的分波展开

试将平面波分解为具有确定角动量的分波.

解　平面波

$$u=e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta} \tag{81.1}$$

是薛定谔方程在无力场情况下的解

$$\nabla^2u+k^2u=0;\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{81.2}$$

在球极坐标中,用分离变量法得到上式的完全解是

$$u=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}\{A_{l,m}j_l(kr)+B_{l,m}n_l(kr)\}P_l^m(\theta)e^{im\varphi} \qquad (81.3)$$

其中

$$j_l(kr)=\sqrt{\frac{\pi kr}{2}}J_{l+\frac{1}{2}}(kr);$$

$$n_l(kr)=(-)^{l+1}\sqrt{\frac{\pi kr}{2}}J_{-(l+\frac{1}{2})}(kr). \qquad (81.4)$$

(81.3)式中每一个求和项表示由量子数 l 和 m 确定的角动量的贡献.

在用(81.3)表示平面波(81.1)时,可以立刻作两点简化:

1) 因为(81.1)式与角度 φ 无关,所以只有 $m=0$ 的贡献. 或者从物理上看,一个平行于 z 轴的粒子束,没有沿 z 轴的角动量分量.

2) 在(81.3)中不能有 n_l 的贡献, 因为这些函数在坐标中心不是正则的.

因此,平面波的角动量展开式变为

$$e^{ikr\cos\theta}=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}A_l j_l(kr)P_l(\cos\theta). \qquad (81.5)$$

我们还需要确定系数 A_l. 利用正交归一化关系(其中 $t=\cos\theta$)

$$\int_{-1}^{+1}dt\,P_l(t)\,P_\nu(t)=\frac{2}{2l+1}\delta_{l\nu}, \qquad (81.6)$$

按类似于确定傅里叶系数的方法,能够做到这一点. 这样,方程(81.5)给出

$$\int_{-1}^{+1}dt\,e^{ikrt}P_l(t)=\frac{1}{kr}A_l j_l(kr)\cdot\frac{2}{2l+1} \qquad (81.7)$$

为了由这个方程确定 A_l, 必须计算方程左边的积分,并与方程右边的球贝塞耳函数进行比较. 这种计算,虽然是初等的,但却相当麻烦,幸而我们不用这样做, 因为比较 kr 非常大时(81.7)式两边的表示式就足够了. 于是

$$j_l(kr) \to \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right). \tag{81.8}$$

重复进行分部积分，能够将这积分表示成 kr 的负幂次展开式如下：

$$\int_{-1}^{+1} dt\, e^{ikrt} P_l(t) = \frac{1}{ikr}[e^{ikrt} P_l(t)]_{-1}^{+1} - \frac{1}{ikr}\left\{\frac{1}{ikr}[e^{ikrt} P_l'(t)]_{-1}^{+1} - \frac{1}{ikr}\int_{-1}^{+1} dt e^{ikrt} P_l''(t)\right\}.$$

在渐近情况下，只有第一项是重要的，在第一项中我们取

$$P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l.$$

因此我们得到

$$\int_{-1}^{+1} dt\, e^{ikrt} P_l(t) \to \frac{1}{ikr}(e^{ikr} - (-)^l e^{-ikr}) = i^l \frac{2}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right). \tag{81.9}$$

将(81.8)和(81.9)代入(81.7)中，得到

$$A_l = (2l+1) i^l. \tag{81.10}$$

展开式(81.5)最后变为

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta). \tag{81.11}$$

利用归一化的球谐函数

$$Y_{l,0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l, \tag{81.12}$$

此级数也可写为

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l j_l(kr) Y_{l,0}(\theta). \tag{81.13}$$

方程(81.11)和(81.13)都很有用.

注 1　从方程(81.7)和(81.10)可得球贝塞耳函数的积分表示式

$$j_l(z) = i^{-l} \frac{z}{2} \int_{-1}^{+1} dt\, e^{izt} P_l(t). \tag{81.14}$$

这样的积分表示式常常是由用于我们的特殊问题的方法得到的

注 2. 对于 $m=0$ 有两个不为零的角动量分量 L_x 和 L_y，当然它们和 $L_z=0$ 不能同时对角化. 这反映了经典的图象，是把粒子束分成半径为 ρ 的绕 z 轴的同心圆柱形壳层，在每一层上 L 有确定的值，$L=mv\rho$，但是 L 仍可以分成各种可能的 L_x 和 L_y 分量. 量子化公式 $L\simeq\hbar l$ 给出关系式

$$\rho\simeq\frac{\hbar l}{mv}=l\frac{\lambda}{2\pi},$$

其中 λ 是德布罗意波长，ρ 是距离的粗略量度，在此距离上，量子数为 l 的粒子经过坐标原点.

这样将一个展开项从整个级数中选出来进行讨论，当然是不正确的，因为可观察量不得不由双线性组合 u 和 u^*（或者它们的微商）来得到，因此必然产生干涉项. 只有在大 l 的极限下，单个分波才可以用经典的粒子图象来解释，因为非常高阶的球谐函数产生快速振荡，从而猝灭了干涉项，即使对于窄的角范围取平均也如此.

注 3 设平面波不在 z 方向上传播，而是在其他任意方向 $\boldsymbol{k}$ 上传播，$\boldsymbol{k}$ 由极角 Θ,Φ 来确定. 若 θ' 表示矢量 $\boldsymbol{k}$ 和矢量 $\boldsymbol{r}$ 之间的角度，按照(81.13)式，有

$$e^{ikr}=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l j_l(kr)Y_{l,0}(\theta')$$

利用球谐函数的加法定理

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}Y_{l,0}(\theta')=\sum_{m=-l}^{+l}Y^*_{l,m}(\Theta,\Phi)Y_{l,m}(\theta,\varphi)\qquad(81.15)$$

得到一般的公式

$$e^{ikr}=\frac{4\pi}{kr}\sum_{l=}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}i^l j_l(kr)Y^*_{l,m}(\Theta,\Phi)Y_{l,m}(\theta,\varphi)\qquad(81.16)$$

问题 82　散射振幅的分波展开

设在 $r=R$ 的球内，势为 $V(r)$；在球外势为零. 用平面波描述的一束粒子受到这个势场的散射. 试利用分波级数展开来计算散射振幅，并且利用分波在球面 $r=R$ 上的对数导数来表示散射振幅.

解 在 $r<R$ 的范围内，波函数可以写成

$$u=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}i^l(2l+1)\chi_l(k,\ r)P_l(\cos\theta) \tag{82.1}$$

其中 χ_l 满足

$$\chi_l''+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r}-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]\chi_l=0;$$

$$\chi_l(0)=0. \tag{82.2}$$

除一振幅因子外，这些函数由边界条件决定，因为它们的对数导数

$$L_l=\left(\frac{d\log\chi_l}{d\log r}\right)_{r=R} \tag{82.3}$$

与这振幅因子无关. 下面假设量 L_l 是已知的.

在球 $r=R$ 外面，我们写出

$$u=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}i^l(2l+1)\left[j_l(kr)+\frac{1}{2}\alpha_l h_l^{(1)}(kr)\right]P_l(\cos\theta) \tag{82.4}$$

当所有的 $\alpha_l=0$ 时，这就是问题 81 中的平面波；与第一类球汉克尔函数成正比的项，表示向外的球面波，因为

$$h_l^{(1)}(kr)=j_l(kr)+in_l(kr)\to i^{-(l+1)}e^{ikr}. \tag{82.5a}$$

考虑到 j_l 的渐近行为

$$j_l(kr)\to\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right) \tag{82.5b}$$

则在大距离上，方程(82.4)中的 u 变为

$$u\to\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[(1+\alpha_l)e^{ikr}-(-)^le^{-ikr}\right]P_l(\cos\theta). \tag{82.6}$$

从弹性散射的粒子数守恒可以断定向内波和向外波的振幅的绝对值平方必定相等或者

$$|1+\alpha_l|^2=1 \tag{82.7}$$

换句话说，

$$\alpha_l = e^{2i\delta_l} - 1. \tag{82.8}$$

于是方程(82.6)可以写成更简洁的形式

$$u \to \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{i\delta_l}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)P_l(\cos\theta) \tag{82.9}$$

其中 δ_l 显然是方程(82.2)的解相对于无力场时方程解 (82.5b) 的渐近相移.

散射振幅 $f(\theta)$ 是由散射波 u_s 来定义的

$$u_s \equiv u - e^{ikz} \to f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{82.10}$$

因此

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\alpha_l P_l(\cos\theta) \tag{82.11a}$$

或者利用(82.8)

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta). \tag{82.11b}$$

剩下的问题是不仅用相移 δ_l 表示系数 α_l, 而且要用 (82.3) 的对数导数 L_l 来表示 α_l. 利用 χ_l 和 $d\chi_l/dr$ 经过球面 $r=R$ 时的连续性可以做到这一点, 即

$$\chi_l(k,\ R) = j_l(kR) + \frac{1}{2}\alpha_l h_l^{(1)}(kR);$$

$$\frac{d\chi_l(k,\ R)}{dr} = k\left[j_l'(kR) + \frac{1}{2}\alpha_l h_l^{(1)\prime}(kR)\right]$$

这里的"$'$"表示对自变量 kr 而不是对 r 的微分. 用第一式除第二式, 则得

$$L_l = x\frac{j_l'(x) + \frac{1}{2}\alpha_l h_l^{(1)\prime}(x)}{j_l(x) + \frac{1}{2}\alpha_l h_l^{(1)}(x)}, \quad x = kR \tag{82.12a}$$

或者反过来

$$\alpha_l = -2\frac{L_l j_l(x) - x j_l'(x)}{L_l h_l^{(1)}(x) - x h_l^{(1)\prime}(x)} \tag{82.12b}$$

若 $j_l(x)$ 用

$$j_l(x)=\frac{1}{2}\left[h_l^{(1)}(x)+h_l^{(2)}(x)\right] \tag{82.13}$$

来代替，不难看出(82.12b)满足粒子数守恒定律 (82.7)．因为引入的第二类球汉克尔函数对于实的自变量来说是 $h_l^{(1)}(x)$ 的复共轭，因此在下式中

$$1+\alpha_l=-\frac{L_l h_l^{(2)}(x)-x h_l^{(2)\prime}(x)}{L_l h_l^{(1)}(x)-x h_l^{(1)\prime}(x)} \tag{82.14}$$

分子是分母的复共轭，所以 $|1+\alpha_l|=1$，与(82.7)式一致．

问题 83　低 能 散 射

参数 $x=kR$ 愈小，散射振幅的球谐函数展开式的收敛性就愈好．试通过计算 $x\ll1$ 的系数 α_l 证明这一点．然后假设 α_2 已小得可以忽略，将 α_0 和 α_1 展开为 x 的幂级数．

解　我们从前一个问题的(82.12b)式出发，

$$\alpha_l=-2\frac{L_l j_l(x)-x j_l'(x)}{L_l h_l^{(1)}(x)-x h_l^{(1)\prime}(x)}. \tag{83.1}$$

这里采用定义

$$h_l^{(1)}(x)=j_l(x)+in_l(x);\quad h_l^{(2)}(x)=j_l(x)-in_l(x) \tag{83.2a}$$

将球汉克尔函数表示成 j_l 和 n_l，它们的幂级数展开如下：

$$\begin{aligned} j_l&=A_l x^{l+1}\left[1-\frac{x^2}{2(2l+3)}+\frac{x^4}{8(2l+3)(2l+5)}\cdots\right];\\ n_l&=-B_l x^{-l}\left[1+\frac{x^2}{2(2l-1)}+\frac{x^4}{8(2l-1)(2l-3)}\cdots\right] \end{aligned} \tag{83.2b}$$

其中

$$A_l=\frac{2^l l!}{(2l+1)!};\quad B_l=\frac{(2l)!}{2^l l!} \tag{83.2c}$$

若 $x\ll1$，每一个级数中取第一项已足够；于是我们有 $j_l\ll|n_l|$，和 $h_l^{(1)}\simeq in_l$，因此

$$L_l j_l - x j_l' \simeq (L_l - l - 1) A_l x^{l+1};$$
$$L_l h_l^{(1)} - x h_l^{(1)\prime} \simeq -i(L_l + l) B_l x^{-l}$$

所以从(83.1)式，利用(83.2c)式，得到

$$\alpha_l = -\frac{2i}{2l+1}\left(\frac{2^l l!}{(2l)!}\right)^2 \frac{L_l - (l+1)}{L_l + l} x^{2l+1}. \qquad (83.3)$$

在这个公式中，仅计算了首项，所有 x 的更高次幂都已略去.

散射振幅是

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\alpha_l P_l(\cos\theta); \qquad (83.4)$$

$x \ll 1$ 时，这个级数很快地收敛，因为根据(83.3)式

$$\frac{(2l+3)\alpha_{l+1}}{(2l+1)\alpha_l} = \frac{1}{(2l+1)^2}\frac{L_{l+1} - (l+3)}{L_{l+1} + (l+1)} \cdot \frac{L_l + l}{L_l - (l+1)} x^2 \ll 1.$$

若(83.4)式的收敛性允许略去 $l=2$ 的项，则根据 (83.3) 式，这相当于在散射振幅中略去 x^5 项及所有更高次项. 在这种情况下，利用 (83.2b) 中的两个级数可以将 α_0 和 α_1 展开成包括 x^4 在内的多项式. 然而，从特殊函数

$$h_0^{(1)}(x) = -ie^{ix}; \quad h_1^{(1)}(x) = -\left(1 + \frac{i}{x}\right)e^{ix} \qquad (83.5a)$$

和

$$h_l^{(2)}(x) = h_l^{(1)*}(x) \quad \text{对于实数 } x \qquad (83.5b)$$

出发，可较快地达到同样的目的. 代替(83.1)式，利用前题中的等价方程(82.14)

$$1 + \alpha_l = -\frac{L_l h_l^{(2)}(x) - x h_l^{(2)\prime}(x)}{L_l h_l^{(1)}(x) - x h_l^{(1)\prime}(x)}, \qquad (83.6)$$

得到严格的表示式

$$1 + \alpha_0 = e^{-2ix}\frac{1 + ix/L_0}{1 - ix/L_0} \qquad (83.7a)$$

和

$$1 + \alpha_1 = e^{-2ix}\frac{1 + ix - x^2/(L_1+1)}{1 - ix - x^2/(L_1+1)} \qquad (83.7b)$$

在所要求的近似范围内，上述两表达式的幂级数展开式为

$$\alpha_0=-2ix\left(\frac{L_0-1}{L_0}\right)-2x^2\left(\frac{L_0-1}{L_0}\right)^2$$
$$+\frac{4}{3}ix^3\left[\left(\frac{L_0-1}{L_0}\right)^3-\frac{1}{2L_0^3}\right]$$
$$+\frac{2}{3}x^4\left[\left(\frac{L_0-1}{L_0}\right)^4-\frac{2}{L_0^3}\left(\frac{L_0-1}{L_0}\right)\right]+\cdots \qquad (83.8a)$$

和

$$\alpha_1=-\frac{2}{3}ix^3\frac{L_1-2}{L_1-1} \qquad (83.8b)$$

(α_1 的展开式没有 x^4 的项). 当 $l=1$ 的影响较显著时，为了获得足够的精确度，我们在 (83.8a) 中若不算到第四项，至少也要计算到第三项，因此通常采用严格公式(83.7a)要简单些.

问题 84　在恒定排斥势上的散射

设在 $r<R$ 时势为 $V=V_0>0$，而在 $r>R$ 时 $V=0$. 试确定 $l=0$ 的相移 δ_0 和分波散射截面 σ_0 与入射粒子能量的函数关系.

解　利用缩写

$$K_0^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2};\qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2};\qquad \varkappa=\sqrt{K_0^2-k^2} \qquad (84.1)$$

$l=0$ 的径向波函数 $\chi_0(r)$，可以写为下式：当能量 E 低于阈值 V_0 时，

$$\chi_0(r)=\left\{\begin{array}{ll}A\sinh\varkappa r & r<R\\ \sin(kr+\delta_0) & r>R\end{array}\right\}\text{若 } E<V_0 \qquad (84.2a)$$

当能量 E 高于 V_0，则 $\varkappa=i\varkappa'$ 变为纯虚数

$$\chi_0(r)=\left\{\begin{array}{ll}A'\sin\varkappa' r & r<R\\ \sin(kr-\delta_0) & r>R\end{array}\right\}\text{若 } E>V_0 \qquad (84.2b)$$

不论那一种情况，球形势外部的归一化都是相同的，因此振幅常数 A 和 A' 是球内激发振动程度的量度. 在上述表示式中考虑了边

界条件 $\chi_0(0)=0$, χ_0 和 χ_0' 在 $r=R$ 处的连续性要求对数导数连续,因此它在 $r=R$ 处的值

$$L_0\equiv R\chi_0'(R)/\chi_0(R) \tag{84.3}$$

可由 $r<R$ 或 $r>R$ 的任一表示式作出. 于是我们得到

$$L_0\equiv kR\cot(kR+\delta_0)=\varkappa R\coth\varkappa R \quad 若 E<V_0 \tag{84.4a}$$

和

$$L_0\equiv kR\cot(kR+\delta_0)=\varkappa' R\cot\varkappa' R \quad 若 E>V_0 \tag{84.4b}$$

只有在后一种情况下,内部有一个周期解,它的振幅是有些意义的

$$A'^2=\frac{1}{\sin^2\varkappa' R+\frac{\varkappa'^2}{k^2}\cos^2\varkappa' R}. \tag{84.5}$$

我们首先讨论最低能量时的这些公式. 在 $k\to 0$ 的极限下, $\varkappa$ 可用 K_0 来代替. 为了保持(84.4a)的 L_0 有限,左边余切的自变量必须如同 k 一样趋于零,于是(84.4a)变为

$$L_0=\frac{kR}{kR+\delta_0}=K_0R\coth K_0R,$$

由此得到

$$\delta_0=-kR\left(\frac{\tanh K_0R}{K_0R}-1\right) \tag{84.6}$$

若势的高度 K_0^2 非常大($K_0\to\infty$, 硬球), 对于所有的能量,与 K_0^2 相比, k^2 可略去,因此关系式 $\varkappa=K_0$ 和(84.6)式对所有能量都成立. 这意味着 δ_0 与参数 kR 有线性关系,在图 43 中用直线 (1) 表示. 图 43 中的曲线 (2) 是取 $K_0R=4$ 由(84.4a, b)式计算得到的. 即使在 $kR=0$ 时, 曲线的开头部分也显示出有限高度势的相移曲线的倾角和硬球曲线的倾角不同. 这是量子力学的一个特征, 即甚至在能量低于阈值时,波也会穿入势球内部,贯穿深度与势的高度有关. 在经典力学中,这样的贯穿是不可能的,入射能量低于阈值的散射现象不可能显示出势高度的任何效应.

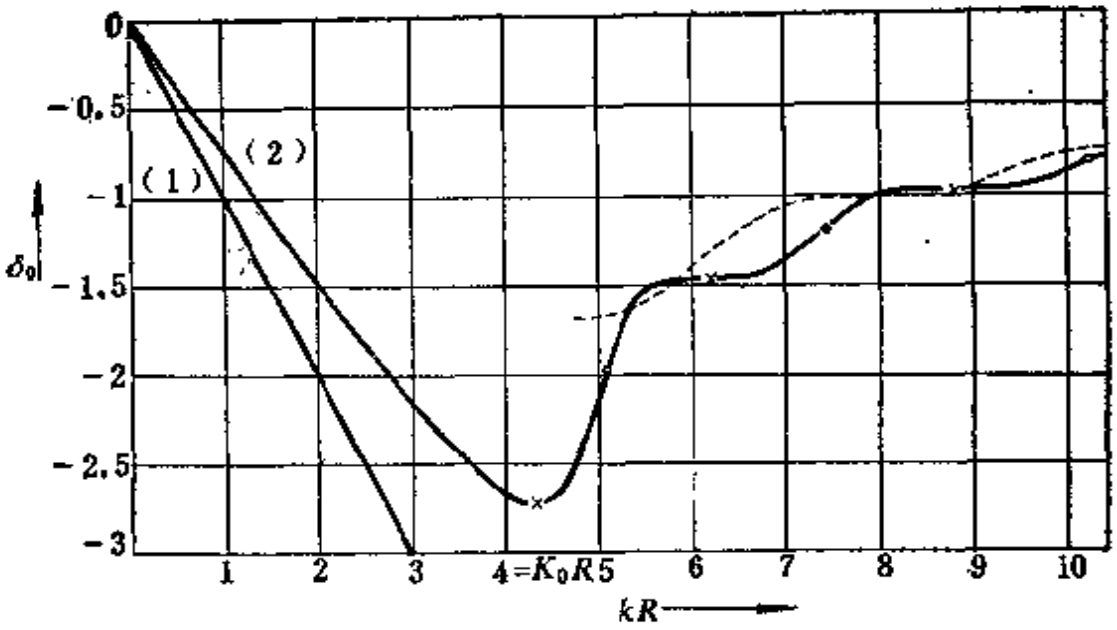


图 43　相移 δ_0 与 kR 的函数关系. 直线(1)适用于硬球($K_0R=\infty$), 曲线 (2) 适用于 $K_0R=4$. 虚线是由一级玻恩近似计算得到的. 共振(振幅极大处)用圈表示,最小振幅用×表示

若能量 E (或参数 kR)增加到高于阈值, 曲线(2)达到δ_0的最小值,然后又开始上升,并在经过几个阶梯后趋向零. 在极高的能量下($kR\to\infty$), δ_0 当然又等于零, 因为 $E\gg V_0$ 时,有限高势垒对 δ_0 的影响变得无关紧要. 形成阶梯的原因可以从计算内部的振幅 A',即(84.5)式来说明. 对于 $K_0R=4$, 这些振幅已在图 44a 中画出. 在一些 kR (即激发起势球内部振动的稳恒粒子束的波长)值处,A' 有极大值. 因此存在着若干波长带, 在这些带中外加的振动使内部引起共振. 任意两个共振之间有一个极小的振幅 $A'=1$, 这时 $\cos\varkappa' R=0$, 即在 $\varkappa' R=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$ 处.

每一个极小的振幅和 L_0 的一个零点重合(如图 44b 所画的), 所以在 $r=R$ 处具有水平切线的波函数在散射球的内外具有同样的振幅. 在这些能量之间有若干共振能量,它们处在 $\varkappa' R=n\pi$ 的邻近或者接近 L_0 的奇异点处. 这时在 $r=R$ 处, 波函数变为零, 但通过这一点切线的倾角并没有破坏, 因此在内部, 由于波长较

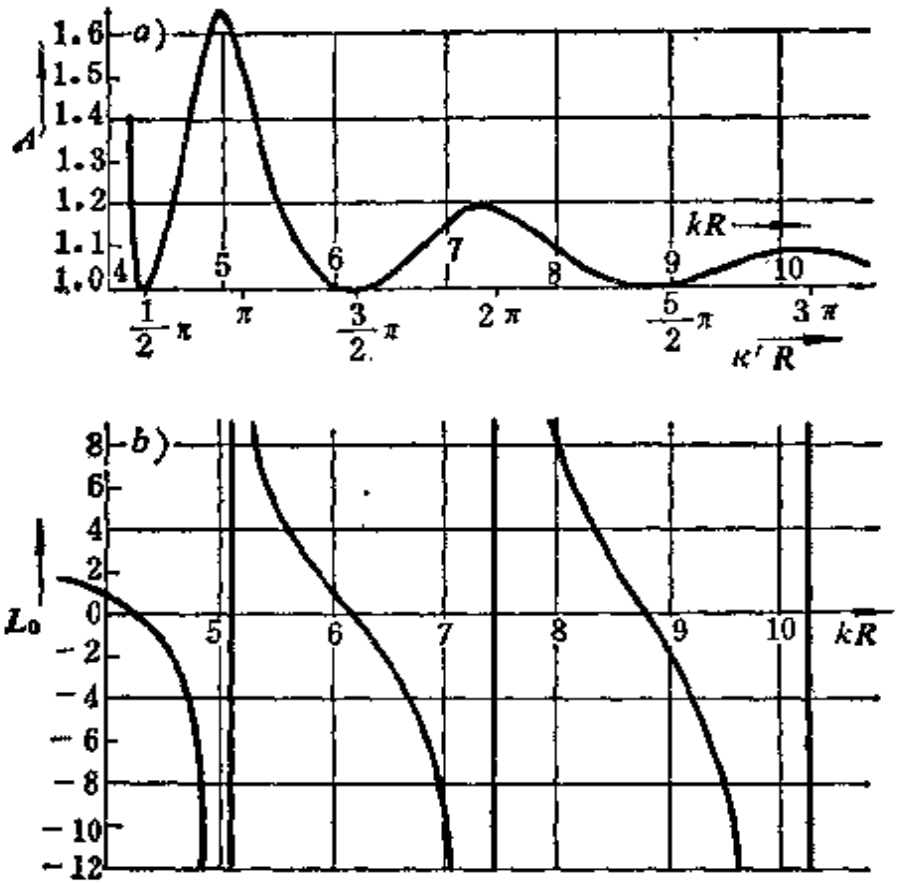


图 44a 和 b　a) 在不同能量，散射障碍物($K_0R=4$)内部波函数的振幅 A' 表明有若干个共振，b) 波函数的对数导数 L_0 表明在共振能量处有奇异性

长，振幅 A' 升到最高的可能值.

现在我们知道这是共振现象的一般规律，就是通过一个共振时，将出现一个 π 的相位跳跃(在理想情况下). 这说明了图 43 中曲线(2)上用 × 标记的振幅极小值，在这些极小值之间，在通过图 43 曲线(2)上的圆圈所标记的共振时，相移有一陡峭的上升.

分波截面

$$\sigma_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 \tag{84.7}$$

作为 kR 的函数，可以很容易地由 δ_0 曲线计算出来. 结果画在图 45 中. 在低能极限中，$kR\to 0$，(84.6)式的 δ_0 变得非常小，因此(84.7)式中的 $\sin\delta_0$ 可以用 δ_0 来代替，并且

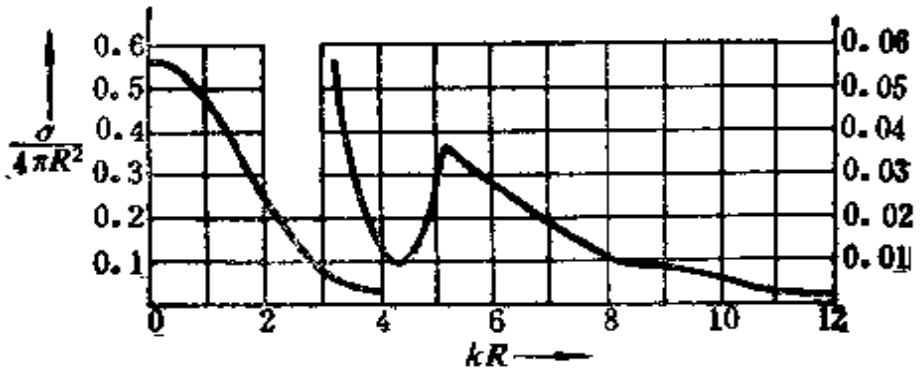


图 45　$l=0$ 的散射截面 σ_0 作为 kR 的函数，用两种不同的标度画出。只有当 $kR\ll 1$ 时才可以忽略较高 l 值的贡献。因此在 $kR=5$ 以上的共振极大值在实验上是很不明显的

$$\sigma_0(0)=4\pi a_0^2;\qquad a_0=R\left(1-\frac{\tanh K_0R}{K_0R}\right)\tag{84.8}$$

由(84.8)式定义的量 a_0 称为势的散射长度。在我们所举的数值例子中，得到 $a_0=0.75K$。(关于散射长度重要性，也可参考问题88)。随着能量的增加，共振显示出对截面的影响，但是在我们所举的例子中，只有第一个共振(约在 $kR=5.1$ 处)效应显著，较高的共振在截面曲线中几乎看不出来，在实验方面更是如此，因为这时必须加上 $l\neq 0$ 对 σ 的附加贡献。因此，一个截面曲线所提供的知识是不太多的。

注　在能量很高时，相移 δ_0 的绝对值向零减小，可以用一级玻恩近似来检验(也可参考问题105)，对于 $l=0$，

$$\delta_0=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{k}\int_0^\infty dr\sin^2 kr\,V(r)$$

在排斥势为常数的特殊情况下

$$\delta_0=-\frac{K_0^2}{k}\int_0^R dr\sin^2 kr=-\frac{K_0^2}{4k^2}(2kR-\sin 2kR).\tag{84.9}$$

用这个公式计算出来的相移，在图43中用虚线表示。对于图中所示能量范围中的相当大的相移，不要希望玻恩近似会给出满意的定量结果。然而，有一点看来是值得注意的，即甚至在这些能量处，除了共振位置的移动之外，基本上得到了正确的图形。由于在玻恩公式(84.9)中有正弦项，在曲线中也就有阶梯出现。

问题 85　反 常 散 射

把前一个问题中的势改变一下，在它的中心挖出一个势阱，因此

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(r)=\begin{cases}-K_1^2 & 0\leqslant r<r_1,\\ +K_0^2 & r_1\leqslant r<R,\\ 0 & R\leqslant r\end{cases}\qquad(85.1)$$

与前一个问题相比，这种改变将引起 $l=0$ 的相移 δ_0 的变化. 试对 $K_0R=4$(如前题)，$K_1r_1=1.5$ 和 $r_1=\frac{1}{2}R$ 的数值例子进行计算和讨论.

解　在图 46 中画出势，由此图可知，当能量低于阈值 ($k^2<K_0^2$, $\varkappa$ 为实数)时，

$$\varkappa^2=K_0^2-k^2;\quad K^2=K_1^2+k^2.\qquad(85.2)$$

径向波函数 $\chi_0(r)$ 是

$$\chi_0(r)=\begin{cases}B\sin Kr & 0\leqslant r<r_1\\ A(\sinh\varkappa r+\gamma\cosh\varkappa r) & r_1\leqslant r<R\\ \sin(kr+\delta_0) & R\leqslant r\end{cases}\qquad(85.3)$$

当能量高于阈值时，$\varkappa$ 变为虚数 $\varkappa=i\varkappa'$，其中 $\varkappa'$ 是实数. 作了这个改变，(85.2)式和(85.3)式仍然可用. 这个问题和前一个问题的差别在于多了一个在 $r=r_1$ 处的边界条件. 因此，当 $r_1=0$ 时就变得和前一个问题完全相同. 从形式上看，在 (85.3) 式中取 $\gamma=0$ 就又回到前一问题.

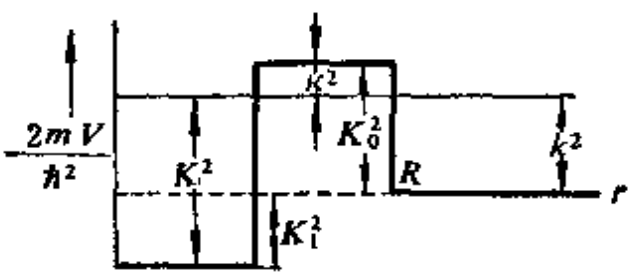


图 46　问题 85 的散射势

对于 (85.3) 式的对数导数，现在有两个 (在 $r=r_1$ 和 $r=R$ 处)连续性条件:

$$L_0(r_1)=Kr_1\cot Kr_1=\varkappa r_1\frac{1+\gamma\tanh\varkappa r_1}{\tanh\varkappa r_1+\gamma}; \qquad (85.4a)$$

$$L_0(R)=\varkappa R\frac{1+\gamma\tanh\varkappa R}{\tanh\varkappa R+\gamma}=kR\cot(kR+\delta_0) \qquad (85.4b)$$

由(85.4a)式可以求得 γ，然后从(85.4b)式求得 δ_0:

$$\gamma=\frac{\frac{\varkappa}{K}\tan Kr_1-\tanh\varkappa r_1}{1-\frac{\varkappa}{K}\tan Kr_1\tanh\varkappa r_1}; \qquad (85.5)$$

$$\delta_0=-kR+\tan^{-1}\left\{\frac{k}{\varkappa}\cdot\frac{\tanh\varkappa R+\gamma}{1+\gamma\tanh\varkappa R}\right\}. \qquad (85.6)$$

(85.5)式表明，正如上面所推测的，当 $r_1=0$ 时的确得到 $\gamma=0$，为了进行数值计算，最好把(85.5)式的 γ 代入(85.6)式，经过重新整理后，得出

$$\delta_0=-kR+\tan^{-1}\left\{\frac{kR}{\varkappa R}\cdot\frac{\tanh\varkappa(R-r_1)+\varkappa r_1\frac{\tan Kr_1}{Kr_1}}{1+\varkappa r_1\frac{\tan Kr_1}{Kr_1}\tanh\varkappa(R-r_1)}\right\} \qquad (85.7)$$

对于 $K_1r_1=1.5$; $K_0(R-r_1)=2$; $K_0R=4$ 按照(85.7)式计算出来的相移已画在图 47 中. 并把它和前题所得到的相移(用 $\tilde{\delta}_0$ 表示)，和半径为 R 的硬球所得的相移(直线)进行了比较. 在能量低于 $kR\simeq2$ 时，δ_0 和 $\tilde{\delta}_0$ 没有明显的差别; 我们可以断定这种情况表明此时波进入散射区域内部还不够深，因而不会受到中心势阱的明显影响. 约在 $3<kR<6$ 的区间内，变化很大，这时两条曲线的行为完全不同. 大约在 $kR=3$ 处，δ_0 突然上升，表明在这个能量上有共振.

的确，按照这样的思路，不难理解所发生的偏差. 若 R 是无

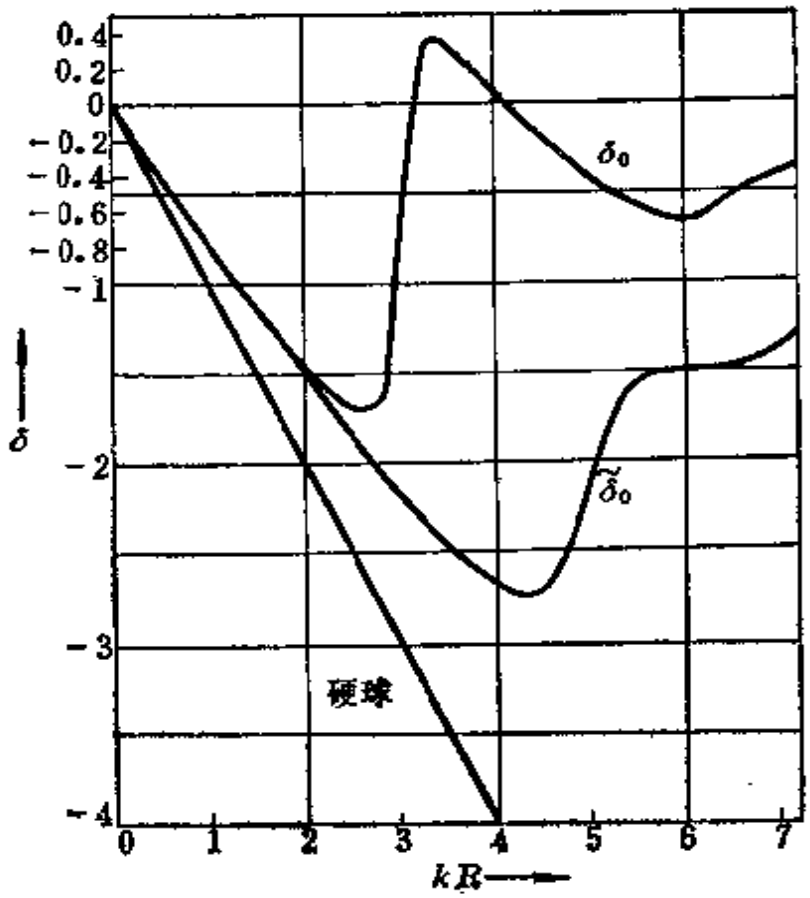


图 47　δ_0 是由于壁内有势阱所引起的反常散射的 $l=0$ 的相移．与前一问题所确定的没有势阱的相移 δ_0 进行比较．直线是对于硬球散射所得到的结果

穷大，于是就只剩下一个深度为

$$\tilde{K}^2 = K_1^2 + K_0^2$$

的势阱，并且有若干个本征态，它们的能量可由下式确定：

$$\tan Kr_1 = -\frac{K}{\sqrt{\tilde{K}^2 - K^2}}.$$

在我们的数值例子中，这个方程对于 $Kr_1 = 2.125$ 将被满足，对于我们原来的半径 R，它相当于 $kR = 3.14$，也就是说，正好是在图 47 中共振能级存在的地方．

问题 86　散 射 共 振

一个半径为 R 的球形空腔，它是由一个不透明度 Ω（无量纲）

的薄壁围成的，Ω 由下式定义

$$V(r)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Omega}{R}\delta(r-R). \tag{86.1}$$

试研究 $l=0$ 的分波散射.

注 这个问题与问题 27 所处理的一维问题有密切关系. 然而，不透明度的定义与问题 20 中给出的以及问题 27 中所用的不同，差别在于(86.1)式分母中多一因子 $2R$，因为在一维的情况下，不存在一个与本题的空腔半径有同样意义的特征长度. 注意，一维的 δ 函数具有长度倒数的量纲.

解 对具有(86.1)式的势的径向波函数 $\chi_0(r)$ 的薛定谔方程是

$$\chi_0''+\left[k^2-\frac{\Omega}{R}\delta(r-R)\right]\chi_0=0. \tag{86.2}$$

在势的奇异点上，函数 χ_0 必须连续. 然而它的导数 χ_0' 却经历一个跳变，这可从方程(86.2)穿过壁的积分而得到：

$$\int_{R-\varepsilon}^{R+\varepsilon}dr\,\chi_0''=\chi_0'(R+\varepsilon)-\chi_0'(R-\varepsilon)=\frac{\Omega}{R}\chi_0(R)$$

因此，利用对数导数

$$L_0(r)=r\frac{\chi_0'(r)}{\chi_0(r)}, \tag{86.3}$$

边界条件成为：

$$L_0(R+\varepsilon)-L_0(R-\varepsilon)=\Omega. \tag{86.4}$$

于是空腔里面和外面的两部分波函数

$$\chi_0(r)=A\sin kr \qquad r<R \tag{86.5a}$$

和

$$\chi_0(r)=\sin(kr+\delta_0) \qquad r>R \tag{86.5b}$$

可以通过(86.4)联系起来，得到

$$kR[\cot(kR+\delta_0)-\cot kR]=\Omega, \tag{86.6}$$

或者写成更适于确定相移的形式：

$$\tan(x+\delta_0)=\frac{\tan x}{1+\Omega\dfrac{\tan x}{x}} \qquad \text{其中 } x=kR \tag{86.7}$$

(86.5a)式的振幅 A 不难从$\chi_0(r)$的连续性确定：

$$A=\frac{\sin(x+\delta_0)}{\sin x}$$

或者，利用(86.7)式消去 δ_0，

$$A^2=\frac{\tan^2 x+1}{\tan^2 x+\left(1+\Omega\frac{\tan x}{x}\right)^2}. \tag{86.8}$$

从方程(86.7)式可见，一个不可穿透的壁($\Omega\to\infty$)可以导致硬球这种极限情况，

$$\tan(x+\delta_0)=0 \quad 或者 \quad \delta_0=-x \tag{86.9}$$

根据(86.8)式，振幅 A 变为零.

如果 Ω 很大而仍然有限，则在(86.7)式分母的零点周围有一些狭窄的能带，这里出现与硬球不同的行为. 正如(86.8)式所表明的，就在这些狭的能带中，空腔内的振幅 A 变大. 因此我们获得在壁两边的振动之间的强耦合的典型共振现象（共振限制在狭能带内），而对所有其他的能量差不多完全没有耦合. 愈是可穿透的壁，共振现象的阻尼愈大.

若 $\Omega\gg1$，共振出现在 $x=n\pi$ 的能量附近. 在这个能量上，空腔的本征态 $\chi_0(R)=0$，这时的空腔是由一个不可穿透的壁围成的，因此具有最大耦合的共振能级位于或接近于空腔的本征值.

对于 $\Omega=4$ 和 $\Omega=10$ 进行了数值讨论. 对于两个值中较小的一个，$\Omega=4$，相移作为 x 的函数表示在图 48 中. 在小能量下，这条曲线和硬球的直线没有很大的差别，然而它在 $kR=0$ 处的切线倾角是 $-\Omega/(1+\Omega)=-0.8$，而不是硬球的 -1. (86.7)式中分母的第一个零点出现在 $x_1=2.57$ 处，第二个零点出现在 $x_2=5.35$ 处；在图中用垂直的虚线标记它们的位置. 这些共振能量仍然明显地处在 $x=n\pi$ 值的左边，当 $x=n\pi$ 时，相移回到零. Ω 愈大，共振能量愈靠近 $x=n\pi$，例如当 $\Omega=10$ 时，第一个共振移到 $x_1=2.86$

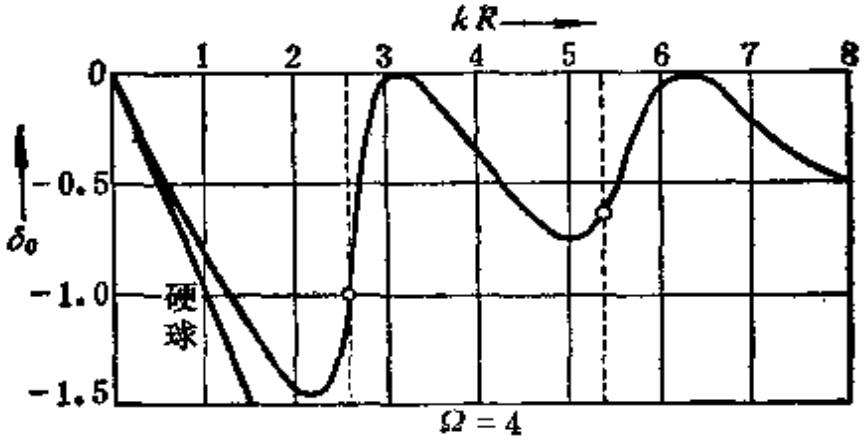


图 48　对于 $\Omega=4$ 的球形空腔，相移 δ_0 作为 kR 的函数．对于较大的 Ω，共振变得更显著(参看图49a)

处，而第二个共振移到 $x_2=5.76$ 处(见图 49a)．于是相角上升到零变得更陡，共振现象更为显著．在$\Omega\to\infty$ 的极限下，最后我们在 $x_n=n\pi$ 处得到一个 $\Delta\delta_0=\pi$ 的尖锐的不连续跳变，这和硬球的线性规律(86.9)式并不矛盾，因为 δ_0 只被确定到一个模 π．

对于 $\Omega=10$ 的情况，更详细地研究了它的共振现象．在图(49.b)中示出(86.8)式的振幅 A 以及头两个显著的共振极大，其所在处的 x 值，在相移图 (图 49a) 中用垂直的虚线标记．从图 49.c 可见，在这些 x 值处，截面有一个小的而且不很显著的共振峰，至少在第一个 x 值处如此．在每一个共振的两边有两个地方 $A=1$．这时

$$1+\Omega\frac{\tan x}{x}=\pm 1. \tag{86.10}$$

当 (86.10) 式右面取 $+1$ 时，正好给出 $x=n\pi$，因此得到 $\delta_0=0$ 和 $\sigma_0=0$．这是很好理解的，因为在壁内的波函数与没有壁时的波函数完全一致，因而根本没有散射波．当(86.10)式右面取 -1 时给出的 x 与相移最小值的 x 非常接近，相曲线在

$$\frac{\tan x}{x}=-\frac{2}{\Omega-1}$$

处变成平稳的，这可以容易地由 $d\delta_0/dx=0$ 求得，即对于 $\Omega=10$，

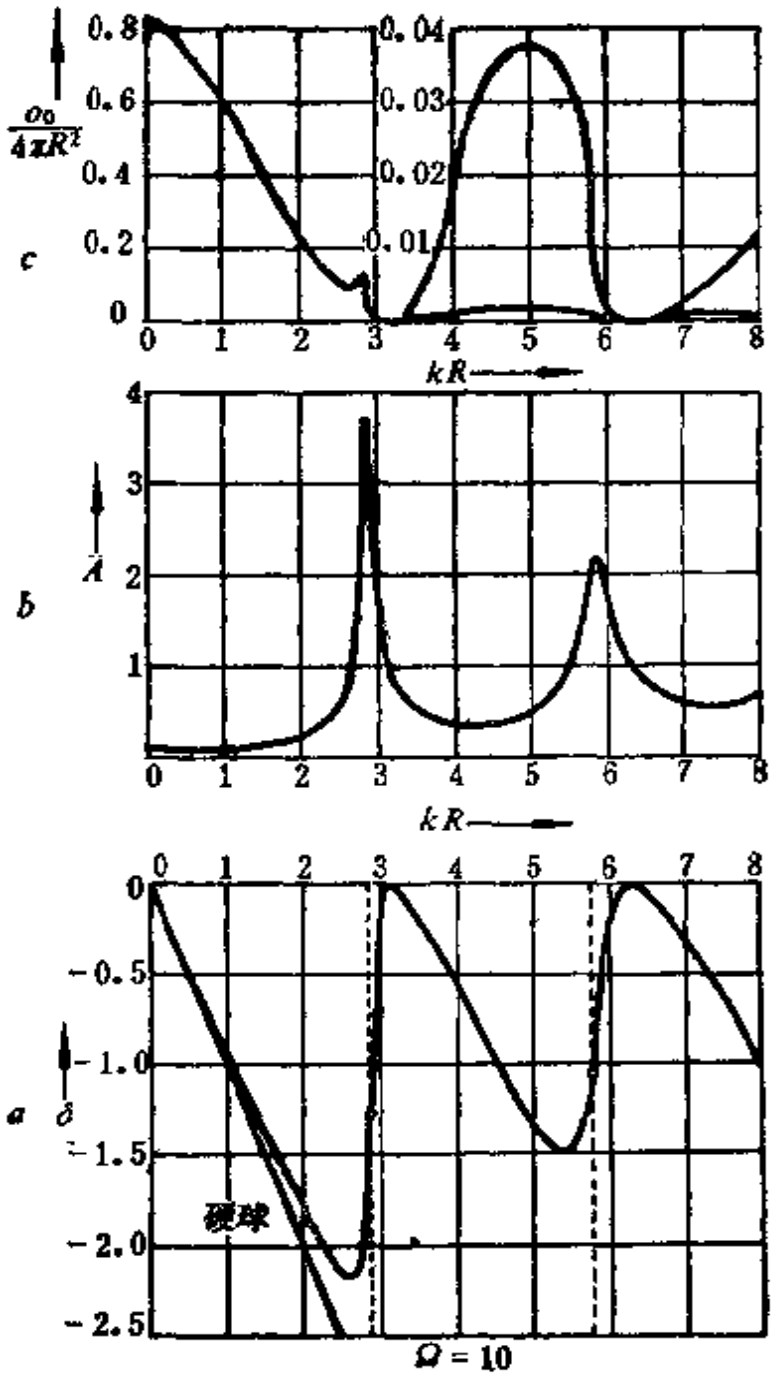


图 49a-c　a) 如同图 48 中的相移 δ_0，但是 $\Omega=10$. b) 振幅 A 表现出明显的共振. c) $l=0$ 的截面 (用了两个不同的标度). 即使是 $kR=2.86$ 处的显著共振，在截面曲线上也只引起一个较小的峰，它和忽略了大角动量是一致的

在 $x=2.616$ 和 $x=5.406$ 处相移取最小值，而 (86.10) 式中取负号给出

$$\frac{\tan x}{x}=-\frac{2}{\Omega}$$

即对于 $\Omega=10$, 它的解是 $x=2.654$ 和 $x=5.454$, 它们与相移最小值位置非常接近.

由截面曲线(图 49c)得到的知识是比较少的:第一个共振只引出一个小的峰,第二个共振,除了远离它左右两边有两个零点以外,什么也看不到. 从两个零点的存在可以推断他们之间某处可能有一个共振,虽然并不知道共振的位置、高度和宽度. 从实验的截面曲线导出的结果可以给我们的知识甚至更少, 这是由于高角动量贡献的本底随着 ω 的增加而上升,因而使 σ_0 曲线的零点变得模糊不清.

问题 87 高角动量的贡献

对于前一问题中讨论的不透明空腔,计算直至 $l=2$ 的相移和分波散射截面.

解 对于任意 l 的径向波函数可以写为

$$\chi_l(r)=A_l j_l(kr) \qquad r<R; \qquad (87.1a)$$

$$\chi_l(r)=j_l(kr)\cos\delta_l-n_l(kr)\sin\delta_l \qquad r>R. \qquad (87.1b)$$

因为当 $kr\gg l$ 时球面柱函数的渐近式是

$$j_l(kr)\to\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right);\quad n_l(kr)\to-\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right),$$

所以(87.1b)式给出 χ_l 的渐近行为是:

$$\chi_l\to\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right). \qquad (87.2)$$

δ_l 是第 l 个分波的相移, 相应的分波截面为

$$\sigma_l=4\pi(2l+1)\sin^2\delta_l \qquad (87.3)$$

为了确定相移 δ_l,我们利用在 $r=R$ 处的边界条件,即仍然要求 χ_l 在 $r=R$ 处必须连续,而对数导数 $r\chi_l'(r)/\chi_l(r)$ 有一等于 Ω 的跳变.

$$A_l j_l(x)=j_l(x)\cos\delta_l-n_l(x)\sin\delta_l; \qquad (87.4)$$

$$x\left\{\frac{j_l'(x)-\tan\delta_l n_l'(x)}{j_l(x)-\tan\delta_l n_l(x)}-\frac{j_l'(x)}{j_l(x)}\right\}=\Omega. \qquad (87.5)$$

其中“ ”表示对自变量 kr 的微分，$x=kR$.

由(87.5)式可得

$$\tan\delta_l=\frac{j_l(x)^2}{j_l(x)n_l(x)-\dfrac{x}{\Omega}} \qquad (87.6)$$

上式可用来计算相移；然后可以将它代入(87.4)而求出振幅 A_l.

对于 $l=0$，球面柱函数简化为 $j_0(x)=\sin x$ 和 $n_0(x)=-\cos x$. 于是(87.4)式和(87.6)式又回到了前一个问题的(86.7)式和 A 的表示式.

对于数值例子，$\Omega=10$，在 $x=0$ 到 $x=5$ 之间，$l=0,1,2$ 的相移曲线画在图50a中. 它们对 x 的依赖关系相似. 在 x 很小时它们的主要差别是，较高的 l 离开零点更慢些. 因此在低能时只有 $l=0$ 的对正碰撞有贡献. 约从 $x=1$ 开始，$l=1$ 的贡献变得大起来；约从 $x=2$ 开始，$l=2$ 的贡献变得可观. 分波截面(图50b)表明 $l=0$ 和 $l=1$ 有小的共振峰；然而，在和曲线 $\sigma=\sigma_0+\sigma_1+\sigma_2$ 上，它们只不过在连续背景上形成一些

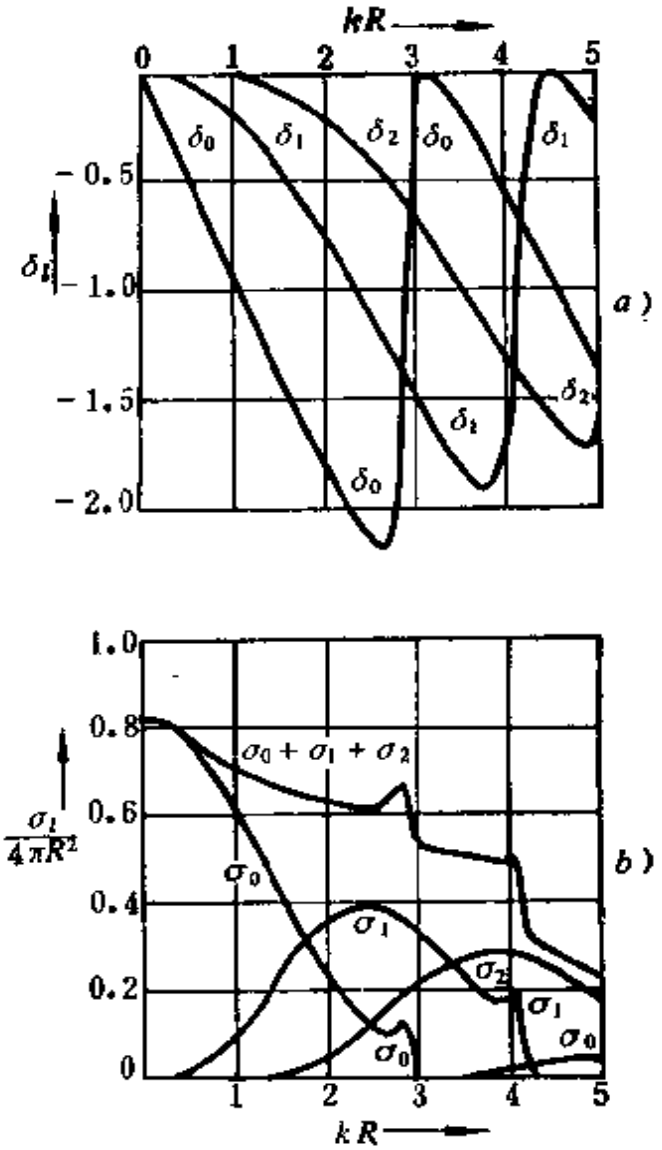


图 50a 和 b　包括高角动量在内的球形空腔的相移(a)和截面(b)，在 $kR=2.86$ 处的峰仍可以看到

小的隆起部分.（在$x>4$处的相当陡的下降容易引起误解，这种下降主要是由于在那里略去了$l=3$的上升的贡献.）

问题 88　形状无关近似

试证明，在低能情况下，有一个k^2的幂展开式，头几项的形式为

$$k\cot\delta_0=-\frac{1}{a}+\frac{1}{2}r_0k^2$$

其中只有两个与势有关的参数，散射长度a和有效力程r_0.

当然，这样一个展开式存在的后果是，当能量小得使我们只取头两项就已满足时（即只要观测不到$l=1$的影响），实验截面曲线，$\sigma(E)$，不能给出比两个常数更多的资料. 这表明不能这样来确定势的形状. 这在低能核物理中特别重要，并且也是我们对于核力在定量上了解得很少的原因之一.

解　在低能时，将只考虑$l=0$的情况. 设能量等于$\hbar^2k^2/2m$的径向波函数为$\chi_k(r)$，能量等于零的径向波函数为$\chi_0(r)$. 这两个函数满足微分方程

$$\chi_0''-U(r)\chi_0=0 \tag{88.1a}$$

和

$$\chi_k''+k^2\chi_k-U(r)\chi_k=0 \tag{88.1b}$$

其中

$$U(r)=\frac{2m}{\hbar^2}V(r),$$

边界条件是

$$\chi_0(0)=0;\quad \chi_k(0)=0 \tag{88.2}$$

在半径$r>R_0$的区域中，因为势变成零，它们的行为将是

$$\chi_0=C(r-a);\quad \chi_k=\sin(kr+\delta_0) \tag{88.3}$$

这里a的前面随便取那一种符号（±）都可以.

用χ_k乘(88.1a)，用χ_0乘(88.1b)，两式相减得到

$$\chi_k\chi_0''-\chi_0\chi_k''=k^2\chi_0\chi_k.$$

对此式取从0到r的积分，并利用(88.2)式，则得：

$$\chi_k(r)\chi_0'(r)-\chi_0(r)\chi_k'(r)=k^2\int_0^r dr\,\chi_0\chi_k$$

或
$$\frac{\chi_0'}{\chi_0}-\frac{\chi_k'}{\chi_k}=k^2\frac{\int_0^r dr\,\chi_0\chi_k}{\chi_0(r)\chi_k(r)}.$$

选取任意半径 $R>R_0$ 为积分的上限，并将 (88.3) 式代入上式左边，得到：

$$\frac{1}{R-a}-k\cot(kR+\delta_0)=k^3\frac{\int_0^R dr\,\chi_0(r)\chi_k(r)}{\chi_0(R)\chi_k(R)}. \tag{88.4}$$

这里可以利用余切分解式

$$\cot(kR+\delta_0)=\frac{\cot\delta_0-\tan kR}{1+\cot\delta_0\tan kR}$$

将方程(88.4)化为 $\cot\delta_0$ 的线性方程，它的解是

$$k\cot\delta_0=\frac{Q+k\tan kR}{1-Q\dfrac{\tan kR}{k}} \tag{88.5}$$

其中

$$Q=\frac{1}{R-a}-k^2\frac{\int_0^R dr\,\chi_0(r)\chi_k(r)}{\chi_0(R)\chi_k(R)}. \tag{88.6}$$

到此为止，在(88.5)式和(88.6)式中没有作过任何的省略.

现在开始用 k^2 的幂来展开，首先将正切展成 k^2 的幂：

$$k\cot\delta_0=\frac{Q+k^2R+\cdots}{1-QR-\dfrac{1}{3}Qk^2R^3\cdots},$$

然后用较简单的表示式

$$Q=\frac{1}{R-a}-k^2\mathscr{K} \tag{88.7}$$

其中

$$\mathscr{K}=\frac{\int_0^R dr\,\chi_0(r)^2}{\chi_0(R)^2} \tag{88.8}$$

来代替(88.5)式中的 Q. 因此,我们在(88.5)式的分子、分母中得到两个级数,每一个都精确到 k^2 项,经过整理,最后得到要求的公式

$$k\cot\delta_0=-\frac{1}{a}+\frac{1}{2}r_0k^2 \tag{88.9}$$

其中有效力程为

$$\frac{1}{2}r_0=\frac{(R-a)^3+a^3}{3a^2}-\mathscr{K}\left(\frac{R-a}{a}\right)^2 \tag{88.10}$$

还留下两个问题需要回答.

1. 只要 $R>R_0$, R 的选择是十分任意的. 因此,有效力程(88.10)式必须与 R 无关.

2. 如果把 r_0 解释为力程是有意义的,则这个常数必须永远是正的.

第一个问题通过从 R 到 $R+dR$ 的微分改变容易得到回答:

$$\frac{d}{dR}\left(\frac{1}{2}r_0\right)=\left(\frac{R-a}{a}\right)^2-\frac{d\mathscr{K}}{dR}\left(\frac{R-a}{a}\right)^2-2\mathscr{K}\frac{R-a}{a^2}. \tag{88.11}$$

从(88.8)式的定义得到

$$\begin{aligned}\mathscr{K}(R+dR)&=\frac{\mathscr{K}(R)\chi_0(R)^2+\chi_0(R)^2dR}{\chi_0(R)^2+2\chi_0(R)\chi_0'(R)dR}\\&=\frac{\mathscr{K}(R)+dR}{1+\dfrac{2\,dR}{R-a}}\end{aligned}$$

或

$$\frac{d\mathscr{K}}{dR}=1-\frac{2\mathscr{K}}{R-a}. \tag{88.12}$$

把(88.12)式代入(88.11)式,可立刻看出

$$\frac{d}{dR}\left(\frac{1}{2}r_0\right)=0$$

所以只要 $R>R_0$,不管 R 取什么值,上式都成立,因此 r_0 与 R 无

关.

为了回答第二个问题，选取 $R>|a|$；于是(88.10)式中的第一项是正的，由于 $\mathscr{K}>0$，第二项是负的. 因此，如果第一项大于第二项，或者当

$$\mathscr{K}<\frac{(R-a)^3+a^3}{3(R-a)^2}$$

时，力程将是正的. 当与(88.8)式比较时，不难看出，这个条件和下列条件

$$\int_0^R dr\,\chi_0(r)^2<\int_0^R dr\,[C(r-a)]^2=\frac{1}{3}C^2\{(R-a)^3+a^3\}$$

是一致的. 在 $a<0$ 的情况下(图 51a)，χ_0 处处比 $C(r-a)$ 小；如果点 $r=a$ 离开 $\chi_0(r)$ 的零点不太远，这对于 $a>0$ 同样适用(图 51b).

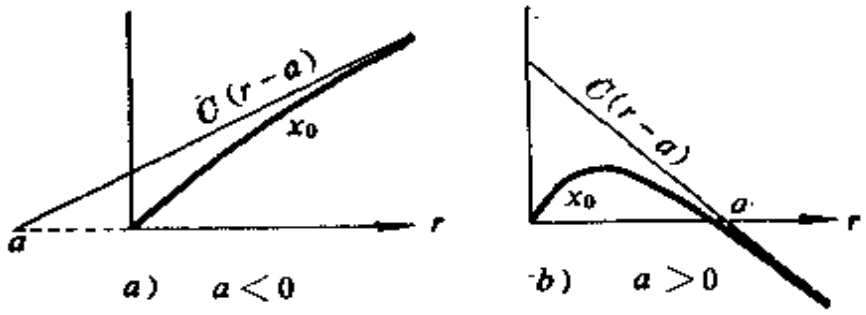


图 51a 和 b　对于散射长度 a 的不同符号，零能量波函数 $\chi_0(r)$ 和它的渐近行为

注　利用

$$\int_0^R dr[C(r-a)]^2=\frac{1}{3}C^2\{(R-a)^3+a^3\}$$

可以将力程公式(88.10)改写为

$$\frac{1}{2}r_c=\int_0^R dr\left\{\left(1-\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{a^2C^2}\chi_0(r)^2\right\}$$

通常在文献中采取的归一化使得 $\chi_0\to 1-\frac{r}{a}$ 或 $C=-\frac{1}{a}$. 更进一步，引入 χ_0 和它的渐近行为的差

$$\varphi(r)=1-\frac{r}{a}-\chi_0(r)$$

可以将上式写成

$$\frac{1}{2}r_0=\int_0^\infty dr\varphi(r)\left[2\left(1-\frac{r}{a}\right)-\varphi(r)\right]$$

这里已将积分上限写成无穷大，因为在 $r=R_0$ 的范围以外，$\varphi(r)$为零.

问题89　直角势阱：低能散射

试研究图52中所画的直角势阱(势深 $V_0=\hbar^2K_0^2/2m$，半径为 R)的低能展开式

$$k\cot\delta_0=-\frac{1}{a}+\frac{1}{2}k^2r_0 \tag{89.1}$$

a) 由在 $r=R$ 的边界条件来推导(89.1)式.

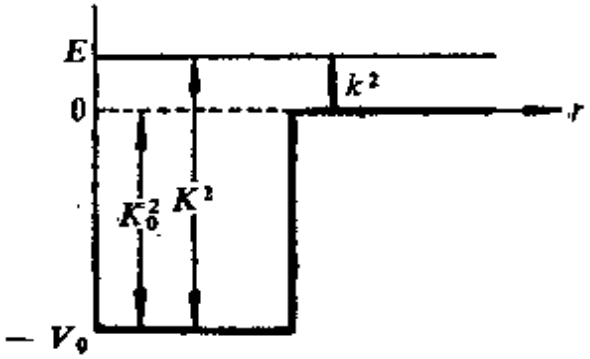


图52　用能量(公共因子 $2m/\hbar^2$ 除外)标记的势阱

b) 把前一问题所导出的 r_0 的一般公式应用到这个特殊势上去.

解　对于本题的势，在 $r<R$ 时，我们有

$$\chi_k=A_k\sin Kr;$$

$$\chi_0=A_0\sin K_0r \tag{89.2}$$

在 $r>R$ 时，

$$\chi_k=\sin(kr+\delta_0);\quad \chi_0=C(r-a) \tag{89.3}$$

对于零能量，在 $r=R$ 处的对数导数是

$$L_0=R\chi_0'(R)/\chi_0(R)=K_0R\cot K_0R=\frac{R}{R-a} \tag{89.4}$$

a) 对 χ_k 作出同样的表示式：

$$L_k=KR\cot KR=kR\cot(kR+\delta_0) \tag{89.5}$$

利用

$$\cot(kR+\delta_0)=\frac{\cot\delta_0-\tan kR}{1+\cot\delta_0\tan kR}$$

代入(89.5)后，对 $\cot\delta_0$ 求解，得到

$$\cot\delta_0=\frac{L_k+kR\tan kR}{kR-L_k\tan kR}. \tag{89.6}$$

可以分两步来求 k^2 幂的展开式. 第一步，利用 $kR\ll1$，并展开 $\tan kR$，结果是

$$k\cot\delta_0=\frac{L_k}{R(1-L_k)}+k^2R\left[\frac{1}{1-L_k}+\frac{L_k^2}{3(1-L_k)^2}\right] \tag{89.7}$$

必须指出，(89.6) 式和 (89.7) 式对于任何形状的势都成立，只要 $r\geqslant R$ 时势为零就行. 在第二步展开 L_k 时，我们才用到势阱的特殊直角形状. 从现在起，利用缩写

$$X_0=K_0R;\quad X=KR;\quad x=kR; \tag{89.8}$$

于是，由(89.5)式，

$$L_k=X\cot X,\ \text{其中}\ X=\sqrt{X_0^2+x^2}=X_0+\frac{x^2}{2X_0}\cdots \tag{89.9}$$

和

$$\begin{aligned}L_k&=L_0\left\{1+\frac{x^2}{2X_0}\left(\frac{1}{X_0}-\cot X_0-\tan X_0\right)\right\}\\&=L_0\left\{1+\frac{x^2}{2X_0^2}\left(1-L_0-\frac{X_0^2}{L_0}\right)\right\}.\end{aligned}$$

由此得出

$$\frac{L_k}{R(1-L_k)}=\frac{L_0}{R(1-L_0)}\left\{1+\frac{x^2}{2X_0^2}\left(1-\frac{X_0^2}{L_0(1-L_0)}\right)\right\},$$

因此，(89.7)式中的第一项可以分解成散射长度的贡献

$$-\frac{1}{a}=\frac{L_0}{R(1-L_0)} \tag{89.10}$$

和一个正比于 k^2 的力程修正项的贡献. 在 (89.7) 式的 k^2 项中，我们可以用 L_0 近似地代替 L_k，由此得到

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}r_0=&\frac{R}{2X_0^2}\cdot\frac{L_0}{1-L_0}\left(1-\frac{X_0^2}{L_0(1-L_0)}\right)\\&+R\left(\frac{1}{1-L_0}+\frac{L_0^2}{3(1-L_0)^2}\right).\end{aligned}$$

在这个公式中，用无量纲的量

$$\alpha=\frac{a}{R} \tag{89.11}$$

来表示 L_0，于是有

$$L_0=\frac{1}{1-\alpha};\quad \frac{L_0}{1-L_0}=-\frac{1}{\alpha};$$

$$\frac{1}{1-L_0}=-\frac{1-\alpha}{\alpha}, \tag{89.12}$$

经过简单的运算，最后得到

$$\frac{1}{2}r_0=R\left\{-\frac{1}{2X_0^2\alpha}+\frac{1}{2}-\frac{1}{6\alpha^2}\right\}. \tag{89.13}$$

我们还必须从(89.4)式作出散射长度的最后表示式

$$a=R\left(1-\frac{\tan X_0}{X_0}\right). \tag{89.14}$$

于是，(89.13)、(89.14)和(89.1)式一起表示这个问题的完全解.

b) 前题的一般方法，除了用(89.4)式直接导出(89.14)式以外，没有别的方法来确定散射长度. 然而，若我们从一般表示式(88.10)出发，就不再需要引入 χ_k 或 L_k，利用缩写(89.11)，(88.10)式变成

$$\frac{1}{2}r_0=R\left\{\frac{(1-\alpha)^3+\alpha^3}{3\alpha^2}-\mathcal{K}\frac{(1-\alpha)^2}{\alpha^2}\right\} \tag{89.15}$$

其中

$$\mathcal{K}=\frac{\int_0^R dr\,\chi_0(r)^2}{\chi_0(R)^2}$$

利用(89.2)式的 $\chi_0(r)$，用初等积分可以算出常数 $\mathcal{K}$

$$\mathcal{K}=\frac{R}{2X_0\sin^2X_0}(X_0-\sin X_0\cos X_0)$$

$$=\frac{R}{2}\left(1-\frac{\cot X_0}{X_0}+\cot^2X_0\right)$$

或者因为

$$\tan X_0 = X_0(1-\alpha),$$

上式可改写为

$$\mathscr{K} = \frac{1}{2} R\left(1 + \frac{\alpha}{X_0^2(1-\alpha)^2}\right). \tag{89.16}$$

把 (89.16) 代入 (89.15)，不难再次得到有效力程的 (89.13) 式.

问题 90　低能散射和束缚态

在复 k 平面上，研究 $k=0$ 附近 $\cot\delta_0$ 的行为. 将会发现在某个值上不论束缚态 ($k^2<0$) 是否存在，那里的 $\cot\delta_0$ 的展开式仍然是收敛的.

解　若对于小的 k 值存在幂展开式

$$k\cot\delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + \cdots \tag{90.1}$$

则除了在 $k=0$ 处有一个极点外，$\cot\delta_0$ 在复 k 平面内是解析函数. 束缚态处在这个平面的虚轴上，设它们在

$$k = i\varkappa \tag{90.2}$$

处，其中 $\varkappa$ 是正数. 把它代入(90.1)式中，则有

$$\cot\delta_0 = i\left(\frac{1}{\varkappa a} + \frac{1}{2}\varkappa r_0\right) \tag{90.3}$$

因此 $\cot\delta_0$ 变成在虚轴上的纯虚数. 由于 $l=0$ 的径向波函数的渐近行为是

$$\chi_0 \to C\sin(kr+\delta_0),$$

所以相角 δ_0 与物理现象有关. 对于负能量，按照(90.3)式以及解析性，我们有

$$\chi_0 \to \frac{C}{2i}(e^{i\delta_0}e^{-\varkappa r} - e^{-i\delta_0}e^{\varkappa r}).$$

这样的波函数是一个定态的本征函数的充分和必要条件是，当 $\varkappa>0$ 时，

$$e^{-i\delta_0}=0, \tag{90.4}$$

所以 χ_0 可以归一化. 条件(90.4)式可写为

$$\cos\delta_0-i\sin\delta_0=0$$

或

$$\cot\delta_0=i, \tag{90.5}$$

把(90.5)式代入(90.3)式，得到实数关系

$$1=\frac{1}{\varkappa a}+\frac{1}{2}\varkappa r_0, \tag{90.6}$$

这个条件把束缚态的量 $\varkappa$ 与散射参数 a 和 r_0 联系起来，并可以用在两个方面.

1. 从散射资料来确定结合能：假设 (90.6) 中的最后一项仅是一个小的修正，则由(90.6)可得

$$\varkappa a=1+\frac{1}{2}\frac{r_0}{a} \tag{90.7}$$

因此束缚态的能量变为

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\varkappa^2=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(1+\frac{r_0}{a}\right). \tag{90.8}$$

由于这里只出现 $\varkappa^2$ 项，必须指出，按照(90.7)式，在上述近似的范围内，仅对于正的散射长度才能有束缚态存在.

2. 从结合能来确定散射截面：这一点不能完全做到，因为确定散射截面需要两个参数，而结合能只提供了一个. 我们写出散射截面

$$\sigma_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\frac{1}{1+\cot^2\delta_0}. \tag{90.9}$$

由(90.6)式解得

$$a=\frac{1}{\varkappa}+\frac{1}{2}r_0,$$

上式的近似程度和(90.7)式一样. 于是由(90.1)式得到

$$\cot^2\delta_0=\left(-\frac{1}{ka}+\frac{1}{2}kr_0\right)^2\simeq\frac{1}{k^2a^2}-\frac{r_0}{a}\simeq\frac{\varkappa^2}{k^2}(1-\varkappa r_0)-\varkappa r_0$$

因此 $$1+\cot^2\delta_0=\left(1+\frac{\varkappa^2}{k^2}\right)(1-\varkappa r_0),$$

最后得到下列关系：

$$\sigma_0=\frac{4\pi}{k^2+\varkappa^2}(1+\varkappa r_0). \tag{90.10}$$

这个截面公式对低能和 $\varkappa r_0\ll 1$ 时成立. 它是核物理中有名的贝特-佩尔斯(Bethe-Peierls)公式.

文献 Bethe, H. A., Peierls, R.: Proc. Roy. Soc. Lond. (A)**148**.146(1935).

问题 91 有硬心和没有硬心的氘核势

试利用束缚态条件 $\cot\delta_0=i$, 来确定一个半径为 R 的理想直角势阱的深度，使得它给出一个结合能为 $E_D=-2.23\,\mathrm{MeV}$ 的氘核束缚态. 取半径 $R=1.2\mathrm{fm}(1\mathrm{fm}=10^{-13}\,\mathrm{cm})$. 若中心有一个半径 $a=0.2\,\mathrm{fm}$ 的硬心，试求这个势阱的深度.

解 对于正能量，满足边界条件 $\chi_0(a)=0$ 的 $l=0$ 波函数是

$$\chi_0=C\sin K(r-a) \quad a<r\leqslant R;$$

$$\chi_0=\sin(kr+\delta_0) \quad R<r$$

对数导数在 $r=R$ 处的连续性给出

$$X\cot\beta X=x\cot(x+\delta_0) \tag{91.1}$$

其中缩写

$$x=kR;$$

$$X=KR=\sqrt{X_0^2+x^2};$$

$$X_0=K_0R;\quad \beta=\frac{R-a}{R} \tag{91.2}$$

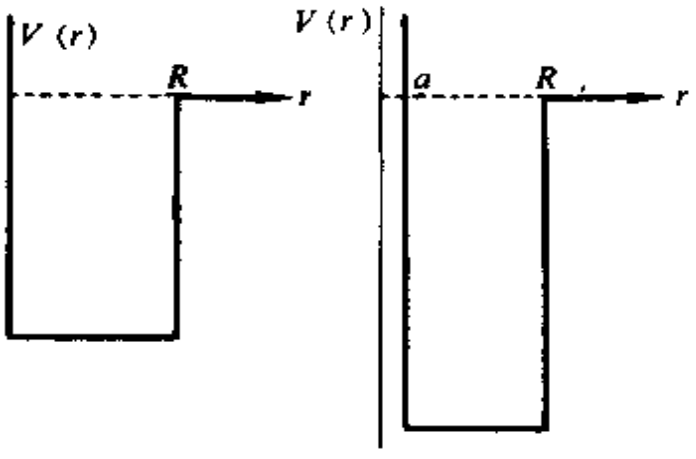


图 53 没有硬心和有硬心的氘核模型势. 如果保持结合能不变，有硬心的势阱较深

对于负能量的束缚态，设

$$k=i\varkappa;\quad x=i\xi;\quad \xi=\varkappa R; \tag{91.3}$$

于是

$$E_D=-\frac{\hbar^2}{2m^*R^2}\xi^2, \tag{91.4}$$

其中 m^* 是两个核子的约化质量$\left(m^*=\frac{1}{2}m,\text{参见问题 150}\right)$. 我们也可以用特征长度

$$l=\frac{\hbar}{\sqrt{2m^*|E_D|}}=4.312\,\text{fm} \tag{91.5a}$$

代替 E_D，因此，在我们的数值例子中，

$$\xi=\frac{R}{l}=0.2783. \tag{91.5b}$$

在问题 90 中已经证明，在

$$e^{-i\delta_0}=0 \quad 或 \quad \cot\delta_0=i$$

时，得到束缚态，于是我们也有

$$e^{-i(x+\delta_0)}=0 \quad 和 \quad \cot(x+\delta_0)=i$$

因此方程(91.1)化为

$$X\cot\beta X=-\xi. \tag{91.6}$$

由于方程的右边是负的，余切的自变量被限制在 $\pi/2$ 和 π 之间①，并且离开 $\pi/2$ 不太远(因为 ξ 小)：

$$\beta X=\frac{\pi}{2}+\varepsilon;\quad \cot\beta X=-\tan\varepsilon. \tag{91.7}$$

对一个给定的 ξ 值，(91.5b)式，要求的是阱的深度，也就是参数 X_0^2，为此，我们首先来计算 ε. 把(91.7)式的 X 代入(91.6)式，

① 这个结论适用于势阱只能容纳一个束缚态(氘核就是这样)的情况. 对于在阱中有两个本征值的情况，方程(91.6)应有两个解，较低的能级是在 $\pi<\beta X<\frac{3}{2}\pi$ 的范围内.

并将 ε 用 ξ 的幂展开

$$\varepsilon=\frac{2\beta}{\pi}\xi\left(1-\frac{4\beta}{\pi^2}\xi\cdots\right) \tag{91.8}$$

然后，把这个结果代入关系式

$$X_0^2=X^2+\xi^2=\left[\frac{\pi}{2\beta}\left(1+\frac{2\varepsilon}{\pi}\right)\right]^2+\xi^2;$$

由此可得

$$X_0^2=\frac{\pi^2}{4\beta^2}+\frac{2\xi}{\beta}+\left(1-\frac{4}{\pi}\right)\xi^2\cdots \tag{91.9}$$

现在来讨论这个结果. 假如没有硬心，$\beta=1$, X_0 只比 $\pi/2$ 大一点点. 要是 $X_0=\pi/2$, 本征值给出的结合能为零($\xi=0$)；由于结合能越强($\xi>0$)，势阱必定越深. 有硬心时，这个极限值(即 X_0 的最小值)移动到 $\pi/2\beta>\pi/2$, 因为若有一个硬心，这个阱必须比给出同样结合能的无硬心的势阱更深.

按照(91.5b)式, $\xi=0.278$, 由(91.9)式得到

$$X_0^2=\frac{V_0}{|E_D|}\cdot\frac{R^2}{l^2}=\frac{2.467}{\beta^2}+\frac{0.557}{\beta}+0.046+\cdots$$

其中 V_0 是势阱深度. 没有硬心 ($\beta=1$) 时，给出 $X_0^2=3.070$ 和 $V_0=88.4\,\mathrm{MeV}$. 当硬心的半径是 $a=0.2\,\mathrm{fm}$ ($\beta=0.8333$)时，这些值改变到 $X_0^2=4.267$ 和 $V_0=122.9\,\mathrm{MeV}$. 图 53 就是按照这些数值结果画出的.

问题 92　有硬心和没有硬心的低能散射截面

对于前一问题的两种氘核势，试计算散射长度和低能极限下的中子-质子散射截面.

解　散射长度 a 与 $r=R$ 处的对数导数在 $k\to0$ 时的极限有关，由(89.10)式得，

$$a=R\,\frac{L_0-1}{L_0};\quad L_0=R\,\frac{\chi'(R)}{\chi(R)}. \tag{92.1}$$

另一方面，按照(91.1)式，对于我们现在讨论的势，有

$$L_0 - X_0 \cot \beta X_0. \tag{92.2}$$

低能截面在 $k \to 0$ 时的极限是

$$\sigma(0) - 4\pi a^2. \tag{92.3}$$

由于在前一个问题中，已经计算了与氘核的正确的结合能相对应的 X_0 和 β，现在我们可以由(92.1)、(92.2)和(92.3)式简单地算出 a 和 $\sigma(0)$. 计算结果是：

1. 没有心的势阱：$\beta = 1$; $X_0^2 = 3.070$;

$$L_0 = -0.3214;\ a = 4.934\text{fm};\ \sigma - 3.059 \text{ 靶}.$$

2. 有心的势阱：$\beta = 0.8333$; $X_0^2 = 4.267$;

$$L_0 = -0.3135;\ a = 5.028\,\text{fm};\ \sigma - 3.177 \text{ 靶}.$$

这些结果是有意义的，因为它们表明，当取同样的氘核结合能和势阱半径时，硬心的存在对低能中子-质子散射截面只有很小(3.8%)的影响. 因此，利用这种测量去决定是否真正存在一个硬心，几乎是不可能的.

必须指出，由于核力与自旋有关和 ^1S 态的很大的贡献，事实上截面的实验值约为 21 靶. 然而，我们的模型的计算结果，与 ^3S 散射长度符合得很好.

问题 93　在修正普薛耳-特勒势阱上的低能散射

利用问题 39 的势的球对称形式

$$V(r) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos \mathrm{h}^2 \alpha r} \tag{93.1}$$

来推导低能($l=0$)散射截面.

解　一维的问题 39 提供了三维情况 $l=0$ 的解的完全集合. 然而在 $r=0$ 处的附加的边界条件 $\chi_0(0)=0$ 只留给我们奇宇称的解. 因此剩下的是(39.12b)式，相角(39.13b)式和(39.14)式：

$$\chi_0(r)=\sin(kr+\delta_0); \tag{93.2}$$

$$\delta_0=\frac{\pi}{2}+\arg\frac{\Gamma(ik;\alpha)e^{-i\frac{k}{\alpha}\log 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(1-\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)} \tag{93.3}$$

现在留下来的只是将(93.3)式化为更适合于数值计算的纯数学工作.

利用缩写

$$\frac{k}{2\alpha}=q,\quad \frac{\lambda}{2}+iq=z \tag{93.4}$$

我们有

$$\delta_0-\frac{\pi}{2}=\arg\Gamma(2iq)-2q\log 2-\arg\Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right)+\arg\Gamma(1-z) \tag{93.5}$$

由一般的恒等式

$$\Gamma(2z)=\frac{1}{2\sqrt{\pi}}e^{2z\log 2}\Gamma(z)\Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right)$$

和

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z)=\frac{\pi}{\sin\pi z}$$

以及由此而来的相角关系

$$\arg\Gamma(2z)-2\log 2\cdot\mathrm{Im}\,z+\arg\Gamma(z)+\arg\Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right)$$

和

$$\arg\Gamma(z)+\arg\Gamma(1-z)=-\arg\sin\pi z.$$

由这两个恒等式消去 $\arg\Gamma(z)$，我们有

$$-\arg\Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right)+\arg\Gamma(1-z)$$

$$=-\arg\Gamma(2z)+2\log 2\cdot\mathrm{Im}\,z-\arg\sin\pi z$$

将(93.4)式的 z 代入上式右边，然后从(93.5)式得到，

$$\delta_0-\frac{\pi}{2}=\{\arg\Gamma(2iq)-2q\log 2\}+\left\{-\arg\Gamma(\lambda+2iq)+2q\log 2-\arg\sin\pi\left(\frac{\lambda}{2}+iq\right)\right\}$$

或

$$\delta_0=\frac{\pi}{2}+\arg\Gamma(2iq)-\arg\Gamma(\lambda+2iq)$$
$$-\tan^{-1}\left(\cot\frac{\pi\lambda}{2}\tanh\pi q\right) \qquad (93.6)$$

剩下的两个 Γ 函数的辐角用两个级数来表示

$$\arg\Gamma(\lambda+2iq)=2q\left\{-C+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{n}-\frac{1}{2q}\tan^{-1}\frac{2q}{\lambda+n-1}\right)\right\}$$

和

$$\arg\Gamma(2iq)=2q\left\{-C+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{n}-\frac{1}{2q}\tan^{-1}\frac{2q}{n-1}\right)\right\}$$

两者之差是

$$\arg\Gamma(2iq)-\arg\Gamma(\lambda+2iq)$$
$$=\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\tan^{-1}\frac{2q}{\lambda+n-1}-\tan^{-1}\frac{2q}{n-1}\right\}$$
$$=\tan^{-1}\frac{2q}{\lambda}-\frac{\pi}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\tan^{-1}\frac{2q}{\lambda+n}-\tan^{-1}\frac{2q}{n}\right\}.$$

由此导出最后的公式

$$\delta_0=\tan^{-1}\frac{2q}{\lambda}-\tan^{-1}\left(\cot\frac{\pi\lambda}{2}\tanh\pi q\right)$$
$$+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\tan^{-1}\frac{2q}{\lambda+n}-\tan^{-1}\frac{2q}{n}\right\}. \qquad (93.7)$$

根据下式容易看到，散射粒子的能量为零时(即 $q=0$)，相角也趋向零，

$$\lim_{q\to0}\frac{\delta_0}{2q}=\frac{1}{\lambda}-\frac{\pi}{2}\cot\frac{\pi\lambda}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{\lambda+n}-\frac{1}{n}\right). \qquad (93.8)$$

结果散射截面

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{\alpha^2}\left(\frac{\sin\delta_0}{2q}\right)^2 \qquad (93.9)$$

在零能量时趋向一有限值，只有当 $\cot\frac{\pi}{2}\lambda$ 变成无穷大(即 λ 是偶整数)时 $\sigma\to\infty$ 是例外. 这可以解释为，对于这些 λ 值势阱中的一个能级位置恰好在 $E=0$ 处，从而引起的一种共振现象.

由(93.7)式和(93.9)式计算 δ_0 和 σ 纯粹是技巧问题，因此将不作详细讨论. 然而，必须提到的是，对于整数 λ(偶数或奇数)，

(93.7)式中的求和项是有限的，并且右边的第二项或者是零(当λ是奇数)或者是 $\pi/2$(当 λ 是偶数)，因此当 $\lambda=2n$ 时，

$$\delta_0=\frac{\pi}{2}-\sum_{n=1}^{2n-1}\tan^{-1}\frac{2q}{n}$$

当 $\lambda=2n+1$ 时

$$\delta_0=-\sum_{n=1}^{2n}\tan^{-1}\frac{2q}{n}.$$

若 λ 不是整数，则 (93.7) 式中的无限求和可以展开成 $2q$ 的幂级数．令 $\lambda-N=\mu$，其中 N 是比 λ 小而最接近 λ 的一个整数$(0<\mu<1)$，则可以写出

$$\sum_{n=0}^{\infty}\tan^{-1}\frac{2q}{\lambda+n}=\sum_{n=N}^{\infty}\tan^{-1}\frac{2q}{n+\mu}$$

和

$$\sum_{n=N}^{\infty}\left\{\tan^{-1}\frac{2q}{n+\mu}-\tan^{-1}\frac{2q}{n}\right\}=\sum_{\nu=0}^{\infty}(-1)^{\nu}\frac{C_\nu}{2\nu+1}(2q)^{2\nu+1}$$

其中

$$C_\nu=\sum_{n=N}^{\infty}\left\{\frac{1}{(n+\mu)^{2\nu+1}}-\frac{1}{n^{2\nu+1}}\right\}=\sum_{n=N}^{\infty}\frac{1}{n^{2\nu+1}}\left[\left(1+\frac{\mu}{n}\right)^{-(2\nu+1)}-1\right]$$

$$=\sum_{n=N}^{\infty}\frac{1}{n^{2\nu+1}}\left\{-(2\nu+1)\frac{\mu}{n}+\binom{-(2\nu+1)}{2}\frac{\mu^2}{n^2}+\cdots\right\}$$

这里二项式展开的每一项可以表示成自变量为 $2\nu+2$, $2\nu+3$ 等等的 ζ 函数．这个方法给出的级数展开收敛得更快．

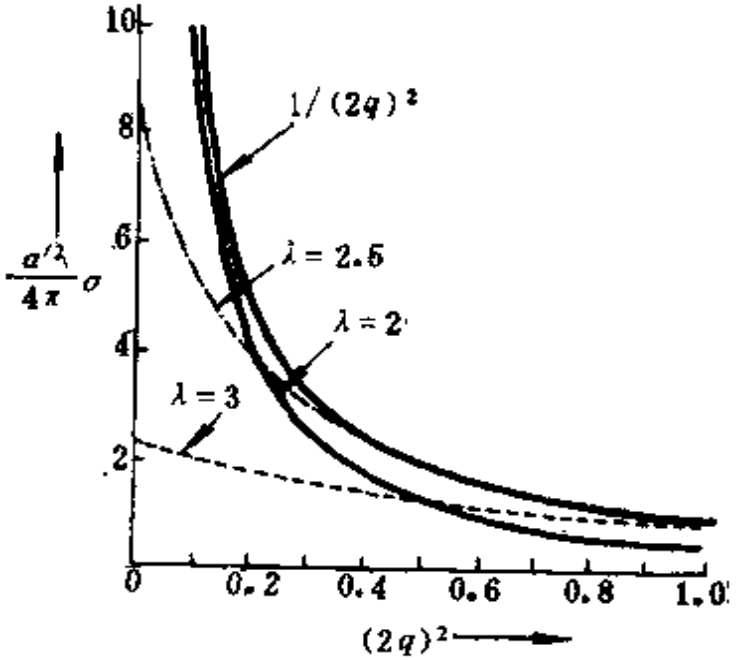


图 54　三种变型普薛耳-特勒势阱的散射截面．
双曲线确定了永远不会被 σ_0 超过的极限值 $4\pi/k^2$

图 54 中画出了截面随散射粒子能量变化的一些数值结果，截面和能量都用了适当的单位. $l=0$ 的散射决不会超过相应于极值 $\sigma=4\pi/k^2$ 的双曲线 $1/(2q)^2$. 当 $\lambda=2$ 时，在零能量处有共振；对于 $\lambda=2.5$ 和 $\lambda=3$ 两条曲线，截面极限是有限的. 在 $\lambda=2.5$ 的情况下，大约在 $(2q)^2=0.6$ 处接近一条虚能级 $\left(\delta_0=\frac{\pi}{2}\right)$，因此截面曲线非常靠近这个能量附近的极限双曲线. 对于 $\lambda=4$，(在图中没有画出来) 在 $(2q)^2=1$ 处，截面降到零 $(\delta_0=\pi)$，但在更大能量处又重新出现.

问题 94　径向积分方程

试用一积分方程代替径向微分方程

$$\chi_l''+\left[k^2-U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0, \tag{94.1}$$

其中 $k^2=2mE/\hbar^2$，$U(r)=2mV(r)/\hbar^2$. 怎样能使这个积分方程具有对称核的形式？怎样使 χ_l 的渐近相角表示为一个积分？用逐级近似法求得的积分方程的解怎样与玻恩近似相联系？

解　形式上可以将方程(94.1)写成一个非齐次微分方程

$$D\chi_l(r)=F(r), \tag{94.2}$$

其中

$$D=\frac{d^2}{dr^2}+k^2-\frac{l(l+1)}{r^2};\quad F(r)=U(r)\chi_l(r), \tag{94.3}$$

其中 $F(r)$ 可以认为是非齐次项，齐次方程

$$D\chi_l=0$$

的基本解是

$$j_l(kr)\to\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right);\quad n_l(kr)\to-\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right) \tag{94.4}$$

非齐次方程(94.2)的解，可以由齐次方程的解与非齐次方程的一

个特解叠加而成，而后者由格林函数 $G(r, r')$ 确定，

$$\chi_l(r) = Aj_l(kr) + B n_l(kr) + \int_0^\infty dr' G(r, r') F(r'). \tag{94.5}$$

格林函数被定义为下面两个联立方程的解：

$$DG(r, r') = \delta(r - r') \text{ 和 } D'G(r, r') = \delta(r - r');$$

例如

$$G(r, r') = \begin{cases} \dfrac{1}{k} j_l(kr) n_l(kr') & \text{对于 } r < r' \\ \dfrac{1}{k} n_l(kr) j_l(kr') & \text{对于 } r > r' \end{cases} \tag{94.6}$$

就是这样的解.

由于我们只对在原点 $r=0$ 处正则的波函数 $\chi_l(r)$ 感兴趣，因此可以在(94.5)中限定 $B=0$ 和 $A=1$(在任意归一化下)，于是得到

$$\chi_l(r) = j_l(kr) + \int_0^\infty dr' G(r, r') U(r') \chi_l(r'). \tag{94.7}$$

这就是所需要的积分方程.

现在来回答前面提出的几个具体问题.

a) 对称核　虽然非齐次积分方程(94.7)具有不对称核 $G(r, r')U(r')$. 可是利用代换

$$y(r) = \sqrt{U(r)}\,\chi_l(r);\ f(r) = \sqrt{U(r)}\, j_l(kr);$$
$$K(r, r') = \sqrt{U(r)U(r')}\, G(r, r') \tag{94.8}$$

就可以将它化为对称核的积分方程

$$y(r) = f(r) + \int_0^\infty dr' K(r, r') y(r') \tag{94.9}$$

其中

$$K(r, r') = K(r', r). \tag{94.10}$$

是对称核. 在下面的问题 95 中可以看到这种变换的优点.

b) 渐近相角　由于 $U(r')$ 只在 $0 \leqslant r' < R$ 的原子线度内不为

零，因此在整个积分范围内只有 $0\leqslant r'<R$ 区域内它才有贡献，这样，在讨论积分方程 (94.7) 的解 $\chi_l(r)$ 在大 r 值处的渐近行为时，$G(r, r')$ 可以只用 (94.6) 中 $r>r'$ 时的表示式．因此得到

$$\chi_l(r)\to\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)-\frac{1}{k}\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)$$
$$\times\int_0^\infty dr'\,U(r')\,j_l(kr')\,\chi_l(r'). \tag{94.11}$$

上式可写成

$$\chi_l(r)\to\frac{1}{\cos\delta_l}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right), \tag{94.12}$$

其中渐近相角 δ_l 决定于下列积分：

$$\tan\delta_l=-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr\,U(r)\,j_l(kr)\,\chi_l(r). \tag{94.13}$$

c) 逐级近似　得到的解按照次序

$$\chi_l^{(0)}=j_l(kr), \tag{94.14a}$$

$$\chi_l^{(1)}=j_l(kr)+\int_0^\infty dr'\,G(r, r')\,U(r')\,j_l(kr'), \tag{94.14b}$$

……

$$\chi_l^{(n)}(r)=j_l(kr)+\int_0^\infty dr'\,G(r, r')\,U(r')\,\chi_l^{(n-1)}(r'). \tag{94.14c}$$

构成一个诺埃曼级数，可以证明递推公式 (94.14 c)，除归一化常数外，与玻恩近似式

$$u_n(\boldsymbol{r})=e^{ikz}-\frac{1}{4\pi}\int d^3x'\,\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,U(r')\,u_{n-1}(\boldsymbol{r}') \tag{94.15}$$

完全相同(参见问题 105)．

为了证明(94.14 c)与(94.15)的等价性，必须将(94.15)中的函数展开成分波，我们可以写出(参见问题 81 和 82)

$$u_n(\boldsymbol{r})=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\,\tilde{\chi}_l^{(n)}(r)\,Y_{l,0}(\theta) \tag{94.16}$$

和

$$e^{ikz}=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l j_l(kr)Y_{l,0}(\theta) \qquad (94.17)$$

并利用展开式

$$\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}=\frac{1}{rr'}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,\Gamma_l(r,\,r')\,Y_{l,0}(\gamma) \qquad (94.18\,a)$$

其中 γ 是矢量 r 和 r' 之间的夹角，而

$$\Gamma_l(r,\,r')=\begin{cases}\dfrac{i}{k}\,j_l(kr)h_l^{(1)}(kr') & r<r'\\[2ex] \dfrac{i}{k}\,h_l^{(1)}(kr)j_l(kr') & r>r'\,.\end{cases} \qquad (94.18\,b)$$

然后在(94.15)式两边乘上 $Y_{l,0}(\theta)$，并对 r 的所有方向积分，就可以将(94.15)中的 l 分波投影出来．在(94.15)右边第二项中要利用积分

$$\oint d\Omega\, Y_{l,0}(\theta)Y_{l,0}(\gamma)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\;Y_{l,0}(\theta').$$

结果得到

$$\tilde{\chi}_l^{(n)}(r)=j_l(kr)-\frac{k}{4\pi}\,i^{-l}\int_0^{\infty}d^3x'U(r')u_{n-1}(r')$$
$$\times\frac{1}{r'}\,\Gamma_l(r,\,r')\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\;Y_{l,0}(\theta').$$

在上式的积分中对于 $u_{n-1}(r')$ 再利用类似于 (94.16) 的展开，则得

$$\tilde{\chi}_l^{(n)}(r)=j_l(kr)-\int_0^{\infty}dr'\,U(r')\,\Gamma_l(r,\,r')\,\tilde{\chi}_l^{(n-1)}(r'). \qquad (94.19)$$

这个递推方程已经很象(94.14c)了，为了证明(除了归一化外)它们是全同的，我们将 Γ_l 中的球汉克耳函数按定义换成

$$h_l^{(1)}=j_l+in_l,$$

这就给出

$$\Gamma_l(r, r') - \frac{i}{k} j_l(kr) j_l(kr') - G(r, r'), \qquad (94.20)$$

其中 G 就是原先由 (94.6) 式定义的格林函数. 这样一来, (94.20) 的第一项给出一个正比于 $j_l(kr)$ 的积分, 它可以与 (94.19) 右边的第一项合并为一项:

$$\tilde{\chi}_l^{(n)}(r) = A j_l(kr) + \int_0^\infty dr' U(r') G(r, r') \tilde{\chi}_l^{(n-1)}(r') \qquad (94.21)$$

其中常数

$$A = 1 - \frac{i}{k} \int_0^\infty dr' U(r') j_l(kr') \tilde{\chi}_l^{(n-1)}(r'). \qquad (94.22)$$

因此, 除因子 A 使得归一化稍有改变(不管怎么样, 它仍是任意的)外, (94.21) 确实与所要的方程 (94.14c) 完全相同.

注 如果要将对 $\chi_l(r)$ 的精确积分方程 (94.7) 与精确的积分方程

$$u(\boldsymbol{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} U(\boldsymbol{r}') u(\boldsymbol{r}') \qquad (94.15')$$

进行比较, n, $n-1$ 等等指标必须略去. 然后, 设

$$\tilde{\chi}_l(r) = A \chi_l(r)$$

则类似于 (94.21) 的积分方程变换为 (94.7) 式, 并且 (94.22) 变为

$$A = 1 - \frac{i}{k} A \int_0^\infty dr' U(r') j_l(kr') \chi_l(r'). \qquad (94.22')$$

这里可以再利用 (94.13) 式, 将 (94.22') 简化为

$$A = 1 + iA \tan \delta_l$$

或

$$A = e^{i\delta_l} \cos \delta_l.$$

更进一步考虑到渐近式 (94.12), 展开式 (94.16) 导致与 (82.9) 完全一致的结果:

$$u(\boldsymbol{r}) \to \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) Y_{l,0}(\theta)$$

问题 95 许温格(Schwinger)变分原理

试由上题中具有对称核的积分方程出发, 建立一个确定相移的变分原理.

解 将(94.9)式的非齐次项单独放在右边，则得

$$y(r)-\int_0^\infty dr' K(r, r')y(r')=f(r). \tag{95.1}$$

上式两边乘以 $y(r)$，并对 r 积分，得出

$$I_1=I_2 \tag{95.2}$$

其中

$$I_1=\int_0^\infty dr\, y(r)\left\{y(r)-\int_0^\infty dr' K(r, r')y(r')\right\} \tag{95.3}$$

和

$$I_2=\int_0^\infty dr\, y(r)f(r). \tag{95.4}$$

如果 $y(r)$ 满足(95.1)式，则 I_1 和 I_2 相等. 由上题的(94.8)和(94.13)式得到

$$I_2=\int_0^\infty dr\, U(r)j_l(kr)\chi_l(r)=-k\tan\delta_l. \tag{95.5}$$

现在我们取一邻近函数 $y(r)+\delta y(r)$ 代替正确的解 $y(r)$，这样一来，上述两个积分将改变

$$\delta I_1=2\int_0^\infty dr\,\delta y(r)\left\{y(r)-\int_0^\infty dr' K(r, r')\,y(r')\right\} \tag{95.6}$$

和

$$\delta I_2=\int_0^\infty dr\,\delta y(r)f(r). \tag{95.7}$$

在(95.6)式中必须假设积分核是对称的，因为在 $y(r')$ 的变分中，原来出现的是 $\delta y(r')$，而在(95.6)式中已经交换了积分变量，正是这种交换使 $\delta y(r')$ 变为 $\delta y(r)$，而 $K(r, r')$ 变为 $K(r', r)$.

又因为 $y(r)$ 是积分方程(95.1)的正确解，因此(95.6)式中的花括号可以用 $f(r)$ 代替，于是得到

$$\delta I_1=2\delta I_2. \tag{95.8}$$

由(95.2)和(95.8)可见

$$\frac{\delta I_1}{I_1}-2\frac{\delta I_2}{I_2}=0$$

或

$$\delta(I_1/I_2^2)=0. \tag{95.9}$$

这就是要寻找的变分原理. 详细写出来，就是必须使表示式 $S_l=I_1/I_2^2$, 亦即

$$S_l=\frac{\int_0^\infty dr\,U(r)\chi_l(r)\left\{\chi_l(r)-\int_0^\infty dr'\chi_l(r')U(r')G(r,r')\right\}}{\left[\int_0^\infty dr\,U(r)\chi_l(r)j_l(kr)\right]^2} \tag{95.10}$$

有极值:

$$\delta S_l=0 \tag{95.11}$$

由(95.5)式以及 $I_1=I_2$, 不难看出 S_l 的意义，即

$$S_l=-\frac{1}{k}\cot\delta_l. \tag{95.12}$$

因此 S_l 的极值直接确定了正确的相角 δ_l.

必须指出，这个变分原理与波函数的归一化无关，容易看出，如果在(95.10)式中用 $C\chi_l$ 代替 χ_l, 只会在分子和分母上多乘一个 C^2, 而 S_l 仍保持不变.

注　对于在一个吸引势上的极低能量 ($k\to0$) 的散射，只需要考虑 $l=0$ 的分波. 正如在问题 88 中已经证明的，我们可以引进散射长度

$$a_0=-\frac{1}{k}\tan\delta_0.$$

(95.12)式表明

$$\lim_{k\to0}k^2S_0(k)=\frac{1}{a_0}.$$

因此变分原理同样可以方便地用来确定散射长度.

文献　Schwinger, J.: Phys. Rev. **72**, 742A (1947). —— 也可参阅 Blatt, J. M., Jackson, J. D.: Phys. Rev. **76**, 18(1949).

问题 96　对于分波相移的逐级近似

将含势的项当作非齐次项，就可以将 $l=0$ 的径向薛定谔方程形式地写成一个非齐次微分方程. 这样一来，"解"就是一个对于

$\chi_0(r)$的积分方程，它又可以在玻恩的意义上用逐级近似法求解。因此 $\tan\delta_0$ 的二级近似可以表示为积分的形式.

解 $l=0$ 的薛定谔方程(下面略去 χ_0、δ_0 等符号中表示 $l=0$ 的下标 0)可写成

$$\chi''+k^2\chi=U\chi;\quad U=\frac{2m}{\hbar^2}V(r) \tag{96.1}$$

如果将上式右边当作非齐次项，则解可用格林函数，即方程

$$\frac{\partial^2 G}{\partial r^2}+k^2G=\delta(r-r')=\frac{\partial^2 G}{\partial r'^2}+k^2G \tag{96.2}$$

的解表示出来. 因此我们得到

$$\chi(r)=A\sin kr+B\cos kr+\int_0^\infty dr'G(r,\ r')U(r')\chi(r') \tag{96.3}$$

有各种各样的方法引进(96.3)中的格林函数，我们将采用

$$G(r,\ r')=\begin{cases}-\dfrac{1}{k}\sin k(r'-r) & \text{当 } r'<r,\\ 0 & \text{当 } r'>r\end{cases} \tag{96.4}$$

因为这时只要置 $B=0$ 就可使边界条件 $\chi(0)=0$ 得到满足. 在任意的归一化下($A=1$, 相移的确定与此无关)，我们最后得到伏尔特拉(Voltera)型的积分方程

$$\chi(r)=\sin kr-\frac{1}{k}\int_0^r dr'\sin k(r'-r)U(r')\chi(r'). \tag{96.5}$$

分解因子 $\sin k(r'-r)$，上式可以化为

$$\chi(r)=C(r)\sin kr+S(r)\cos kr \tag{96.6a}$$

其中

$$\begin{aligned}C(r)&=1+\frac{1}{k}\int_0^r dr'\cos kr'\,U(r')\chi(r');\\ S(r)&=-\frac{1}{k}\int_0^r dr'\sin kr'U(r')\chi(r')\end{aligned} \tag{96.6b}$$

当 $r\to\infty$ 时，如果势象 $r^{-q}(q>1)$ 一样地趋于零，则 $C(r)$和 $S(r)$

这两个振幅函数在 $r\to\infty$ 时将趋向于有限的极限，这时，由(96.6a)可见 $\chi(r)\sim\sin(kr+\delta)$. 因此，分波相移 δ 可由下式确定：

$$\tan\delta=\frac{S(\infty)}{C(\infty)}. \tag{96.7}$$

(96.6b)和(96.7)式表达了问题的严格解.

逐级玻恩近似的定义是假设 $U(r)$ 是一个一级小量. 现在我们概述一下近似的步骤，暂且用 λU 代替 U 并且将 χ 展开成"级参数" λ 的幂级数

$$\chi=\chi_0+\lambda\chi_1+\lambda^2\chi_2+\cdots \tag{96.8}$$

下标表示近似的"级"数，于是在二级近似下(96.5)式变成：

$$\chi_0(r)+\lambda\chi_1(r)+\lambda^2\chi_2(r)\cdots$$
$$=\sin kr-\frac{\lambda}{k}\int_0^r dr'\sin k(r'-r)U(r')\{\chi_0(r')+\lambda\chi_1(r')\cdots\}$$

或者，比较两边 λ 的同幂次项的系数，则得：

$$\chi_0(r)=\sin kr \tag{96.9a}$$

$$\chi_1(r)=-\frac{1}{k}\int_0^r dr'\sin k(r'-r)U(r')\sin kr'; \tag{96.9b}$$

$$\chi_2(r)=\frac{1}{k^2}\int_0^r dr'\sin k(r'-r)U(r')$$
$$\times\int_0^{r'}dr''\sin k(r''-r')U(r'')\sin kr'' \tag{96.9c}$$

这里 χ_0 是平面波的未受微扰的贡献. 在一级近似下，我们有 $\chi=\chi_0+\chi_1$，对于 χ 又可以象(96.6)那样将因子 $\sin k(r'-r)$ 分解，于是得出

$$\begin{aligned}C(r)&=1+\frac{1}{k}\int_0^r dr'U(r')\cos kr'\sin kr';\\ S(r)&=-\frac{1}{k}\int_0^r dr'U(r')\sin^2 kr'\end{aligned} \tag{96.10}$$

在这一近似下，$S(r)$ 可以与(96.7)式等同起来. 因此，一级近似

下的相角变成

$$\tan\delta=-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr'U(r')\sin^2kr'. \tag{96.11}$$

这就是一级玻恩近似(参见 106 题). 在二级近似下，必须再加上 χ_2，因而

$$\begin{aligned}
C(r)&=1+\frac{1}{k}\int_0^r dr'U(r')\cos kr'\left\{\sin kr'\right.\\
&\quad\left.-\frac{1}{k}\int_0^{r'}dr''U(r'')\sin k(r''-r')\sin kr''\right\};\\
S(r)&=-\frac{1}{k}\int_0^r dr'U(r')\sin kr'\left\{\sin kr'\right.\\
&\quad\left.-\frac{1}{k}\int_0^{r'}dr''U(r'')\sin k(r''-r')\sin kr''\right\}.
\end{aligned} \tag{96.12}$$

这表明近似是按 $\frac{1}{k}$ 来展开的，这一点是与玻恩方法的高能特征相对应的. 与此同时，随着近似级数的增加，U 的幂次也随之增加.

现在按(96.7)式由(96.12)式来建立 $\tan\delta$ 的表示式，我们可以用同样的方法展开 $1/C(\infty)$. 由于 $S(\infty)$ 与 $1/k$ 成正比，为了得到一个正确到 $1/k^2$ 的结果，在 $C(\infty)$ 中只取一级近似就够了. 因此

$$\begin{aligned}
\tan\delta&=\left\{-\frac{1}{k}\int_0^\infty drU(r)\sin^2kr\right.\\
&\quad\left.+\frac{1}{k^2}\int_0^\infty drU(r)\sin kr\int_0^r dr'U(r')\sin k(r'-r)\sin kr'\right\}\\
&\quad\times\left\{1-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr'U(r')\cos kr'\sin kr'\right\}\\
&=-\frac{1}{k}\int_0^\infty drU(r)\sin^2kr\\
&\quad+\frac{1}{k^2}\int_0^\infty drU(r)\sin^2kr\int_0^\infty dr'U(r')\sin kr'\cos kr'\\
&\quad+\frac{1}{k^2}\int_0^\infty drU(r)\sin kr\int_0^r dr'U(r')\sin k(r'-r)\sin kr'.
\end{aligned}$$

将 $1/k^3$ 的项合并后，最后得到

$$\tan\delta=-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr\,U(r)\sin^2 kr\left\{1-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr'U(r')\sin 2kr'\right\} \tag{96.12a}$$

或

$$\tan\delta=-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr\,U(r)\sin kr\left\{\sin kr-\frac{2}{k}\cos kr\int_0^r dr'\,U(r')\sin^2 kr'\right\}. \tag{96.12b}$$

这就是相移的二级近似公式.

注　同样的方法可以应用于 $l>0$ 的分波，唯一的差别是三角函数 $\sin kr$ 和 $\cos kr$ 必须用球贝塞耳函数 $j_l(kr)$ 和 $-n_l(kr)$ 来代替.

问题 97　卡洛盖罗 (Calogero) 方程

对于函数

$$t(r)=\frac{S(r)}{C(r)} \tag{97.1}$$

(其中 $S(r)$ 和 $C(r)$ 的定义见上题)试建立一个一阶非线性微分方程，并导出这个方程解的二级 Born 近似表示式.

解　在上题中已经证明[见(96.6a, b)式]在

$$\chi(r)=C(r)\sin kr+S(r)\cos kr \tag{97.2}$$

中的振幅函数及其微商是

$$\begin{aligned}
C(r)&=1+\frac{1}{k}\int_0^r dr'U(r')\cos kr'\,\chi(r');\\
C'(r)&=\frac{1}{k}U\cos kr\,\chi(r);\\
S(r)&=-\frac{1}{k}\int_0^r dr'\,U(r')\sin kr'\,\chi(r');\\
S'(r)&=-\frac{1}{k}U\sin kr\,\chi(r).
\end{aligned} \tag{97.3}$$

对(97.1)式进行微商，得到

$$t' = \frac{CS' - SC'}{C^2}$$

其中分子

$$CS' - SC' = -\frac{U}{k}\chi\{C\sin kr + S\cos kr\} = -\frac{U}{k}\chi^2(r).$$

因此

$$\frac{dt}{dr} = -\frac{1}{k}U(r)\{\sin kr + t(r)\cos kr\}^2 \qquad (97.4)$$

这就是要求的关于 $t(r)$ 的微分方程，称为卡洛盖罗方程.

如果我们仍用 λU 代替 U，并且 $t(r)$ 按 λ 的幂次展开，

$$t = \lambda t_1 + \lambda^2 t_2 + \lambda^3 t_3 + \cdots, \qquad (97.5)$$

就可以得到各级玻恩近似. 将(97.5)代入(97.4)式，比较两边 λ 同幂次项的系数，则得：

$$t_1' = -\frac{U}{k}\sin^2 kr; \qquad (97.6a)$$

$$t_2' = -\frac{U}{k}t_1\sin 2kr \qquad (97.6b)$$

$$t_3' = -\frac{U}{k}\{t_2\sin 2kr + t_1\cos^2 kr\} \qquad (97.6c)$$

等等，用简单的积分方法可以逐级解出这些方程.

方程(97.6a)相应于一级玻恩近似，由此可得

$$t_1(r) = -\frac{1}{k}\int_0^r dr' U(r')\sin^2 kr' \qquad (97.7)$$

和渐近相移公式

$$\tan\delta = t_1(\infty) = -\frac{1}{k}\int_0^\infty dr\, U(r)\sin^2 kr. \qquad (97.8)$$

由(97.6a)和(97.6b)可得到二级玻恩近似 $t_1 + t_2$：

$$t(r) = -\frac{1}{k}\int_0^r dr' U(r')\sin kr'\left\{\sin kr' - \frac{2}{k}\cos kr'\int_0^{r'} dr'' U(r'')\sin^2 kr''\right\} \qquad (97.9)$$

由此得出相移公式

$$\tan\delta = -\frac{1}{k}\int_0^\infty dr U(r)\sin kr\left\{\sin kr - \frac{2}{k}\cos kr\int_0^r dr' U(r')\sin^2 kr'\right\}, \qquad (97.10)$$

和上题中的(96.12b)完全一致.

问题98 卡洛盖罗方程的线性化

试在 $|t(\infty)|\ll 1$ 的假设下，近似求解卡洛盖罗微分方程(97.4).

解 对于小的 $t(r)$，在卡洛盖罗方程

$$\frac{dt}{dr} = -\frac{1}{k}U(r)\{\sin kr + t(r)\cos kr\}^2 \qquad (98.1)$$

或

$$\frac{dt}{dr} = -\frac{U}{k}\{\sin^2 kr + t\sin 2kr + t^2\cos^2 kr\}$$

中的最后一项可以略去，于是得到一个对于近似函数 $\tilde{t}(r)$ 的线性方程

$$\frac{d\tilde{t}}{dr} = -\frac{U}{k}\{\sin^2 kr + \tilde{t}\sin 2kr\}. \qquad (98.2)$$

将上式与上题的(97.6)式比较，立即看出二级玻恩近似公式

$$\frac{d}{dr}(t_1+t_2) = -\frac{U}{k}\{\sin^2 kr + t_1\sin 2kr\}$$

比(98.2)式还差，因为在(98.2)式右边的函数 $\tilde{t}$ 和左边的相同，这相当于在上式右边再加上(97.6c)式中的第一项. 因此，线性化的方法一步就给出了定性地处于二级和三级玻恩近似之间的解.

方程(98.2)的满足边界条件

$$\tilde{t}(0) = 0 \qquad (98.3)$$

的解可用标准方法求得:

$$\tilde{t}(r) = -\frac{1}{k}\int_0^r dr' U(r')\sin^2 kr' \exp\left\{-\frac{1}{k}\int_{r'}^r dr'' U(r'')\sin 2kr''\right\}. \qquad (98.4)$$

如果将指数按 $1/k$ 的幂次展开，上式又回到二级玻恩近似式(97.9)。然而，必须指出，(98.4)式比(97.9)式要好得多，因为甚至在 k 很小或者 $U(r)$ 很大（如奇异势）这时玻恩表示式变得毫无意义的情况下，只要我们仅讨论排斥势($U(r)>0$)，(98.4)式仍然给出一个完全确定的解。

问题 99　负幂势的散射长度

试用如下两种方法确定排斥势

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\equiv U(r)-\frac{g^2}{r_0^2}\left(\frac{r_0}{r}\right)^n \tag{99.1}$$

的散射长度：a）对 $k=0$ 的薛定谔方程严格积分，

b）解线性化的卡洛盖罗方程。

解　a）在零能量极限下，$l=0$ 的径向薛定谔方程写成

$$\chi_0''-g^2x^{-n}\chi_0=0;\quad x=r/r_0 \tag{99.2}$$

满足边界条件 $\chi_0(0)=0$ 的解是

$$\chi_0=C\sqrt{x}\,K_{\frac{1}{2\lambda}}\left(\frac{g}{\lambda}x^{-\lambda}\right);\quad \lambda=\frac{n-2}{2} \tag{99.3}$$

其中 $K_\nu(z)$ 是修正汉克尔函数

$$K_\nu(z)=\frac{\pi}{2\sin\nu\pi}[I_{-\nu}(z)-I_\nu(z)]$$

$$=\frac{i\pi}{2}e^{\frac{i\nu\pi}{2}}H_\nu^{(1)}(iz). \tag{99.4}$$

它在 $|z|\to\infty$ 时的渐近行为是

$$K_\nu(z)\to\sqrt{\frac{\pi}{2z}}e^{-z}. \tag{99.5}$$

由于 x 很小时，(99.3)中 K 的宗量变得很大，因此可以应用(99.5)式而得到

$$\chi_0\simeq C\sqrt{\frac{\pi\lambda}{2g}}x^{\frac{\lambda+1}{2}}e^{\frac{g}{\lambda}x^{-\lambda}},$$

因此边界条件 $\chi_0(0)$ 得以满足.

另一方面，如果 x 大而 z 小，我们可以利用 $I_{\pm\nu}(z)$ 的幂级数展开，由(99.4)式得

$$K_\nu(z)=\frac{\pi}{2\sin\nu\pi}\left\{\frac{1}{\Gamma(1-\nu)}\left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu}\left[1+\frac{z^2}{4(1-\nu)}+\cdots\right]\right.$$
$$\left.-\frac{1}{\Gamma(1+\nu)}\left(\frac{z}{2}\right)^{\nu}\left[1+\frac{z^2}{4(1+\nu)}+\cdots\right]\right\}$$

为了求得在大距离 r 上 χ_0 的渐近行为，只需要取每一个级数的第一项，即

$$\chi_0(x)=C\sqrt{x}\,\frac{\pi}{2\sin\frac{\pi}{2\lambda}}\left\{\frac{1}{\Gamma\left(1-\frac{1}{2\lambda}\right)}\left(\frac{2\lambda}{g}\right)^{\frac{1}{2\lambda}}\sqrt{x}\right.$$
$$\left.-\frac{1}{\Gamma\left(1+\frac{1}{2\lambda}\right)}\left(\frac{g}{2\lambda}\right)^{\frac{1}{2\lambda}}\frac{1}{\sqrt{x}}\right\}. \qquad (99.6)$$

它是 x 的线性函数，可以写成

$$\chi_0(x)=A\left(1-\frac{r_0x}{a}\right) \qquad (99.7)$$

其中 a，按定义，就是散射长度(参见问题88). 比较(99.6)和(99.7)式则得

$$a=r_0\frac{\Gamma\left(1-\frac{1}{2\lambda}\right)}{\Gamma\left(1+\frac{1}{2\lambda}\right)}\left(\frac{g}{2\lambda}\right)^{\frac{1}{\lambda}}. \qquad (99.8)$$

b) 将(99.1)式代入线性化的卡洛盖罗方程(98.4)，则得

$$\tan\delta_0=-\frac{g^2}{kr_0^2}\int_0^\infty dr\left(\frac{r_0}{r}\right)^n\sin^2kr$$
$$\times\exp\left\{-\frac{g^2}{kr_0^2}\int_r^\infty dr'\left(\frac{r_0}{r'}\right)^n\sin 2kr'\right\}; \qquad (99.9)$$

它决定了 χ_0 的渐近行为. 在 $k\to0$ 的极限下，

$$\chi_0 \propto \sin(kr+\delta_0) = \sin kr\cos\delta_0 + \cos kr\sin\delta_0$$
$$\to \sin\delta_0(1+kr\cot\delta_0),$$

将它与(99.7)比较，则得用相角定义的散射长度公式：

$$a = -\lim_{k\to 0}\frac{\tan\delta_0}{k}. \tag{99.10}$$

利用这个定义并引用 $r/r_0=x$, $r'/r_0=y$ 作为无量纲的积分变量，则由(99.9)式得到散射长度的近似表示式

$$\tilde{a} = g^2 r_0 \int_0^\infty dx\, x^{2-n}\exp\left(-2g^2\int_x^\infty dy\, y^{1-n}\right).$$

容易算出指数上的因子是 $-2g^2x^{2-n}/(n-2)$；利用代换

$$t = \frac{2g^2}{n-2}x^{2-n} = \frac{g^2}{\lambda}x^{-2\lambda},$$

$\tilde{a}$ 中的积分化为欧勒型，于是最后得到

$$\tilde{a} = \frac{1}{2}r_0(g^2/\lambda)^{\frac{1}{2\lambda}}\Gamma\left(1-\frac{1}{2\lambda}\right). \tag{99.11}$$

可以将近似结果(99.11)式和精确公式(99.8)式相比较. 二者和无量纲的耦合常数 g^2 有相同的依赖关系，因此它们的比值

$$\frac{\tilde{a}}{a} = \frac{1}{2}\Gamma\left(1+\frac{1}{2\lambda}\right)(4\lambda)^{\frac{1}{2\lambda}} \tag{99.12}$$

只是 λ 的函数，因而只是势的幂次 $n=2(\lambda+1)$ 的函数. 这一近似的好坏可以由列在附表中的几个数值来判断. 在 $n=3$ 时，近似值和精确值没有差别，随着 n 的增大，误差愈来愈大，在硬心散射 $(n=\infty)$ 的情况下，误差达到 50%.

n	$\tilde{a}/a$	n	$\tilde{a}/a$
3	1	8	0.702
4	0.886	10	0.665
5	0.810	12	0.642
6	0.762	∞	0.500

问题 100　卡洛盖罗方程的二级近似

试将卡洛盖罗方程线性化的方法推广为可以逐级求解的系统的方法，并计算上题中散射长度的二级近似.

解　如果我们将正确的方程

$$\frac{dt}{dr}=-\frac{U}{k}\{\sin^2 kr+t\sin 2kr+t^2\cos^2 kr\} \tag{100.1}$$

用一组递推方程

$$\frac{dt_n}{dr}=-\frac{U}{k}\{\sin^2 kr+t_n\sin 2kr+t_{n-1}^2\cos^2 kr\};\ t_0=0 \tag{100.2}$$

来代替，则在一级近似下，上式就回到线性方程

$$\frac{dt_1}{dr}=-\frac{U}{k}\{\sin 2kr+t_1\sin 2kr\} \tag{100.3}$$

在问题 98 中已求出它的解. 这样，任意一级的近似可以由前一级近似利用同样的积分步骤将一个线性方程积分而得到，只是非齐次项有所不同，即

$$t_n(r)=-\frac{1}{k}\int_0^r dr'\,U(r')\,[\sin^2 kr'+t_{n-1}(r')^2\cos^2 kr']$$
$$\times\exp\left\{-\frac{1}{k}\int_{r'}^r dr''\,U(r'')\sin 2kr''\right\} \tag{100.4}$$

因此，为了求二级近似，只要在线性解的被积函数中加上一个因子

$$[1+t_1(r')^2\cot^2 kr']. \tag{100.5}$$

在计算散射长度时，这一规则甚至可以更为简化. 由

$$a(r)=-\lim_{k\to 0}\frac{t(r)}{k} \tag{100.6}$$

定义的"内插"散射长度，在一级近似下，变成

$$a_1(r)=\int_0^r dr'\,U(r')r'^2\exp\left\{-2\int_{r'}^r dr''\,U(r'')r''\right\}; \tag{100.7}$$

散射长度的二级近似，$a_2(\infty)\equiv a_2$，是

$$a_2=\int_0^\infty dr\,U(r)r^2\left[1+\frac{a_1(r)^2}{r^2}\right]\exp\left\{-2\int_r^\infty dr'\,U(r')r'\right\} \tag{100.8}$$

现在我们应用(100.7)和(100.8)来确定负幂势

$$U(r)=\frac{g^2}{r_0^2}\left(\frac{r_0}{r}\right)^n \tag{100.9}$$

的散射长度，利用缩写

$$x=r/r_0;\quad y=r'/r_0;\quad z=r''/r_0;\quad \lambda=\frac{n-2}{2} \tag{100.10}$$

则有

$$\begin{aligned}a_1(r)&=g^2r_0\int_0^x dy\,y^{2-n}\exp\left\{-2g^2\int_y^x dz\,z^{1-n}\right\}\\&=g^2r_0\int_0^x dy\,y^{-2\lambda}\exp\left\{\frac{g^2}{\lambda}\left(x^{-2\lambda}-y^{-2\lambda}\right)\right\}.\end{aligned}$$

代换变量

$$s=\frac{g^2}{\lambda}x^{-2\lambda}\quad 和\quad t=\frac{g^2}{\lambda}y^{-2\lambda}, \tag{100.11}$$

则 $a_1(r)$ 化为

$$a_1(r)=\frac{1}{2}r_0(g^2/\lambda)^{\frac{1}{2\lambda}}e^s\int_s^\infty dt\,t^{-\frac{1}{2\lambda}}e^{-t}. \tag{100.12}$$

将它代入(100.8)式，则得

$$\begin{aligned}a_2=&\frac{1}{2}r_0(g^2/\lambda)^{\frac{1}{2\lambda}}\int_0^\infty ds\,s^{-\frac{1}{2\lambda}}e^{-s}\\&\times\left\{1+\frac{1}{4}s^{\frac{1}{\lambda}}e^{2s}\left[\int_s^\infty dt\,t^{-\frac{1}{2\lambda}}e^{-t}\right]^2\right\}\end{aligned} \tag{100.13}$$

花括号中的第一项自然给出(99.11)式的一级近似 a_1. 修正

$$\alpha=\frac{a_2-a_1}{a_1};\quad a_2=a_1(1+\alpha) \tag{100.14}$$

不难由(100.13)求出

$$\alpha=\frac{1}{4\Gamma\left(1-\frac{1}{2\lambda}\right)}\int_0^\infty ds\,s^{\frac{1}{2\lambda}}e^s\left[\int_s^\infty dt\,t^{-\frac{1}{2\lambda}}e^{-t}\right]^2 \tag{100.15}$$

上式中的积分是收敛的，通常可以用数值计算法算出。

有两种情况，即 $n=4$ 和 $n\to\infty$，可以使计算简化。

如果 $n=4$ 或 $\lambda=1$，则得

$$\alpha=\frac{1}{4\sqrt{\pi}}\int_0^\infty ds\sqrt{s}\,e^s\left[\int_s^\infty\frac{dt}{\sqrt{t}}e^{-t}\right]^2$$

或

$$\alpha=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\int_0^\infty d\xi\,\xi^2 e^{\xi^2}(\operatorname{erfc}\xi)^2.$$

利用辛普森(Simpson)规则进行数值积分，并利用误差函数的渐近表示式对 $\xi>2.4$ 以外的贡献作一估计后给出 $\alpha=0.0770$. 在99题末的附表中已给出，对于 $n=4$, $a_1=0.886a$. 将这 α 和 a_1 的值代入(100.14)，则得二级近似

$$a_2=0.886\times1.077a=0.954a.$$

由此可见，一级近似下的误差11.4%，在二级近似下减小到4.6%.

在 $n\to\infty$ 或 $1/\lambda=0$ 的情况，上述近似方程的收敛性不好。(100.15)给出

$$\alpha=\frac{1}{4}\int_0^\infty ds\,e^s\left[\int_s^\infty dt\,e^{-t}\right]^2=\frac{1}{4}.$$

由于

$$a_1=0.500a$$

因此得到

$$a_2=0.625a$$

问题101　方阱势：散射长度

试求方阱势

$$U=\frac{2m}{\hbar^2}V(r)=\begin{cases}-K_0^2 & 0\leqslant r\leqslant R\\ 0 & r>R\end{cases}\qquad(101.1)$$

的散射长度并与由线性化的卡洛盖罗方程得到的近似值比较. 如果将(101.1)中的 $-K_0^2$ 改为 $+K_0^2$，则 U 变成排斥势，这时结果有何不同?

解 利用缩写

$$kR=x;\quad K_0R=X_0;\quad KR=X=\sqrt{X_0^2+x^2} \tag{101.2}$$

按照89题的(89.6)式,有严格的关系式

$$\tan\delta_0=\frac{x-L\tan x}{L+x\tan x} \tag{101.3}$$

其中,对于势(101.1),对数微商[见(89.5)式]是

$$L=X\cot X. \tag{101.4}$$

散射长度由下式定义:

$$a=-\lim_{k\to 0}\frac{\tan\delta_0}{k}, \tag{101.5}$$

在我们的特殊情况下[也可参看(89.14)式]

$$a=-R\lim_{\substack{x\to 0\\ X\to X_0}}\frac{\tan\delta_0}{x}=-R\left(\frac{\tan X_0}{X_0}-1\right) \tag{101.6}$$

另一方面,98题的线性化卡洛盖罗方程给出

$$\tan\tilde{\delta}_0=-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr\,U(r)\sin^2 kr$$

$$\times\exp\left[-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr'\,U(r')\sin 2kr'\right]$$

考虑到定义(101.5),进一步给出

$$\tilde{a}=\int_0^\infty dr\,r^2U(r)\exp\left[-2\int_r^\infty dr'\,r'U(r')\right]. \tag{101.7}$$

利用势阱(101.1),则得

$$\tilde{a}=-K_0^2\int_0^R dr\,r^2\exp[K_0^2(R^2-r^2)]$$

或者,引入变量 $t=X_0r/R$,则

$$\tilde{a}=-R\frac{e^{X_0}}{X_0}\int_0^{X_0}dt\,t^2e^{-t} \tag{101.8}$$

利用恒等式

$$\int_0^{X_0}dt\,t^2e^{-t}=\frac{1}{2}\int_0^{X_0}dt\,e^{-t}-\frac{1}{2}X_0e^{-X_0}$$

可以将(101.8)中的积分化为误差函数. 因此最后得到

$$\tilde{a}=-\frac{1}{2}R\left\{\frac{e^{X_0}}{X_0}\int_0^{X_0}dt\,e^{-t^2}-1\right\} \tag{101.9}$$

对于 n 个不同的势阱大小 X_0, 精确值 (101.6) 与近似值 (101.9) 的比较列在附表中, 大约在 $X_0=0.7$ 以下, 二者之差很小. 另一方面, 在 $X_0=\pi/2$ 处, 吸引势的精确值 a 变成奇异的, 并且在越过 $X_0=\pi/2$ 以后, a 改变符号; 这种特征非近似方法所能给出. 因此只有在显著低于共振能级的零能量附近, 线性化近似的应用才是可靠的.

对于排斥势

$$U=\begin{cases}+K_0^2 & 0\leqslant r\leqslant R,\\ 0 & r>R\end{cases} \tag{101.10}$$

用类似的方法可求得精确的散射长度为

$$a=-R\left(\frac{\tanh X_0}{X_0}-1\right) \tag{101.11}$$

及其近似值

$$\tilde{a}=-\frac{1}{2}R\left\{\frac{e^{-X_0}}{X_0}\int_0^{X_0}dt\,e^{t^2}-1\right\} \tag{101.12}$$

在排斥势的情形下, 不存在共振效应, 因此近似比较好, a 和 $\tilde{a}$ 的比较见附表最后二列.

X_0	吸引		排斥	
	a/R	$\tilde{a}/R$	a/R	$\tilde{a}/R$
1.0	−0.557	−0.515	0.238	0.231
1.2	−1.142	−0.912	0.305	0.289
1.4	−3.14	−1.632	0.368	0.357
1.6	+20.4	−3.02	0.424	0.375

问题 102　汤川势的散射长度

试用如下三种办法确定吸引汤川势

$$V(r)=-V_0\frac{r_0}{r}e^{-r/r_0};\quad V_0=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{g}{r_0^2} \tag{102.1}$$

的散射长度.

a) 解线性化的卡洛盖罗方程

b) 对于 $g=1$ 的薛定谔方程进行数值积分

c) 玻恩近似

解　由于将卡洛盖罗方程线性化和利用玻恩近似都是典型的高能近似方法，因此不可能期望它们对于散射长度，即在零能量处，会给出可靠的结果. 正如在 98 题中所表明的，线性化的卡洛盖罗方程比二级玻恩近似好，当然比一级玻恩近似更好. 因此我们可以期望在本例中确实出现这样一种近似次序. 令人惊异的是，所得结果至少足以给出散射现象性质的一般印象，甚至在零能量处也如此.

a) 利用(98.4)式的 $\tilde{t}(r)$ 和散射长度的定义

$$a=-\lim_{k\to 0}\frac{\tan\delta_0}{k}, \tag{102.2}$$

并写出

$$U(x)=\frac{2m}{\hbar^2}V(r)=-\frac{g}{r_0^2}\frac{e^{-x}}{x}\quad \text{其中 } x=r/r_0, \tag{102.3}$$

则得到近似值

$$\tilde{a}=-gr_0\int_0^\infty dx\,xe^{-x}e^{2ge^{-x}} \tag{102.4}$$

利用变换

$$y=2ge^{-x}$$

则(102.4)可写为

$$\tilde{a}=-\frac{1}{2}r_0\int_0^{2g}dy\,e^y(\log 2g-\log y)$$

或者，利用指数积分

$$\mathrm{Ei}\,y=\int_{-\infty}^{y}\frac{dt}{t}\,e^t$$

进行分部积分后则得

$$\tilde{a}=-\frac{1}{2}r_0(\mathrm{Ei}\,2g-\log 2g-C), \qquad (102.5)$$

其中 $C=0.5772\cdots$ 是欧勒常数. 附表中给出了对于势强度参数 g 的一些值算出的数值结果.

g	$-\tilde{a}/r_0$	g	$-\tilde{a}/r_0$
0.1	0.1052	0.9	1.5425
0.2	0.2220	1.0	1.8420
0.3	0.3518	1.1	2.1835
0.4	0.4967	1.2	2.5740
0.5	0.6589	1.3	3.0217
0.6	0.8413	1.4	3.5362
0.7	1.0468	1.5	4.1290
0.8	1.2790		

b) 散射长度可以由零能量下的径向薛定谔方程

$$\chi_0''=-g\frac{e^{-x}}{x}\chi_0 \qquad (102.6)$$

的解确定，这个方程满足边界条件

$$\chi_0(0)=0;\quad \chi_0'(0)=1. \qquad (102.7)$$

在大 x 处，(102.6)式右边的势实际上变成零，解的渐近行为是 x 的线性函数

$$\chi_0\to A\left(1-\frac{x}{\alpha}\right), \qquad (102.8)$$

其中

$$\alpha=a/r_0 \qquad (102.9)$$

定义散射长度 a. 由(102.8)可得

$$-\alpha=\frac{\chi_0(x)}{\chi_0'(x)}-x. \tag{102.10}$$

由初始值(102.7)出发对(102.6)进行数值积分时，(102.10)的右边将慢慢地从零($x=0$ 处的值)增加到一个常数值(大 x 时的值)，由这个值可以按(102.9)定出散射长度. 对于 $g=1$ 的数值计算结果列在附表中，由大 x 处的 $-\alpha$ 值得出散射长度

$$a=-2.65\,r_0, \tag{102.11a}$$

这个结果可以和近似公式(102.5)[取 $g=1$]给出的

$$\tilde{a}=-1.842\,r_0 \tag{102.11b}$$

相比较.

x	χ	χ'	$-\alpha$
0	0	1	0
1	0.638	0.457	0.348
2	1.040	0.298	1.484
3	1.312	0.255	2.15
4	1.559	0.241	2.47
5	1.798	0.237	2.60
5.5	1.916	0.236	2.63
6	2.033	0.235	2.65

c) 由(102.4)式，只保留 g 的一次方项就得到一级玻恩近似：

$$a_1=-gr_0\int_0^\infty dx\,x\,e^{-x}=-gr_0$$

对于 $g=1$，则得

$$a_1=-r_0. \tag{102.11c}$$

如果在(102.4)的展开式中保留到 g^2 项，则得到二级玻恩近似

$$a_2=-gr_0\int_0^\infty dx\,x\,e^{-x}(1+2g\,e^{-x})=-gr_0\left(1+\frac{1}{2}\,g\right),$$

对于 $g=1$，则得

$$a_2 = -1.500\, r_0 \qquad (102.11\mathrm{d})$$

上述三种近似值与精确值的偏离随着势强度的增大而愈来愈大．近似程度的次序在本题开始时已预先示明．

问题 **96-102** 的文献 Calogero, F.: Nuovo Cimento **27**, 261 (1963). Klar, H., Krüger, H.: Z. Physik **191**, 409(1966); Krüger, H.: Z. Physik **204**, 114, **205**, 338(1967).

问题 103 球谐函数级数收敛性的改进

利用相邻勒让德多项式的递推关系，试对于$(1-x)f(x)$导出一个收敛性比级数

$$f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(x) \qquad (103.1)$$

来得好的级数．

解 利用递推关系

$$(l+1)P_{l+1}(x) + lP_{l-1}(x) = (2l+1)xP_l(x) \qquad (103.2)$$

可以写出

$$(1-x)f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l\left(P_l - \frac{l+1}{2l+1}P_{l+1} - \frac{l}{2l+1}P_{l-1}\right).$$

将下标重新编排，特别注意前几项，则得

$$(1-x)f(x) = f_0 - \frac{1}{3}f_1 + \sum_{l=1}^{\infty} \tilde{f}_l P_l(x), \qquad (103.3)$$

其中

$$\tilde{f}_l = f_l - \frac{l}{2l-1}f_{l-1} - \frac{l+1}{2l+3}f_{l+1}. \qquad (103.4)$$

为了对收敛性的改进有一个明确的概念，对于大的l，我们设

$$f_l = Cl^{-\varkappa},$$

则

$$\tilde{f}_l = C\left\{l^{-\varkappa} - \frac{l}{2l-1}(l-1)^{-\varkappa} - \frac{l+1}{2l+3}(l+1)^{-\varkappa}\right\}$$

$$= Cl^{-\varkappa}\left\{1 - \frac{l}{2l-1}\left(\frac{l}{l-1}\right)^{\varkappa} - \frac{l+1}{2l+3}\left(\frac{l}{l+1}\right)^{\varkappa}\right\}.$$

对于 $l\gg1$，上式可以展开为：

$$\tilde{f}_l=f_l\left\{1-\frac{1}{2}\left(1-\frac{1}{2l}\right)^{-1}\left(1-\frac{1}{l}\right)^{-\varkappa}\right.$$
$$\left.-\frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{l}\right)\left(1+\frac{3}{2l}\right)^{-1}\left(1+\frac{1}{l}\right)^{-\varkappa}\right\}.$$

因此 l^0 和 l^{-1} 的项相互抵消，留下的带头项变成

$$\tilde{f}_l=-f_l\frac{(\varkappa+1)^2}{2l^2}$$

这确实大大改进了级数的收敛性.

注 如果我们将这些系数写成通常情况下用到的形式

$$f_l=(2l+1)\alpha_l,$$

则(103.3)式可以大为简化，这时

$$(1-x)f(x)=\alpha_0-\alpha_1+\sum_{l=1}^{\infty}\{(2l+1)\alpha_l-l\alpha_{l-1}-(l+1)\alpha_{l+1}\}P_l(x).$$

文献 Yennie, D. R., Ravenhall, D. G., Wilson, R. N.: Phys. *Rev.* **95**, 500(1954).

问题 104 碰撞参数积分

设用 R 来度量散射区域的延伸范围，当 $kR\gg1$ 时，$l\gg1$ 的角动量对散射振幅有显著的贡献. 对 l 的求和将用对碰撞参数 b 的积分来代替；试用 WKB 方法导出 $\delta(b)$ 的高能表示式，并确定总散射截面.

解 在普遍公式

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,(e^{2i\delta_l}-1)\,P_l(\cos\theta) \qquad (104.1)$$

中，我们引入碰撞参数

$$b=\left(l+\frac{1}{2}\right)\Big/k, \qquad (104.2)$$

并用它作为积分变量，则 $f(\theta)$ 可写成：

$$f(\theta)=-ik\int_0^{\infty}db\,b\,(e^{2i\delta(b)}-1)\,P_l(\cos\theta). \qquad (104.3)$$

积分下限原来是 $1/2k$, 由于 $1/2k \ll R$, 因此可取作零. 要将 P_l 写成 b 的函数稍许有些困难. 用超几何级数定义的勒让德多项式是

$$P_l(\cos\theta) = {}_2F_1\left(l+1,\ -l,\ 1;\ \sin^2\frac{\theta}{2}\right) \qquad (104.4\text{a})$$

即

$$P_l(\cos\theta) = 1 - \frac{l(l+1)}{1!^2}\sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{(l-1)l(l+1)(l+2)}{2!^2}\sin^4\frac{\theta}{2}\cdots. \qquad (104.4\text{b})$$

现在来求当 $l \gg 1$ 时上式的渐近表达式. 引用缩写

$$\lambda = l + \frac{1}{2}, \qquad (104.5)$$

则得

$$l(l+1) = \lambda^2 - \frac{1}{4};\quad (l-1)(l+2) = \lambda^2 - \frac{9}{4};$$

$$(l-n)(l+n+1) = \lambda^2 - \left(n+\frac{1}{2}\right)^2.$$

因此级数(104.4b)化为

$$P_l(\cos\theta) = 1 - \frac{\lambda^2}{1!}\left(1 - \frac{1}{4\lambda^2}\right)\sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{\lambda^4}{2!^2}\left(1 - \frac{5}{2}\frac{1}{\lambda^2} + \frac{9}{16}\frac{1}{\lambda^4}\right)\sin^4\frac{\theta}{2} + \cdots$$

由于 $\lambda \gg 1$, 可以略去每一项系数中的 λ^{-2} 以上的小项, 则得

$$P_l(\cos\theta) = 1 - \frac{\lambda^2}{1!}\sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{\lambda^4}{2!^2}\sin^4\frac{\theta}{2}\cdots$$

这是贝塞耳级数, 于是我们得到

$$\lim_{l\to\infty} P_l(\cos\theta) = J_0\left((2l+1)\sin\frac{\theta}{2}\right). \qquad (104.6)$$

将上式代入(104.3)式, 考虑到(104.2), 则有

$$f(\theta) = -ik\int_0^\infty db\, b\,(e^{2i\delta(b)} - 1)J_0\left(2kb\sin\frac{\theta}{2}\right) \qquad (104.7)$$

处理高能问题时, 可以进一步用 WKB 近似下的准势公式

(124.7)来计算(104.7)式中的相角函数 $\delta(b)$，即

$$\delta(b)=-\frac{1}{2}k\int_b^\infty \frac{dt\,t}{\sqrt{t^2-b^2}}\frac{Q(t)}{E},$$

其中 $Q(t)$ 在高能极限下(即如果对所有 r 值，$|V(r)|\ll E$)，可以用 $V(r)$ 来代替，因此可将上式中的变量 t 再换成 r 而给出简单的结果

$$\delta(b)=-\frac{k}{2E}\int_b^\infty \frac{dr\,rV(r)}{\sqrt{r^2-b^2}}. \tag{104.8}$$

必须指出，上式对于 $V(r)$ 是线性的，因此对于由许多简单项相加而成的复合势[例如由二个或更多的负幂势组成的分子间的势(Lennard Jones 势等等)]，总的相角就等于各部分势贡献的和。

取 $\theta=0$ 时的积分(104.7)式，应用光学定理

$$\sigma=\frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\,f(0),$$

最后得到总截面的表示式

$$\sigma=4\pi\int_0^\infty db\,b[1-\cos 2\delta(b)] \tag{104.9}$$

注　对于高能散射现象，(104.6)式是一个合理的近似，它比熟知的渐近公式

$$P_l(\cos\theta)\to\sqrt{\frac{2}{\pi l\sin\theta}}\cos\theta\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta-\frac{\pi}{4}\right] \tag{104.6'}$$

好得多．上式在 $\theta=0$ 和 $\theta=\pi$ 处具有奇异性．在 $\theta=0$(朝前散射，这是我们最感兴趣的角度)附近，(104.6)式差不多是完全正确的；但是，当 θ 增大时，(104.6)式的近似程度变坏；当 $\theta=\pi$ 时，给出的是 $J_0(2l+1)$ 而不是 $(-1)^l$．在图 55 中画出了 P_{10} 和由(104.6)给出的近似表示式 $J_0\left(21\sin\frac{\theta}{2}\right)$ 之间的比较．虽然在 θ 增大时(104.6)式的误差愈来愈大，但是在高能下($kR\gg1$)，朝后散射($\theta=\pi$)非常小，因此这种误差不会显著影响本题的结果．

文献　Molière, G.: Z. Naturforsch. **2a**, 133(1947), Blankenbecler, R., Goldberger, M. L.: Phys. Rev. **126**, 766(1962). Flügge, S., Krüger, H.: Z. Physik **216**, 213(1968).

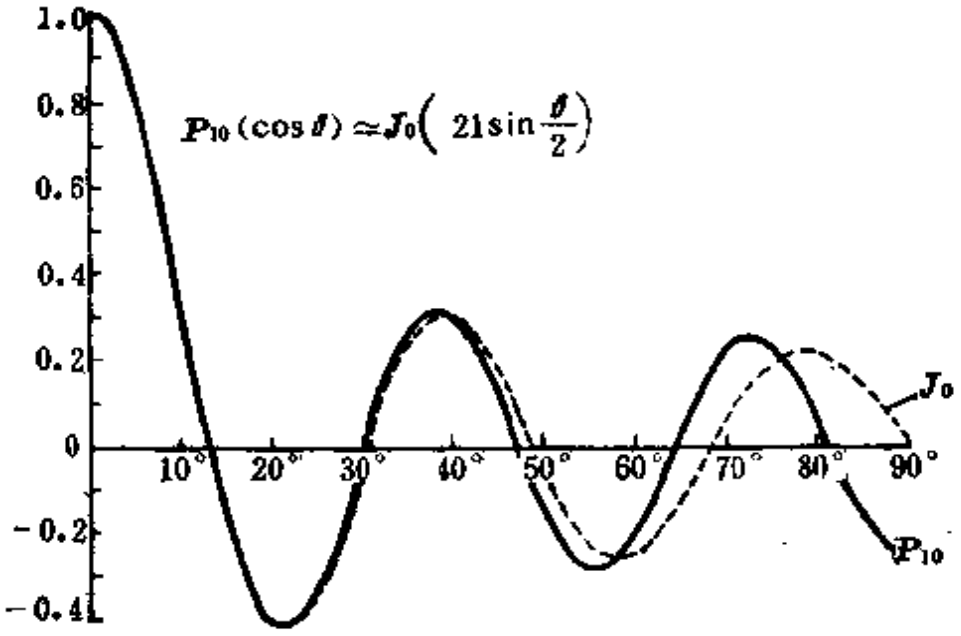


图 55　勒让德多项式 $P_{10}(\cos\theta)$ (实线)
和它的贝塞耳函数近似表示式(104.6)(虚线)

问题 105　玻恩散射: 逐级近似步骤

试用微扰法(将散射势当作微扰)解势散射问题. 比较详细地讨论中心力场的情况.

解　将薛定谔方程写成如下形式

$$\nabla^2 u + k^2 u = gW(\boldsymbol{r})u \tag{105.1}$$

其中

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E;\quad gW(\boldsymbol{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r}). \tag{105.2}$$

对应于(105.1)左边的格林函数是

$$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}. \tag{105.3}$$

这使方程(105.1)的右边形式上可当作非齐次项来处理,于是按照非齐次微分方程的一般解法,(105.1)的解可以写成

$$u(\boldsymbol{r}) = u_0(\boldsymbol{r}) + g\int d^3r' G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r}')u(\boldsymbol{r}'), \tag{105.4}$$

其中 $u_0(\boldsymbol{r})$ 是齐次微分方程的解. 上式是一个对于 $u(\boldsymbol{r})$ 的积分

方程.

不难看出,(105.4)式中的积分项对于大 r 渐近地描述一个出射球面波,因为势函数在 r' 增大时衰减很快,使得积分实际上只限于一个有限的区域,因此可以认为当 $r\gg r'$ 时,格林函数(105.3)变成

$$G(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{r}')\to-\frac{e^{ikr}}{4\pi r}e^{-ikr'\cos\Theta'} \tag{105.5}$$

其中 Θ' 是矢量 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$ 之间的夹角. 在散射问题中,齐次解 $u_0(\boldsymbol{r})$ 一定是描述入射粒子束的平面波,它的标准归一化形式是

$$u_0(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}};\quad |\boldsymbol{k}_0|=k. \tag{105.6}$$

(105.4)式可以用逐级近似法求解:

$$u_n(\boldsymbol{r})=u_0(\boldsymbol{r})+g\int d^3r'G(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r}')u_{n-1}(\boldsymbol{r}'); \tag{105.7}$$

换句话说,可以将它写成一个诺埃曼级数

$$u(\boldsymbol{r})=u_0(\boldsymbol{r})+g\int d^3r'\,G(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r}')\Big\{u_0(\boldsymbol{r}')$$
$$+g\int d^3r''\,G(\boldsymbol{r}',\ \boldsymbol{r}'')W(\boldsymbol{r}'')\,[u_0(\boldsymbol{r}'')+\cdots]\Big\}.$$

它是按"耦合参数" g 的幂次展开的. 要求第 n 级近似,就要计算 n 重体积积分,这使得除一级项外,其余各项的计算相当麻烦.

如果 $W(\boldsymbol{r})$ 只和 $\boldsymbol{r}$ 的绝对值有关,一级近似问题将大为简化. 这时,将 (105.5)和(105.6) 代入 (105.7), 则得 $u_1(\boldsymbol{r})$ 的渐近表示式:

$$u_1(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}}-\frac{ge^{ikr}}{4\pi r}\int d^3r'\,e^{-ikr'\cos\Theta'}W(r')e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}. \tag{105.8}$$

如果定义一个沿着 $\boldsymbol{r}$ 方向的矢量 $\boldsymbol{k}_1$, 并且 $|\boldsymbol{k}_1|=k$, 则 $kr'\cos\Theta'=(\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}')$,于是(105.8)式中的积分化为

$$\int_0^\infty dr'\,r'^2\oint d\Omega'\,e^{i(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1)\cdot\boldsymbol{r}'}W(r'). \tag{105.9}$$

矢量

$$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_0 \tag{105.10}$$

是入射粒子转移给 $\boldsymbol{r}$ 方向上散射粒子的动量(以 $\hbar$ 为单位). 如果用 θ 表示偏转角,即 $\boldsymbol{k}_0$ 和 $\boldsymbol{r}$ 之间的夹角,则(图 56)

$$K=2k\sin\frac{\theta}{2}. \tag{105.11}$$

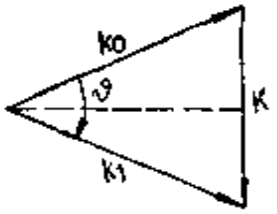


图 56 波矢量和偏转角

(105.9)式中对所有方向的积分给出

$$\oint d\Omega' e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}'}=4\pi\frac{\sin Kr'}{Kr'}, \tag{105.12}$$

因此(105.8)式给出一级近似解

$$u_1(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{105.13}$$

其中

$$f(\theta)=-g\int_0^\infty dr'\,r'^2W(r')\frac{\sin Kr'}{Kr'}. \tag{105.14}$$

散射振幅 $f(\theta)$ 与微分散射截面有如下简单的关系

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2. \tag{105.15}$$

如果(105.14)式中的积分在积分上限或下限处发散,则这个公式不能用来计算散射振幅. 因此在 $r'=0$ 附近,势不应比 $r'^{-3+\varepsilon}$ ($\varepsilon>0$)发散得更快,另一方面,对于大 r', 势 $V(r')$必须比库仑势下降得更快,即至少和 $r'^{-1-\varepsilon}$($\varepsilon>0$)一样快地趋于零.

问题 106 在汤川势上的散射

试利用一级玻恩近似求粒子在吸引汤川势

$$V(r)=-V_0\frac{e^{-\alpha r}}{r};\quad \alpha=\frac{1}{r_0} \tag{106.1}$$

上的散射振幅. 并利用分波展开的相角判断近似的好坏.

解 一方面我们有

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\,r^2V(r)\frac{\sin Kr}{Kr};\quad K=2k\sin\frac{\theta}{2}. \tag{106.2}$$

将(106.1)代入上式，积分后得出

$$f(\theta)=Pr_0\frac{1}{1+K^2r_0^2} \tag{106.3}$$

其中 P 是标志"势阱大小"的常数

$$P=\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2}. \tag{106.4}$$

另一方面，$f(\theta)$ 的分波展开式是

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,(e^{2i\delta_l}-1)\,P_l(\cos\theta). \tag{106.5}$$

为了利用相角 δ_l 来判断(106.3)式，只有将(106.3)式展成球谐函数的级数，或者将(106.2)式作同样的展开．然后把这结果用于汤川势的情形．当然，两种方法给出的结果是相同的，现概述如下．

1．散射振幅(106.3)的展开可写成

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{e^{2i\delta_l}-1}{2i}P_l(\cos\theta)=\frac{Px_0}{1+2x_0^2(1-\cos\theta)}$$

其中

$$x_0=kr_0. \tag{106.6}$$

利用球谐函数的正交性，则得

$$\frac{e^{2i\delta_l}-1}{2i}=\frac{P}{4x_0}\int_{-1}^{+1}\frac{dt\,P_l(t)}{t_0-t};\quad t_0=1+\frac{1}{2x_0^2}. \tag{106.7}$$

这里积分

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}\frac{dt\,P_l(t)}{t_0-t}=Q_l(t_0) \tag{106.8}$$

是第二类球谐函数($t_0>1$)．Q_0 和 Q_1 的具体表示式如下：

$$Q_0(t_0)=\frac{1}{2}\log\frac{t_0+1}{t_0-1};\quad Q_1(t_0)=\frac{1}{2}t_0\log\frac{t_0+1}{t_0-1}-1.$$

将(106.7)式的 t_0 代入上式，最后得到

$$\left.\begin{aligned}&\delta_l \simeq \frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l}-1) = P\varphi_l(x_0)\\ \text{其中}\quad &\varphi_0(x_0) = \frac{1}{4x_0}\log(1+4x_0^2);\\ &\varphi_1(x_0) = \frac{1}{4x_0}\left\{\left(1+\frac{1}{2x_0^2}\right)\log(1+4x_0^2)-2\right\}.\end{aligned}\right\} \quad (106.9)$$

2．为了展开散射振幅(106.2)，利用恒等式

$$\frac{\sin Kr}{Kr} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)j_l(kr)^2 P_l(\cos\theta); \quad (106.10)$$

将它代入(106.2)式，然后与(106.5)比较，则得适用于一般 $V(r)$ 的关系式

$$\delta_l \simeq \frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l}-1) = -\frac{2m}{\hbar^2}k\int_0^{\infty} dr\, r^2 V(r) j_l(kr)^2. \quad (106.11)$$

现在将(106.1)的汤川势 $V(r)$ 代入，并利用缩写

$$kr = z \text{ 和 } a = \alpha/k = 1/(kr_0) = 1/x_0,$$

则得

$$\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l}-1) = \frac{V_0}{Ea}\int_0^{\infty} dz\, z e^{-az} j_l(z)^2$$

利用普遍公式

$$j_l(z)^2 = \frac{2z^l}{l!}\int_0^{\pi/2} d\theta\, j_l(2z\sin\theta)\sin^{l+1}\theta\cos^{2l+1}\theta \quad (106.12)$$

代入上式，交换积分次序，先对 z 积分，考虑到

$$\int_0^{\infty} dz\, z^{l+1} j_l(bz)\, e^{-az} = \frac{(2b)^l l!}{(a^2+b^2)^{l+1}} \quad (106.13)$$

最后得到

$$\delta_l \simeq \frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l}-1) = \frac{P}{2x_0}\int_0^{\pi/2} d\theta\, \frac{\sin^{2l+1}\theta\cos^{2l+1}\theta}{(\sin^2\theta+\beta^2)^{l+1}}. \quad (106.14)$$

引入新变量

$$t=\sin^2\theta+\beta^2,$$

则(106.14)中的积分简化为

$$\frac{1}{2}\int_{\beta^2}^{1+\beta^2}dt\,\frac{(t-\beta^2)^l(1+\beta^2-t)^l}{t^{l+1}} \tag{106.15}$$

并且对于每一个 l 可以依次计算出来. 计算的结果仍然是(106.9)式中的表示式.

为了判断近似的好坏，在图 57 中画出了 $\varphi_0(x_0)$ 和 $\varphi_1(x_0)$ 随 x_0(对数标度)变化的曲线. 在 $x_0=0$ 处，φ_0 和 φ_1 都等于零；在低能下，它们可表示为

$$\begin{aligned}\varphi_0(x_0) &\doteq x_0(1-2x_0^2+\cdots)\\ \varphi_1(x_0) &\doteq \frac{2}{3}x_0(1-4x_0^2+\cdots)\end{aligned} \tag{106.16}$$

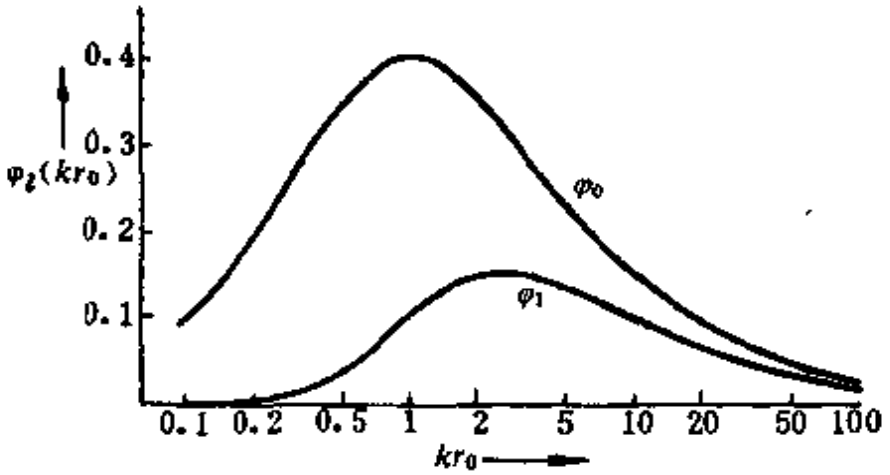


图 57　在一级近似下汤川势的散射相移是 $\delta_l=-P\varphi_l(kr_0)$. 其中 P 是一个标志势大小的参数. 能量采用对数标度

当 x_0 增大时，它们达到一个极大值，然后在能量很大时又趋向于零. 如果在所要的能量下，$P\varphi_0\ll1$ 并且 $kr_0\gg1$ 则玻恩近似是相当好的. 如果 $P\varphi_0\ll1$ 的条件满足得不够好，但 $P\varphi_1\ll1$，则我们可以把 $f(\theta)$ 分成两部分

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0}-e^{2i\delta_B})+f_B(\theta) \tag{106.17}$$

式中下标 B 表示玻恩近似(106.9)式(δ_{0B})和(106.3)式 ($f_B(\theta)$). 这时只要严格计算出 $l=0$ 的相角 δ_0; $f(\theta)$ 的其余部分可以总括在(106.3)的 $f_R(\theta)$ 之中.

注　一级玻恩近似下的计算结果表明，散射振幅(106.3)以及相角表示式(106.9)都是实的，这只有在 δ_l 是实的，并且 $|\delta_l|\ll 1$ 的情况下才成立，因为

$$\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l}-1)=e^{i\delta_l}\sin\delta_l$$

的展开式是

$$e^{i\delta_l}\sin\delta_l=\delta_l+i\,\delta_l^2+\cdots.$$

由于在总散射截面

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

中只出现 $\sin^2\delta_l=\delta_l^2-\frac{1}{3}\delta_l^4+\cdots$，因此只要满足条件 $\delta_l^2\ll 1$ 就够了.

问题 107　在指数势上的散射

试利用一级玻恩近似求粒子在势场

$$V(r)=-V_0e^{-\frac{r}{r_0}} \tag{107.1}$$

中散射的散射振幅，并从这个振幅中分出 $l=0$ 和 $l=1$ 的分波，计算出相角 δ_0 和 δ_1. 然后按照 96 题的步骤计算 δ_0 的二级玻恩近似并与上面得到的 δ_0 比较.

解　一级玻恩近似下的散射振幅是

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty}dr\,r^2V(r)\frac{\sin Kr}{Kr};\quad K=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{107.2}$$

引入缩写

$$P=\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2};\quad x_0=kr_0 \tag{107.3}$$

并用 $x=r/r_0$ 作为积分变量，则(107.2)可改写为

$$f(\theta)=\frac{P}{K}\int_0^\infty dx\,xe^{-x}\sin qx;\ q=2x_0\sin\frac{\theta}{2}. \qquad (107.4)$$

由基本的积分运算可得

$$f(\theta)=\frac{P}{K}\frac{2q}{(1+q^2)^2}$$

或

$$f(\theta)=\frac{2Pr_0}{(a-b\cos\theta)^2};\ a=1+2x_0^2;\ b=2x_0^2. \qquad (107.5)$$

由这个散射振幅可以先算出总散射截面：

$$\sigma=\oint d\Omega\,|f(\theta)|^2=4P^2r_0^2\cdot 2\pi\int_{-1}^{+1}\frac{d\cos\theta}{(a-b\cos\theta)^4},$$

积分后得到

$$\sigma=\frac{32\pi}{3}P^2r_0^2\frac{1+2x_0^2}{(1+4x_0^2)^2}. \qquad (107.6)$$

自然，在这一近似下，σ 既不依赖于 P 的符号(吸引势或排斥势)，也不依赖于共振效应．至此，(107.6)式是一个典型的高能公式，当 $x_0\gg1$ 时，它可以简化为

$$\sigma=\frac{4\pi}{3}P^2r_0^2\cdot\frac{1}{x_0^2}=\frac{4\pi}{3}\frac{P^2}{k^2},$$

由此可见，当能量 E 增大时，σ 象 $1/E$ 一样地下降．

现在进一步利用投影的办法求出在玻恩近似下的相角 δ_l，利用展开式：

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta) \qquad (107.7)$$

以及

$$\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l}-1)=\frac{k}{2}\int_{-1}^{+1}d\cos\theta f(\theta)P_l(\cos\theta). \qquad (107.8)$$

将(107.5)中的 $f(\theta)$ 代入上式，得到一些很简单的积分，计算结果是

$$\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_0}-1)=P\frac{2x_0}{1+4x_0^2} \qquad (107.9)$$

和

$$\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_1}-1)=P\left\{\frac{1+2x_0^2}{x_0(1+4x_0^2)}-\frac{1}{4x_0^3}\log(1+4x_0^2)\right\} \tag{107.10}$$

这些表示式同样可以写成 $e^{i\delta_l}\sin\delta_l$ 的形式，并且当 δ_l 很小时，就等于 δ_l. δ_0 和 δ_1（除以因子 P）随 x_0 的变化曲线已画在图 58 中. 由图显然可见，对于小的 x_0，相角 $\delta_1\ll\delta_0$，即与 S 波散射相比，可以忽略 P 波散射.（这种低能散射下的普遍特征，甚至在象玻恩近似这样典型的高能近似下仍然保留下来）. 对于 $x_0\gg1$，δ_0 和 δ_1 具有相同的数量级，于是朝前散射开始占优势.

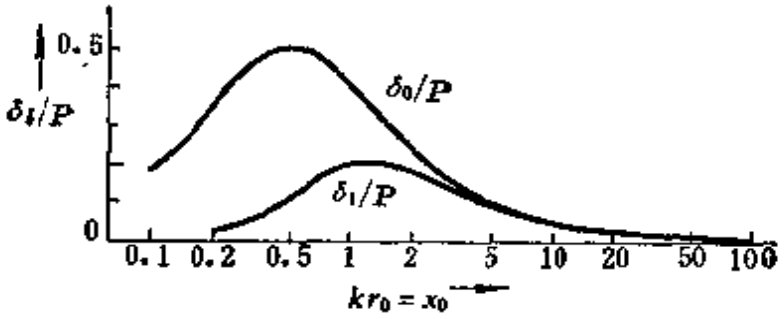


图 58　指数势的玻恩散射相角 δ_0 和 δ_1（以势大小参数 P 为单位）与 x_0（对数标度）的关系曲线

为了对玻恩近似的适用范围有些了解，现在我们来计算 δ_0 到二级玻恩近似，按照(96.12 a)式有

$$\tan\delta_0=-\frac{1}{k}\int_0^\infty dr\,U(r)\sin^2 kr\left\{1-\frac{1}{k}\int_r^\infty dr\,U(r')\sin 2kr'\right\} \tag{107.11}$$

其中 $U(r)=\dfrac{2m}{\hbar^2}V(r)$，　将(107.1)的 $V(r)$ 代入上式，考虑到(107.3)，并利用无量纲变量 $x=r/r_0$，$y=r'/r_0$，则得

$$\tan\delta_0=\frac{P}{x_0}\int_0^\infty dx\,e^{-x}\sin^2(x_0x)\left\{1+\frac{P}{x_0}\int_x^\infty dy\,e^{-y}\sin 2x_0y\right\}.$$

括号内的积分很容易计算，结果是

$$\int_x^\infty dy\, e^{-y} \sin 2x_0 y = \frac{e^{-x}}{1+4x_0^2}\{\sin 2x_0 x + 2x_0 \cos 2x_0 x\}.$$

然后将三角函数分解为复指数函数，积分的计算有些麻烦，但都是很基本的，最后的结果是

$$\tan\delta_0 = P\cdot\frac{2x_0}{1+4x_0^2}\left\{1+P\,\frac{5-4x_0^2}{8(1+x_0^2)\,(1+4x_0^2)}\right\}. \tag{107.12}$$

其中第一项与(107.9)相同. 只要上式花括号中的第二项比 1 小得多，玻恩近似将给出一个收敛性很好的级数，因此玻恩近似的适用范围是

$$|P\cdot g(x_0)| = \left|P\cdot\frac{5-4x_0^2}{8(1+x_0^2)\,(1+4x_0^2)}\right| \ll 1.$$

函数 $g(x_0)$ 已画在图 59 中(图的左半边和右半边纵坐标的标度不同).

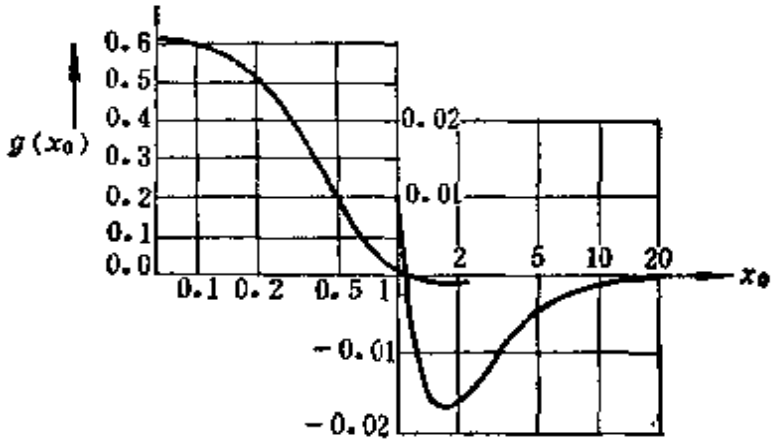


图 59 如果要求一级玻恩近似成立，函数 $|Pg|$ 必须很小

例 设势大小参数 $P=3$，并且认为振幅的误差在 2% 以内(散射强度误差在 4% 以内)是足够好的近似. 这时，玻恩近似成立的条件化为

$$|Pg(x_0)| < 0.02 \text{ 或 } |g(x_0)| < 0.0067.$$

由图 59 可见，在 $x_0 \geqslant 4$ 的范围内，这个条件可以得到满足，因此 $x_0=4$ 确定了可以应用一级玻恩近似的最小能量. 由图 58 可以求出 $x_0=4$ 时的相角为 $\delta_0 \simeq 21°$.

问题 108　在球对称电荷分布上的玻恩散射

试用对于球对称分布电荷密度 $\rho(r)$ 的积分，表示在一级玻恩近似下电子在核上散射的微分散射截面．并将此结果应用于常数电荷密度的核．

解　当散射粒子是一个带 $-e$ 的电子时，在经典静电学中联系 $V(r)$ 和 $\rho(r)$ 的泊松方程可写为

$$\nabla^2 V \equiv \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rV) = 4\pi e\rho(r). \tag{108.1}$$

电荷密度是正的，并按

$$4\pi\int_0^\infty dr\, r^2\rho(r) = Ze \tag{108.2}$$

归一化．在一级玻恩近似下，散射振幅是

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\, r^2 V(r)\frac{\sin Kr}{Kr};\quad K = 2k\sin\frac{\theta}{2}. \tag{108.3}$$

必须指出，在核外 $V(r) = -\dfrac{Ze^2}{r}$，积分在上限处不收敛而是变为不确定的．正如文策尔[①]首先指出的，只要在被积函数上乘上一个收敛因子 $e^{-\alpha r}$，然后在最后结果中令 $\alpha=0$，就很容易消除这一困难．原子中电子所引起的屏蔽，可以从物理上证明这个数学上多少有些可疑的步骤是正确的．

连续进行两次分部积分后，我们得到

$$\int_0^\infty dr(rV)e^{iKr} = \frac{1}{iK}\left[e^{iKr}\left(rV - \frac{1}{iK}(rV)'\right)\right]_0^\infty - \frac{1}{K^2}\int_0^\infty dr(rV)''e^{iKr}.$$

上式中第一项在上限处，由于文策尔技巧，等于零．在下限，也就

① Wentzel, G.: Z. Physik **40**, 590(1927).

是在 $r=0$ 附近，函数 $V(r)$ 应当具有 $V\approx V_0-V_1r^2+\cdots$ 的形式，于是 $rV\to 0$ 并且 $(rV)'\to V_0$. 因此上式第一项变为 $-V_0/K^2$. 在积分(108.3)中正弦函数分出来的另一复共轭项 $(rV)e^{-iKr}$ 积分后同样给出一项 $-V_0/K^2$. 合并后，这两项相互抵消. 在余下的积分中，$(rV)''$ 按照(108.1)可用 $4\pi er\rho(r)$ 代替，因此给出

$$f(\theta)=\frac{2m}{\hbar^2}\frac{4\pi e}{K^3}\int_0^\infty dr\, r\rho(r)\sin Kr. \tag{108.4}$$

这个积分不再有任何发散困难.

如果核可以看作是一个点电荷，只有在 $r=0$ 附近才有贡献，于是可以直接应用(108.2)式，而 $f(\theta)$ 变为

$$f_0(\theta)=\frac{2mZe^2}{\hbar^2K^2}=\frac{mZe^2}{2\hbar^2k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}. \tag{108.5}$$

由于 $\hbar k=mv$，$\frac{1}{2}mv^2=E$，上式可以写为

$$f_0(\theta)=\frac{Ze^2}{4E\sin^2\frac{\theta}{2}},$$

由此得出熟知的卢瑟福散射公式

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega}=|f_0(\theta)|^2=\left(\frac{Ze^2}{4E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}. \tag{108.6}$$

(108.4)式可以写为

$$f(\theta)=f_0(\theta)F(K) \tag{108.7}$$

其中“形状因子”

$$F(K)=\frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty dr\, r^2\rho(r)\frac{\sin Kr}{Kr} \tag{108.8}$$

确定散射振幅 $f(\theta)$ 与其卢瑟福值 $f_0(\theta)$ 的偏离：

$$\frac{d\sigma}{d\sigma_0}=F(K)^2. \tag{108.9}$$

一个明显的例子是一个在其半径 R 以内电荷密度为常数的

核，归一化条件(108.2)现在变成

$$\frac{4\pi}{3}\rho R^3 = Ze,$$

形状因子是

$$F=\frac{3}{R^3}\int_0^R dr\, r^2\frac{\sin Kr}{Kr}=\frac{3}{(KR)^3}\{\sin KR-KR\cos KR\} \tag{108.10}$$

或

$$F=\frac{3\,j_1\left(2kR\sin\frac{\theta}{2}\right)}{4k^2R^2\sin^2\frac{\theta}{2}}. \tag{108.11}$$

在 $0\leqslant\theta\leqslant\pi$ 的角度范围内，球贝塞耳函数的自变量从 0 变到 $2kR$，由于玻恩近似只能适用于 $kR\gg1$，因此上述 $0\to 2kR$ 的间隔是相当大的，在这样大的间隔中球贝塞耳函数有好几个零点。因此与卢瑟福散射强度随角度增大而单调地下降不同，现在将出现一系列衍射极大，其情况类似于熟知的经典光学中的图形。从极大值的数目(如果全部都能分辨的话)可以粗略地确定核的半径。

注　如果中子在另一个核子的场中的势能粗略地用汤川吸引势

$$V(r)=-\frac{g^2}{r}e^{-\varkappa r} \tag{108.12}$$

来表示，则对于一个中子与粒子密度为 ρ 的核的相互作用，可以建立一个类似于泊松方程的微分方程：

$$\frac{d^2}{dr^2}(rV)-\varkappa^2(rV)=4\pi g^2\rho(r)r. \tag{108.13}$$

在此，归一化是

$$4\pi\int_0^\infty dr\, r^2\rho(r)=A, \tag{108.14}$$

A 是核的原子序数。分部积分后得出

$$\int_0^\infty dr(rV)\sin Kr=-\frac{1}{K^2}\int_0^\infty dr(rV)''\sin Kr,$$

由于 V 本身有 $e^{-\varkappa r}$ 因子，因此可以不必利用文策尔技巧. 或者利用(108.13)式，则得

$$\int_0^\infty dr(rV)\sin Kr=-\frac{1}{K^2}\int_0^\infty dr\{4\pi g^2\rho r+\varkappa^2(rV)\}\sin Kr,$$

由此得出

$$\int_0^\infty dr(rV)\sin Kr=-\frac{4\pi g^2}{K^2+\varkappa^2}\int_0^\infty dr\,r\rho(r)\sin Kr.$$

因此对于点状核，我们有

$$f_0(\theta)=\frac{2mg^2A}{\hbar^2(K^2+\varkappa^2)}, \tag{108.15}$$

而对于一个广延核，则有

$$f(\theta)=f_0(\theta)F(K) \tag{108.16}$$

其中形状因子

$$F=\frac{4\pi}{A}\int_0^\infty dr\,r^2\rho(r)\frac{\sin Kr}{Kr} \tag{108.17}$$

本质上和前面得到的一样.

问题 109　硬球：高能散射

试证明，在极高能量下，半径为 R 的硬球的散射截面趋向于 $2\pi R^2$.

解　通常应用于高能散射的玻恩近似，对于玻恩积分发散的所有的奇异势都失效，因此我们不得不应用分波展开法，而不管它的收敛性在高能下愈来愈坏.

对于任意的 l 值，硬球外部的径向波函数

$$\chi_l(r)=j_l(kr)\cos\delta_l-n_l(kr)\sin\delta_l\to\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right) \tag{109.1}$$

必须满足边界条件

$$\chi_l(R)=0, \tag{109.2}$$

因此

$$\tan\delta_l=\frac{j_l(x)}{n_l(x)};\quad x=kR. \tag{109.3}$$

因此截面变为

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{j_l^2(x)}{j_l^2(x)+n_l^2(x)}. \tag{109.4}$$

如果能量高得足以使 $x\gg1$，无穷求和(109.4) 可以分解成两部分. 只要 $l<x$，求和项对应于粒子打在球上($\hbar l<mvR$)，并且函数 j_l 和 n_l 可以表示为如下的渐近表达式，

$$j_l(x)=\sin\left(x-\frac{l\pi}{2}\right);\ n_l(x)=-\cos\left(x-\frac{l\pi}{2}\right) \tag{109.5}$$

另一方面，如果$l>x$，在经典图象中粒子由球外通过而没有打在球上($\hbar l>mvR$)。这样，j_l 和 n_l 可以用它们的幂级数展开式的第一项来表示. 由于它们分别是 $j_l\propto x^{l+1}$ 和 $n_l\propto x^{-l}$，于是(109.4)式中的比值变得非常小，因此这些项可以略去. 在这一近似下，我们可以得到

$$\sigma\simeq\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{[x]}(2l+1)\sin^2\left(x-\frac{l\pi}{2}\right). \tag{109.6}$$

当然，这一近似对于 $l\simeq x$ 附近的那些项不能成立，这时要从 j_l 和 n_l 的一种近似过渡到另一种近似. 然而，x 愈大，对求和(109.6)有贡献的项就愈多，在 $l\simeq x$ 附近的那几项对求和的影响就愈小，因而近似的误差也愈小.

利用关系式

$$\sin^2\left(x-\frac{l\pi}{2}\right)=\sin^2x+\sin^2\frac{l\pi}{2}\cos2x$$

可以将(109.6)改写为

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\left\{\sin^2x\sum_{l=0}^{[x]}(2l+1)+\cos2x\sum_{l=1,3,5\cdots}^{[x]}(2l+1)\right\}.$$

利用基本求和公式

$$\sum_{l=0}^{[x]}(2l+1)=(x+1)^2;\quad\sum_{l=1,3,5\cdots}^{[x]}(2l+1)=\frac{1}{2}(x+1)(x+2),$$

最后得到

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\left\{-(x+1)\sin^2 x-\frac{1}{2}(x+1)(x+2)\right\}. \quad (109.7)$$

这种近似只在 $x\gg1$ 时成立，因此取括号中最大的一项就够了．这样最后得出

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\cdot\frac{1}{2}x^2=2\pi R^2, \quad (109.8)$$

这就是我们要证明的公式．

注　这个结果在经典光学中是众所周知的，并且有一个明显的解释：所有打中几何截面 πR^2 的粒子形成散射波．这样原始束流在障碍物的后面就缺少了同样数目的粒子（阴影效应），对于这种缺少又得到同样大小的截面．注意这种简单图象成立的条件 $x\gg1$，等同于波长远大于障碍物的半径．

问题 110　卢瑟福散射公式

利用抛物线坐标，求解在两个点电荷的库仑场中的散射问题．

解　薛定谔方程是

$$\nabla^2 u+\left(k^2-\frac{2k\varkappa}{r}\right)u=0 \quad (110.1)$$

其中

$$k=\frac{mv}{\hbar};\quad \varkappa=\frac{e_1e_2}{\hbar v};\quad 2k\varkappa=\frac{2m}{\hbar^2}e_1e_2 \quad (110.2)$$

e_1，e_2 是两个点电荷，m 是散射粒子的质量，v 是它在无穷远处的速度．由于散射具有对于 z 轴的转动对称性，因而解只和子午面内的坐标有关，如 r 和 θ，或利用抛物线坐标

$$\xi=r-z=2r\sin^2\frac{\theta}{2};\quad \eta=r+z=2r\cos^2\frac{\theta}{2} \quad (110.3)$$

从熟知的结果不难看出采用这些坐标是合理的．除相因子外，按卢瑟福定律，渐近解必定是

$$u\to e^{ikz}+\frac{C}{\sin^2\frac{\theta}{2}}\frac{e^{ikr}}{r}=e^{ikz}\left\{1+\frac{2C}{\xi}e^{ikr}\right\},$$

因此至少有些希望可利用分离变量的方法使问题简化，即令

$$u=e^{ikz}v(\xi) \tag{110.4}$$

而 $v(\xi)$ 只是变量 ξ 的函数.

将(110.4)代入薛定谔方程(110.1)，对 $v(\xi)$ 未作任何特殊的假设，我们得到

$$\nabla^2 v+2ik\frac{\partial v}{\partial z}-\frac{2k\varkappa}{r}v=0.$$

由定义(110.3)得到(略去对 η 和 φ 的微商)

$$\nabla^2 v=\frac{4}{\xi+\eta}\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{dv}{d\xi}\right);\quad \frac{\partial v}{\partial z}=-\frac{2\xi}{\xi+\eta}\frac{dv}{d\xi};$$

$$r=\frac{1}{2}(\xi+\eta),$$

因此对 v 的微分方程化为

$$\xi\frac{d^2v}{d\xi^2}+(1-ik\xi)\frac{dv}{d\xi}-k\varkappa v=0. \tag{110.5}$$

这是一个库末方程，它的解是合流超几何函数，在原点 $\xi=0$ 处为正则的解是

$$v=C\ {}_1F_1(-i\varkappa,\ 1;\ ik\xi). \tag{110.6}$$

C 是任意的归一化常数.

散射问题的解现在将决定于

$$u=Ce^{ikz}\,{}_1F_1(-i\varkappa,\ 1;\ ik\xi) \tag{110.7}$$

和适当选择系数 C. 为了证明这一点，要用到(110.7)式对于正的虚自变量 $ik\xi$ 的很大值的渐近表示式. 这在数学上稍许有些困难. 合流级数有一个从 $0\to\infty$ 的分支割线，通常取它沿着正虚轴，因此熟知的渐近展开式

$${}_1F_1(a,\ c;\ z)\to e^{-i\pi a}\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)}z^{-a}+\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}e^z z^{a-c}$$

$$\text{若}\quad |z|\gg a;\ |z|\gg c;\ c\neq -n,\ n=0,\ 1,\ 2\cdots \tag{110.8}$$

不能毫无顾虑地用到(110.7)式上去. 但是,我们可以毫无顾虑地将(110.8)式应用于复共轭 u^*,这就给出

$$
{}_1F_1(i\varkappa,\ 1;\ -ik\xi)\to\frac{e^{\pi\varkappa}}{\Gamma(1-i\varkappa)}(-ik\xi)^{-i\varkappa}
$$

$$
+\frac{1}{\Gamma(i\varkappa)}e^{-ik\xi}(-ik\xi)^{i\varkappa-1}.
$$

利用恒等式

$$
(-ik\xi)^{-i\varkappa}=(e^{-\frac{i\pi}{2}}k\xi)^{-i\varkappa}=e^{-\frac{\pi\varkappa}{2}}e^{-i\varkappa\log k\xi}
$$

和

$$
\Gamma(1+i\varkappa)=i\varkappa\Gamma(i\varkappa),
$$

则得

$$
{}_1F_1(i\varkappa,\ 1;\ -ik\xi)\to\frac{e^{\frac{\pi\varkappa}{2}}}{\Gamma(1-i\varkappa)}\left\{e^{-i\varkappa\log k\xi}\right.
$$

$$
\left.-\varkappa\frac{\Gamma(1-i\varkappa)}{\Gamma(1+i\varkappa)}e^{-ik\xi}\frac{e^{i\varkappa\log k\xi}}{k\xi}\right\}. \tag{110.9}
$$

再取上式的复共轭,然后代入(110.7),利用 $z+\xi=r$, 并且选取

$$
C=e^{-\frac{\pi\varkappa}{2}}\Gamma(1+i\varkappa), \tag{110.10}
$$

则得波函数(110.7)的渐近行为:

$$
u\to e^{i\left[kz+\varkappa\log\left(2kr\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right]}-\frac{\varkappa e^{2i\eta_0}}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}\cdot\frac{e^{i\left[kr-\varkappa\log\left(2kr\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right]}}{r} \tag{110.11}
$$

其中

$$
\eta_0=\arg\Gamma(1+i\varkappa). \tag{110.12}
$$

这确实是具有标准归一化形式的散射问题的解, 与另一些类似问题的唯一差别是表征库仑势的对数相因子. 由出射球面波的振幅可得微分散射截面

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2=\left(\frac{\varkappa}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}\right)^2=\left(\frac{e_1e_2}{4E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}. \tag{110.13}$$

这就是卢瑟福定律.

注 1 在 $r=0$ 处,由 (110.7)得到 $u=C$,或按照(110.10)式,有

$$|u(0)|^2=e^{-\pi\varkappa}|\Gamma(1+i\varkappa)|^2.$$

按伽玛函数的基本性质,上式可改写为

$$|u(0)|^2=e^{-\pi\varkappa}\frac{\pi\varkappa}{\sinh\pi\varkappa}=\frac{2\pi\varkappa}{e^{2\pi\varkappa}-1}. \tag{110.14}$$

对于正的 $\varkappa$, 上式右边总是小于 1, 并且对于 $2\pi\varkappa\gg1$ 的情况, 变得非常小 $(\sim e^{-2\pi\varkappa})$. 由于

$$2\pi\varkappa=\frac{2\pi e_1e_2}{\hbar v},$$

这意味着,对于低能粒子在强排斥势上的散射,穿透势垒到达原点的波只有一个很小的振幅(伽莫夫因子).

注 2 渐近解(110.11)是在大 $k\xi$, 比如说 $k\xi\geqslant c$ 而 $c\gg1$, 而不是在大 kr, $kr\gg c$ 的假设下推导出来的,因此它适用的区域是旋转抛物面

$$2kr\sin^2\frac{\theta}{2}=c \text{ 或 } r-z=c/k \tag{110.15}$$

的外部,而不是球 $r=c/k$ 的外部. 因此,即使 r 很大(满足 $kr\gg c$), 如果 θ 很小, $k\xi\gg c$ 可能并不成立. 然而这一限制并不很重要. 在大多数情况下, 入射波的波长不会大于原子的线度,比如说,$1/k=10^{-7}$ cm,而探测散射粒子的计数器离散射中心至少为 $r=10$ cm. 这给出 $kr=10^8$. 设 c 约为 10^2, 则由 (110.15)式得到 $\theta^2=10^{-5}$, 这样的角度太小了, 以致无法将散射粒子和原始束流区分开来.

问题 111 库仑散射的分波展开

试将前题中求得的卢瑟福解展开成分波.

解 由于库仑势只和 r 有关, 因此波函数也可以在球极坐标下分离变量,写成

$$u=\frac{1}{r}\sum_{l=0}^{\infty}C_l\chi_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{111.1}$$

其中 χ_l 是微分方程

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \frac{2k\varkappa}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0 \tag{111.2}$$

满足边界条件

$$\chi_l(0) = 0 \tag{111.3}$$

的适当归一化的解. 如果我们令

$$\chi_l = (2kr)^{l+1} e^{ikr} F(\rho); \quad \rho = -2ikr, \tag{111.4}$$

则(111.2)式化为库末方程

$$\rho F'' + (2l+2-\rho) F' - (l+1+i\varkappa) F = 0, \tag{111.5}$$

它的正则解是

$$F(\rho) = a_{l1} F_1(l+1+i\varkappa, 2l+2; -2ikr), \tag{111.6}$$

a_l 是有待适当选择的常数. 由前一问题的(110.8)式可以直接得到(111.6)式的渐近行为; 利用缩写

$$\eta_l = \arg \Gamma(l+1+i\varkappa) \tag{111.7}$$

则得

$$F(\rho) \to a_l (2kr)^{-l-1} \frac{e^{\frac{\pi\varkappa}{2}} (2l+1)!}{\Gamma(l+1-i\varkappa)} \{ e^{-\frac{i\pi}{2}(l+1)} e^{-i\varkappa \log 2kr}$$

$$+ e^{\frac{i\pi}{2}(l+1)} e^{i\varkappa \log 2kr - 2i\eta_l - 2ikr} \}.$$

将它代入(111.4)式, 并选取

$$a_l = e^{-\frac{\pi\varkappa}{2}} \frac{|\Gamma(l+1+i\varkappa)|}{2(2l+1)!}, \tag{111.8}$$

则得

$$\chi_l(r) = a_l (2kr)^{l+1} e^{ikr} {}_1F_1(l+1+i\varkappa, 2l+2; -2ikr) \tag{111.9}$$

的渐近形式

$$\chi_l \to \sin\left(kr - \varkappa \log 2kr + \eta_l - \frac{l\pi}{2} \right). \tag{111.10}$$

现在的主要问题是将上问题中得到的波函数 u 的展开式变为

分波展开的级数(111.1)，并且其中的 χ_l 由(111.8—10)式给出.这个波函数 u 在极坐标中可以重写为:

$$u(r,\ \theta) = e^{-\frac{\pi\varkappa}{2}}\Gamma(1+i\varkappa)e^{ikr\cos\theta}{}_1F_1(-i\varkappa,\ 1;\ ikr(1-\cos\theta)). \tag{111.11}$$

利用(111.1)式及 $P_l(\cos\theta)$ 的正交性，我们有

$$C_l\frac{\chi_l(r)}{r} = \frac{2l+1}{2}\int_{-1}^{+1} d\cos\theta\, u(r,\ \theta)P_l(\cos\theta). \tag{111.12}$$

在(111.11)中引入变量

$$x = -ik\xi = -ikr(1-\cos\theta), \tag{111.13}$$

则得

$$u = e^{-\frac{\pi\varkappa}{2}}\Gamma(1+i\varkappa)e^{ikr}e^{x}{}_1F_1(-i\varkappa,\ 1;\ -x),$$

利用恒等式

$$e^{x}{}_1F_1(a,\ c;\ -x) = {}_1F_1(c-a,\ c;\ x),$$

上式可化为

$$u = e^{-\frac{\pi\varkappa}{2}}\Gamma(1+i\varkappa)e^{ikr}{}_1F_1(1+i\varkappa,\ 1;\ x),$$

将它代入(111.12)，则得

$$C_l\frac{\chi_l(r)}{r} = \frac{2l+1}{2ik}e^{-\frac{\pi\varkappa}{2}}\Gamma(1+i\varkappa)\frac{e^{ikr}}{r}J_l \tag{111.14}$$

其中

$$J_l = \int_{-2ikr}^{0} dx\,{}_1F_1(1+i\varkappa,\ 1;\ x)P_l\left(1+\frac{x}{ikr}\right). \tag{111.15}$$

因此，这问题实质上简化为计算积分 J_l，特别是在 $kr\gg1$ 的假设下. 利用关系式①

$${}_1F_1(a,\ 1;\ x) = \frac{d}{dx}[{}_1F_1(a,\ 1;x) - {}_1F_1(a-1,\ 1;\ x)] \tag{111.16}$$

① 这个关系式可以由普遍公式

$$\frac{d}{dx}[{}_1F_1(a,\ c;\ x) - {}_1F_1(a-1,\ c;\ x)] = {}_1F_1(a,\ c;\ x) + \frac{1-c}{c}{}_1F_1(a,\ c+1;\ x)$$

取 $c=1$ 得到，而上式不难由数学附录中(合流超几何级数一节最后部分)的关系式推导出来.

并对 (111.15) 式重复进行分部积分就可以求出 J_l. 每一次分部积分，P_l 都经受一次对于 x 的微分：

$$\frac{d^n P_l}{dx^n} = (-ikr)^{-n} P_l^{(n)},$$

其中 $P_l^{(n)}$ 表示 P_l 对于其自变量的 n 阶微商，由于 P_l 是一个 l 阶的多项式，因此，经过 l 次分部积分后，它将变成零；于是积分步骤终止. 详细的计算步骤见本题的附录. 对于 $kr \gg 1$，结果是

$$J_l \to -\sum_{n=0}^{l} \left(\frac{i}{kr}\right)^n P_l^{(n)}(-1) \left\{ \frac{1}{\Gamma(1+i\varkappa)} e^{-2ikr} (-2ikr)^{i\varkappa} + (-1)^{n+1} \frac{e^{-i\pi(i\varkappa-n)}}{\Gamma(1+n-i\varkappa)} (-2ikr)^{n-i\varkappa} \right\}. \tag{111.17}$$

在花括号中，仅在 $n=0$ 时两项有相同的数量级，而对于所有 $n \geqslant 1$ 的项，只有第二项有贡献. 利用附录中的(111.22)式，经简单整理后，得到

$$J_l \to (-1)^{l+1} \frac{e^{\frac{\pi\varkappa}{2}}}{\Gamma(1+i\varkappa)} \left\{ e^{-2ikr+i\varkappa \log 2kr} - \left[\sum_{n=0}^{l} (-1)^n \frac{(l+n)!}{n!(l-n)!} \frac{\Gamma(1+i\varkappa)}{\Gamma(1+n-i\varkappa)} \right] e^{-i\varkappa \log 2kr} \right\}.$$

可以证明在方括号中的系数是 $e^{2i\left(\eta_l - \frac{l\pi}{2}\right)}$，因此最后得到

$$J_l \to (-1)^l \frac{e^{\frac{\pi\varkappa}{2}}}{\Gamma(1+i\varkappa)} 2ie^{i\left(\eta_l - \frac{l\pi}{2}\right)} e^{-ikr} \times \sin\left(kr - \varkappa \log 2kr + \eta_l - \frac{l\pi}{2}\right). \tag{111.18}$$

将它代入(111.14)式，并利用 χ_l 的渐近展开式(111.10)，则得

$$C_l = \frac{1}{k}(2l+1) i^l e^{i\eta_l}, \tag{111.19}$$

因此我们所要求的展开式，对于大的 kr，变成

$$u \to \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\eta_l} \sin\left(kr - \varkappa \log 2kr + \eta_l - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\theta). \tag{111.20}$$

必须指出，在某种意义上，波函数(111.11)和它的展开式非常类似于平面波及其展开. 令 $\varkappa=0$，即略去库仑场的效应，则(111.7)式给出 $\eta_l=0$，因而(111.9)式的 χ_l 变为球贝塞耳函数，u 变为平面波，而级数(111.20)就变为平面波的分波展开.

附录　我们用符号 F_a 代替 ${}_1F_1(a,1;x)$. 这样，由于 $a=i\varkappa$，分部积分后得到

$$\int dx\,P_l F_{a+1}=\int dx\,P_l\frac{d}{dx}(F_{a+1}-F_a)=P_l(F_{a+1}-F_a)$$
$$+\frac{i}{kr}\int dx\,P_l'(F_{a+1}-F_a)$$

重复进行 l 次后得到

$$\int dx\,P_l F_{a+1}=\sum_{n=0}^{l}\left(\frac{i}{kr}\right)^n P_l^{(n)}\left\{F_{a+1}-\binom{n+1}{1}F_a\right.$$
$$\left.+\binom{n+1}{2}F_{a-1}-\cdots+(-1)^{n+1}F_{a-n}\right\}.$$

在积分上限 $x=0$ 处，所有 $F_\nu=1$ 并且花括号中的项相互抵消，因此只留下积分下限 $x=-2ikr$ 的贡献，其中球谐函数的自变量等于 -1：

$$\left.\begin{aligned}&\text{其中}\qquad J_l=\sum_{n=0}^{l}\left(\frac{i}{kr}\right)^n P_l^{(n)}(-1)\sum_{\nu=-1}^{n}(-1)^\nu\binom{n+1}{\nu+1}F_{a-\nu}\\&F_{a-\nu}={}_1F_1(i\varkappa-\nu,1;\ -2ikr)\end{aligned}\right\}\qquad(111.21)$$

对于 $kr\gg1$，有如下的渐近展开式

$$F_{a-\nu}\to\frac{e^{-i\pi(i\varkappa-\nu)}}{\Gamma(1+\nu-i\varkappa)}(-2ikr)^{\nu-i\varkappa}+\frac{e^{-2ikr}}{\Gamma(-\nu+i\varkappa)}(-2ikr)^{-\nu-1+i\varkappa}$$

它的第一项正比于 $(kr)^\nu$，第二项正比于 $(kr)^{-\nu-1}$. 因此在(111.21)式的从 $-1\leqslant\nu\leqslant n$ 的求和中，第一项只留下 $\nu=n$ 的一项，第二项只留下 $\nu=-1$ 的一项，于是得出前面的(111.17)式.

勒让德多项式的微商不难由下式得到

$$P_l(\cos\theta)={}_2F_1(l+1,\ -l,\ 1;\ t)=\sum_{m=0}^{l}(-1)^m\frac{(l+m)!}{(l-m)!\,m!^2}t^m$$

其中
$$t=\frac{1}{2}(1-\cos\theta).$$

将它对 t 重复进行微分，然后令 $t=0$ 或 $\cos\theta=1$，则得

$$\frac{d^nP_l(1)}{dt^n}=n!(-1)^n\frac{(l+n)!}{(l-n)!\,n!^2},$$

因此

$$P_l^{(n)}(1)=\frac{d^nP_l(1)}{(d\cos\theta)^n}=(-1)^{l+n}\frac{(l+n)!}{2^n(l-n)!\,n!},$$

由此可得

$$P_l^{(n)}(-1)=\frac{(l+n)!}{2^n(l-n)!\,n!}. \tag{111.22}$$

问题 112 反常散射

设在上题的库仑场上附加一短程力（例如核力或有限尺寸的电荷云）. 如果力程为 R, 则 $kR\ll1$. 试用附加相移表示散射振幅.

解 如果 $kR\ll1$, 附加的短程力只改变 $l=0$ 的相角. 因此, 代替上题中的(111.10)式, 现在得到下列渐近表达式:

$$\tilde{\chi}_0\to A\sin(kr-\varkappa\log 2kr+\eta_0+\delta_0) \tag{112.1}$$

其中 δ_0 为附加相移. 将它与点电荷场的原来表示式

$$\chi_0\to\sin(kr-\varkappa\log 2kr+\eta_0) \tag{112.2}$$

比较, 它们的差

$$\tilde{\chi}_0-\chi_0\to\frac{1}{2i}\{e^{i(kr-\varkappa\log 2kr+\eta_0)}(Ae^{i\delta_0}-1)$$
$$-e^{-i(kr-\varkappa\log 2kr+\eta_0)}(Ae^{-i\delta_0}-1)\},$$

必定只贡献一个出射球面波, 因而

$$A=e^{i\delta_0}, \tag{112.3}$$

于是得出

$$\tilde{\chi}_0-\chi_0\to\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_0}-1)e^{i(kr-\varkappa\log 2kr+\eta_0)}. \tag{112.4}$$

这样一来, 在(111.20)式中必须补上一项

$$\frac{1}{kr}e^{i\eta_0}(\tilde{\chi}_0-\chi_0),$$

因此, 当用(110.11)代替(111.20)时, 则得散射波

$$u_s\to\frac{e^{i(kr-\varkappa\log 2kr+2\eta_0)}}{2kr}\left\{-\frac{\varkappa}{\sin^2\frac{\theta}{2}}e^{-i\varkappa\log\sin^2\frac{\theta}{2}}-i(e^{2i\delta_0}-1)\right\} \tag{112.5}$$

和散射振幅

$$f(\theta)=-\frac{\varkappa}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}e^{-4\varkappa\log\sin^2\frac{\theta}{2}}+\frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_0}-1\right).$$

(112.6)

必须指出两点：(1)附加项与散射角无关，因而对大角度散射(这时卢瑟福项变小)有最强烈的影响. (2)在截面测量中 $|f(\theta)|^2$ 将出现一项卢瑟福散射和反常散射的干涉项.

问题 113　索末菲-瓦特孙(Sommerfeld-Watson)变换

假设在散射振幅

$$f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)f_l P_l(\cos\theta) \tag{113.1}$$

中每一个求和项都是某个复函数在 l 取整数值时的留数，试将上述散射振幅变换为该复函数在复变量 l 平面上的积分. 在 $f_l\equiv f(l)$ 是 l 的半纯函数的假设下，试将积分分解为两部分，一部分是极点的贡献，另一部分是沿着通过点 $l=-\frac{1}{2}$ 并平行于虚 l 轴的路线的本底积分.

解　可以合理地用复变量

$$\lambda=l+\frac{1}{2} \tag{113.2}$$

代替 l，不难证明(113.1)式可用下式代替

$$f(\theta)=\frac{1}{i}\int_C d\lambda\,\lambda f\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)\frac{P_{\lambda-\frac{1}{2}}(-\cos\theta)}{\cos\pi\lambda} \tag{113.3}$$

其中积分路线 C 如图 60 所示. 证明如下，函数

$$\frac{1}{\cos\pi\lambda}=-\frac{1}{\sin\pi l}$$

在所有 l 为整数 ($l=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots$) 或 λ 为半整数 $\left(\lambda=\pm\frac{1}{2},\right.$

$\pm\frac{3}{2}$, $\pm\frac{5}{2}$, $\cdots$)的点上有极点，它们的留数是 $\frac{1}{\pi}(-1)^{l+1}$. 如果积分(113.3)内的其余因子在正实轴上是正则的，则沿路径 C 的积分可以分解为围绕这些极点的顺时针回路积分的和(乘上 $-2\pi i$)：

$$f(\theta)=\frac{1}{\pi i}\sum_{l=0}^{\infty}(-2\pi i)(-1)^{l+1}\left(l+\frac{1}{2}\right)f(l)P_l(-\cos\theta). \tag{113.4}$$

由于勒让德多项式的宇称性质

$$(-1)^lP_l(-\cos\theta)=P_l(\cos\theta)\quad(\text{当 }l=\text{整数时}), \tag{113.5}$$

(113.4)化为(113.1).

现在让我们将积分路径改变为由虚 λ 轴和右半 λ 平面上的无穷大半圆组成的回路. 如果被积函数在无穷大半圆上至少象 $|\lambda|^{-1-\varepsilon}$ 一样快地趋于零(正如我们就要假设的)，则沿这个半圆的积分为零. 这样一来，只剩下沿虚 λ 轴的本底积分和围绕右半平面上在积分路线改变的过程中扫过的所有极点的回路积分. 设这些极点的位置是 $\lambda=\alpha_n$，并且假设 $f(l)$ 在这些极点上的留数是 β_n，则(113.3)式的极点项贡献是：

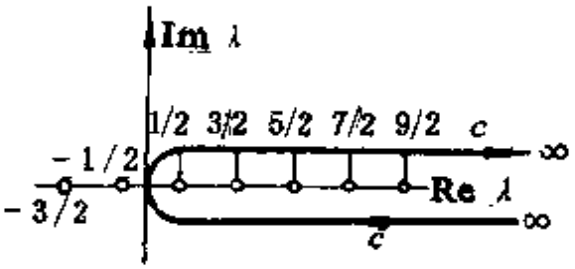


图 60　积分路径 c 可以用围绕正实轴上极点的许多回路积分来代替，或者用沿着虚 λ 轴的本底积分路线加二右半平面中的雷杰(Regge)极点回路来代替

$$f_P(\theta)=2\sum_n\beta_n\frac{\alpha_nP_{\alpha_n-\frac{1}{2}}(-\cos\theta)}{\cos\pi\alpha_n} \tag{113.6}$$

剩下的本底积分，考虑到 $\lambda=iy$，y 为实数，则

$$f_B(\theta)=-\frac{1}{\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty}dy\,yf\left(iy-\frac{1}{2}\right)\frac{P_{iy-\frac{1}{2}}(-\cos\theta)}{\cosh\pi y}. \tag{113.7}$$

这样一来，散射振幅由二部分组成，一部分是极点贡献的和，另一部分是本底贡献

$$f(\theta)=f_P(\theta)+f_B(\theta). \tag{113.8}$$

注　$f(l)$在复 l 平面上的极点称为雷杰极点. 当能量改变时，这些极点在 l 平面上通过的路线称为雷杰轨迹. 雷杰极点的重要性在于它提供了一个对于两个势散射粒子之间相互作用的另一种描述. 如果知道极点的位置(α_n)和留数(β_n)，就可以用这些参数描述散射. 这种方法看来在基本粒子物理学中特别有用(当然，在基本粒子物理学中，由于能量高，理论必须推广成相对论性形式)，因为实验显示出的主要特征是存在许多相当尖锐的共振态(中间粒子或粒子共振). 在核物理中，可以用非相对论性理论来描述复合态.

问题 114　雷杰(Regge)极点

设对于一个给定的能量，$f(l)$的一个极点的位置接近 l 的物理值，比如说，$l=L$(L 为整数). 如果能量有一些变化，试问极点描述什么物理情况？

解　下面我们只考虑求和 (113.6) 中的一项对散射振幅的贡献(略去指标 n)

$$f_P(\theta)=2\beta\alpha\frac{P_{\alpha-\frac{1}{2}}(-\cos\theta)}{\cos\pi\alpha}. \tag{114.1}$$

这里

$$\alpha=L+\frac{1}{2}+\xi+i\eta \tag{114.2}$$

其中 ξ, η 为实数，并假设两者都很小($|\xi|\ll1$, $|\eta|\ll1$). 于是有

$$\cos\pi\alpha=(-1)^L\sin\pi(\xi+i\eta). \tag{114.3}$$

复指标 $\nu=\alpha-\frac{1}{2}$ 的勒让德函数可以用通常的整数指标的勒让德多项式表示为：

$$P_\nu(t)=\frac{\sin\pi\nu}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\frac{P_n(-t)}{(\nu-n)(\nu+n+1)}, \tag{114.4}$$

因此，在我们的特定情况下，得到

$$P_{\alpha-\frac{1}{2}}(-\cos\theta)$$

$$=\frac{(-1)^L\sin\pi(\xi+i\eta)}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n+1)P_n(\cos\theta)}{(L-n+\xi-i\eta)(L+n+1+\xi+i\eta)}. \tag{114.5}$$

由此得出

$$f_P(\theta)=\frac{2\beta}{\pi}(L+\frac{1}{2}+\xi+i\eta)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n+1)P_n(\cos\theta)}{(L-n+\xi+i\eta)(L+n+1+\xi+i\eta)}. \tag{114.6}$$

到此为止，对这个极点项没有作任何近似．现在我们利用 ξ, η 很小这个条件，当 $n=L$ 时分母中第一个因子很小，因而使 $n=L$ 的这一项比其余 $n\neq L$ 的项大得多．这样，在合理的近似下，可以只保留主要项而得到

$$f_P(\theta)\simeq\frac{\beta}{\pi}(2L+1)\frac{P_L(\cos\theta)}{\xi+i\eta} \tag{114.7}$$

现在来研究这个表示式与散射粒子能量 E 的关系．极点并不对应于整数角动量的态，不过对于实的能量 E，极点当然要位于 α 点．另一方面，我们假设，一个整数角动量 $L\left(\text{或 }\lambda=L+\frac{1}{2}\right)$的物理状态的位置接近极点；它的能量只能有一个很小的虚部，而实部 E_0 和 E 相差很小，比如说

$$E_L=E_0-\frac{1}{2}i\Gamma. \tag{114.8}$$

按(114.2)式，这意味着 ξ, η 作为能量的函数，满足

$$\xi(E_L)+i\eta(E_L)=0. \tag{114.9}$$

设 E 是一物理态的任意实能量，它和 E_L 相差不大，于是我们有

$$\xi(E)+i\eta(E)=\left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E_L}(E-E_L) \tag{114.10}$$

将上式代入(114.7)式,则得

$$f_P(\theta)=\frac{\beta}{\pi}\frac{2L+1}{\left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E_L}}P_L(\cos\theta)\frac{1}{E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma}. \tag{114.11}$$

这是一个典型的布莱特-魏格纳 (Breit-Wigner) 共振的散射振幅,相应的微分截面是

$$|f_P(\theta)|^2\propto\frac{1}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}. \tag{114.12}$$

E_0 被解释为共振能量, Γ 为共振曲线的宽度, 它确定中间共振态的平均寿命 $\tau=\hbar/\Gamma$.

现在设 ξ_0 和 η_0 是极点轨迹上能量 $E=E_0$ 点的 ξ 和 η 的值, 则对于 $\lambda=L-\frac{1}{2}$, 我们有

$$L+\frac{1}{2}=\alpha(E_0)+\left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E_0}(E_L-E_0),$$

或利用(114.8)

$$\xi_0+i\eta_0=\frac{1}{2}i\Gamma\left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E_0}. \tag{114.13}$$

可以证明(参见本题附注), $(d\alpha/dE)_{E_0}$ 实际上是实的, 因此 $\xi_0=0$, 而

$$\eta_0=\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E_0} \tag{114.14}$$

是共振曲线宽度的量度.

注 对于势散射, 不难证明, $d\alpha/dE$ 在共振点附近是实的. 参见 De Alfaro 和 Regge: «势散射», Amsterdam 1965, p. 104. 如果 R 是散射区域的半径, v 是散射粒子的速度, 则得 $d\alpha/dE\simeq R/(\hbar v)$.

E. 温侧-克喇末-布里渊(WKB)近似

问题 115 程 函 展 开

在光学中,为了求解具有缓变 $n(\boldsymbol{r})$ 的波动方程

$$\nabla^2 u+k^2 n(\boldsymbol{r})^2 u=0, \tag{115.1}$$

引入程函 $S(\boldsymbol{r})$, 令

$$u=e^{\frac{2\pi i}{\lambda}S(r)}, \tag{115.2}$$

其中 $\lambda=2\pi/k$ 是真空中的波长, 并且将 $S(\boldsymbol{r})$ 展开成 λ 的幂级数. 试仿照这种方法用逐级近似法求解薛定谔方程.

解 设 λ 是在所有 $V(\boldsymbol{r})=0$ 处的德布罗意波长:

$$\lambda=\frac{2\pi\hbar}{p};\quad p=\sqrt{2mE}=\hbar k. \tag{115.3}$$

于是我们可以引进折射率

$$n(\boldsymbol{r})=\sqrt{1-\frac{V(\boldsymbol{r})}{E}}. \tag{115.4}$$

$n(\boldsymbol{r})$ 是 $\boldsymbol{r}$ 的缓变函数意味着只有在 $|\boldsymbol{r}|$ 的改变超过距离 $l\gg\lambda$ 时 $n(\boldsymbol{r})$ 才发生明显的改变, 即

$$\left|\frac{1}{n}\nabla n\right|\sim\frac{1}{l}\ll\frac{1}{\lambda}. \tag{115.5}$$

将(115.2)代入(115.1), 我们得到里卡提(Riccati)方程

$$\frac{\lambda}{2\pi i}\nabla^2 S+(\nabla S)^2-n^2=0. \tag{115.6}$$

如果 n 是一个常数, 则 S 将是坐标的线性函数, 并且 $\nabla^2 S=0$. 如果 n 缓慢地变化, 可以预料, 当通过的距离为 λ 时, 在(115.2)的指数上非线性项只有很小的影响. 由于在任意方向 x 上, 有

$$S(x+\lambda)=S(x)+\lambda S'(x)+\frac{1}{2}\lambda^2 S''(x)+\cdots,$$

非线性项 $\frac{1}{2}\lambda^2 S''$ 对指数的贡献非常小，即

$$\left|\frac{2\pi}{\lambda}\cdot\frac{1}{2}\lambda^2 S''\right|\ll 1 \quad 或 \quad |\nabla^2 S|\ll\frac{1}{\lambda}.$$

因此里卡提方程的第一项比其余两项小得多，于是在一级近似下(115.6)式化为程函方程：

$$(\nabla S)^2=n^2. \tag{115.7}$$

现在我们将 S 展成 λ 的幂级数

$$S=S_0+\frac{\lambda}{2\pi i l}S_1+\left(\frac{\lambda}{2\pi i l}\right)^2 S_2+\cdots \tag{115.8}$$

其中无量纲参数

$$\frac{\lambda}{2\pi l}\ll 1. \tag{115.9}$$

于是方程(115.6)给出下列方程组：

$$\left.\begin{aligned}(\nabla S_0)^2-n^2&=0,\\ l\nabla^2 S_0+2\nabla S_0\cdot\nabla S_1&=0,\\ l\nabla^2 S_1+(\nabla S_1)^2+2\nabla S_0\cdot\nabla S_2&=0,\\ l\nabla^2 S_2+2\nabla S_1\cdot\nabla S_2+2\nabla S_0\cdot\nabla S_3&=0,\ 等等\end{aligned}\right\} \tag{115.10}$$

在这些方程中，只出现微商，于是我们可以引入无量纲矢量

$$\boldsymbol{y}_n=\nabla S_n; \tag{115.11}$$

因而

$$l\nabla^2 S_n=l(\nabla\cdot\boldsymbol{y}_n)$$

变成 $\boldsymbol{y}_n$ 的无量纲散度，并且方程组化为：

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{y}_0^2&=n^2,\\ \boldsymbol{y}_1\cdot\boldsymbol{y}_0&=-\frac{1}{2}l(\nabla\cdot\boldsymbol{y}_0),\\ \boldsymbol{y}_2\cdot\boldsymbol{y}_0&=-\frac{1}{2}[l(\nabla\cdot\boldsymbol{y}_1)+\boldsymbol{y}_1^2],\\ \boldsymbol{y}_3\cdot\boldsymbol{y}_0&=-\frac{1}{2}[l(\nabla\cdot\boldsymbol{y}_2)+2\boldsymbol{y}_1\cdot\boldsymbol{y}_2],\ 等等\end{aligned}\right\} \tag{115.12}$$

由这些方程可以逐步求出 y_n，按照(115.11)式，可以用积分的办法求出 S_n，然而我们对于边界条件在此不作深入讨论。

问题 116　径向 WKB 解

试利用上题中发展的方法确定球对称势的径向波函数.

解　如果程函只与变量 r 有关，则波动方程是

$$\chi_l''+Q(r)^2\chi_l=0 \tag{116.1}$$

其中

$$Q(r)^2=k^2\left(1-\frac{V(r)}{E}-\frac{l(l+1)}{k^2r^2}\right);\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \tag{116.2}$$

令

$$\chi_l=e^{\frac{2\pi i}{\lambda}S(r)};\quad \lambda=\frac{2\pi}{k} \tag{116.3}$$

方程(116.1)可以化为瑞卡铁方程

$$\frac{\lambda}{2\pi i}\frac{d^2S}{dr^2}+\left(\frac{dS}{dr}\right)^2-\frac{Q^2}{k^2}=0. \tag{116.4}$$

展开式

$$S=S_0+\frac{\varepsilon}{i}S_1+\left(\frac{\varepsilon}{i}\right)^2S_2+\cdots \tag{116.5}$$

中的无量纲参数

$$\varepsilon=\frac{\lambda}{2\pi R}\ll 1, \tag{116.6}$$

其中 R 是表征散射区域延伸范围的半径. 这样一来，对应于(115.10)式，现在有

$$\left.\begin{aligned}
&S_0'^2=Q^2/k^2,\\
&S_1'S_0'=-\frac{1}{2}R/S_0',\\
&S_2'S_0'=-\frac{1}{2}[RS_1''+S_1'^2],\\
&S_3'S_0'=-\frac{1}{2}[RS_2''+2S_1'S_2'],\ \text{等等}
\end{aligned}\right\} \tag{116.7}$$

引入无量纲函数

$$y_n(r)=S_n'(r), \tag{116.8}$$

则得

$$y_0=\pm Q/k,$$

$$y_1=-\frac{1}{2}R\frac{y_0'}{y_0},$$

$$y_2=-\frac{Ry_1'+y_1^2}{2y_0},$$

$$y_3=-\frac{Ry_2'+2y_1y_2}{2y_0},\text{ 等等.}$$

我们可以由这些方程依次地用$y_0(r)$及其微商来表示 $y_n(r)$：

$$\left.\begin{aligned}
&y_1=-\frac{R}{2}\frac{y_0'}{y_0};\\
&y_2=\frac{R^2}{4}\left(\frac{y_0''}{y_0^2}-\frac{3}{2}\frac{y_0'^2}{y_0^3}\right);\\
&y_3=-\frac{R^3}{8}\left(\frac{y_0'''}{y_0^3}-6\frac{y_0'y_0''}{y_0^4}+6\frac{y_0'^3}{y_0^5}\right),\text{ 等等.}
\end{aligned}\right\} \tag{116.9}$$

如果

$$y_0=\pm\sqrt{1-\frac{V(r)}{E}-\frac{l(l+1)}{k^2r^2}} \tag{116.10}$$

是实的，则所有的函数 $y_n(r)$ 也都是实的，并且由于我们将 S 展成纯虚数 $\frac{\varepsilon}{i}$ 的幂级数，因此 S_n 对 S 的贡献将交替为实的和虚的，这将对径向波函数 $\chi_l(r)$：

$$\chi_l(r)=\exp\int^r\frac{dr}{R}\left\{\frac{i}{\varepsilon}y_0+y_1+\frac{\varepsilon}{i}y_2+\left(\frac{\varepsilon}{i}\right)^2y_3+\cdots\right\} \tag{116.11}$$

交替地给出相角和振幅的修正. 如果使 y_0 反号，奇函数 y_{2n+1} 保持不变，因而振幅的修正也不变，但偶函数 y_{2n} 也跟着 y_0 一起反号，从而给出复共轭解. 因此上述方法给出解的一个完备的基本组.

问题 117　朗格(Langer)的 WKB 边界条件

对于排斥势，在经典回转点 r_t 处（最靠近排斥心的距离），WKB 近似有一个奇异性．它使我们无法用公式将边界条件表示出来．这个困难可以用如下的办法加以避免：将具有 WKB 函数作为正确解的微分方程，用满足下面两个条件的另一微分方程来代替．a)在经典回转点附近这个方程和薛定谔方程一致，b)在其他区域内它和 WKB 方程一致．为此，最好用

$$x-\int_{r_t}^{r} dr\, Q(r) \tag{117.1}$$

代替 r 作为独立变量．

解　由于在经典回转点处

$$Q^2=k^2\left(1-\frac{V(r)}{E}-\frac{l(l+1)}{k^2r^2}\right)\equiv k^2n(r)^2 \tag{117.2}$$

等于零，因此 WKB 函数

$$u-Q^{-\frac{1}{2}}\exp\left\{\pm i\int_{r_t}^{r} dr\, Q(r)\right\} \tag{117.3}$$

的振幅在 $r=r_t$ 处有奇异性．我们希望在 r_t 处的解保持有限，使得我们可以将 $r>r_t$ 区域内的振动解和 $r<r_t$ 区域内的指数衰减解连接起来．

(117.1)式定义的变量 x，容易由关系式

$$\frac{d}{dr}=Q\frac{d}{dx}$$

引入．它使径向薛定谔方程变换为

$$\ddot{x}+\frac{\dot{Q}}{Q}\dot{x}+x=0, \tag{117.4}$$

其中点"·"表示对于 x 的微商．另一方面，WKB 函数(117.3)

$$u=Q^{-\frac{1}{2}}e^{\pm ix} \tag{117.5}$$

构成微分方程

$$u''+\left[Q^2-\frac{3}{4}\frac{Q'^2}{Q^2}+\frac{1}{2}\frac{Q''}{Q}\right]u=0 \qquad (117.6)$$

的一组基本解. 其中"′"表示对 r 的微商. 如果改用变量 x, 则上式化为

$$\ddot{u}+\frac{\dot{Q}}{Q}\dot{u}+\left[1-\frac{1}{4}\frac{\dot{Q}^2}{Q^2}+\frac{1}{2}\frac{\ddot{Q}}{Q}\right]u=0. \qquad (117.7)$$

在 $r=r_t$ 附近, 函数 Q^2 将与 $r-r_t$ 成正比, 因此积分(117.1)将正比于 $(r-r_t)^{3/2}$:

$$Q\propto(r-r_t)^{\frac{1}{2}};\quad x\propto(r-r_t)^{\frac{3}{2}};$$

因而有

$$Q\propto x^{\frac{1}{3}}. \qquad (117.8)$$

因此在这个无限小的区域内,我们得到

$$\frac{\dot{Q}}{Q}=\frac{1}{3x} \text{ 和 } \frac{\ddot{Q}}{Q}=-\frac{2}{9x^2}.$$

这样一来,对于 $r\simeq r_t$, 两个微分方程(117.4)和(117.7)化为

$$\ddot{\chi}+\frac{1}{3x}\dot{\chi}+\chi=0 \qquad (117.4')$$

和

$$\ddot{u}+\frac{1}{3x}\dot{u}+\left(1-\frac{5}{36x^2}\right)u=0. \qquad (117.7')$$

改变记号,令

$$\chi=x^{\frac{1}{3}}\varphi(x);\quad u=x^{\frac{1}{3}}f(x), \qquad (117.9)$$

则上述两个方程化为

$$\ddot{\varphi}+\frac{1}{x}\dot{\varphi}+\left(1-\frac{1}{9x^2}\right)\varphi=0 \qquad (117.4'')$$

$$\ddot{f}+\frac{1}{x}\dot{f}+\left(1-\frac{1}{4x^2}\right)f=0. \qquad (117.7'')$$

这两个方程都是贝塞耳型的，其解为

$$\varphi(x)=J_{\pm\frac{1}{3}}(x);\quad f(x)=J_{\pm\frac{1}{2}}(x).$$

考虑到对于小的 x, $J_\nu(x)\propto x^\nu$. 这表明基本解为 $\chi\propto x^0$ 或 $x^{\frac{2}{3}}$，二者在 $x=0$ 处都是有限或者是零，而对于 u，基本解 $\propto x^{-\frac{1}{6}}$ 或 $x^{\frac{5}{6}}$，即在 $x=0$ 处，一个是奇异的，一个是零. 正是这个 WKB 解在经典回转点处的奇异性使我们无法将边界条件公式化. 如果我们在 (117.7″) 中将 $\frac{1}{4x^2}$ 换成 $\frac{1}{9x^2}$ (形式上就和 (117.4″) 完全一样)，即在 (117.7″)，(117.7′) 和 (117.7) 中加上一项 $\frac{5}{36x^2}$，就可以消除上面的奇异性. 这意味着，只是在 $x=0$ 的附近对 WKB 方程 (117.7) 稍加修改，而在其余各处仍保持不变. 设 $v(x)$ 是修改后的微分方程的解，则

$$\ddot{v}+\frac{\dot{Q}}{Q}\dot{v}+\left[1+\frac{5}{36x^2}-\frac{1}{4}\frac{\dot{Q}^2}{Q^2}+\frac{1}{2}\frac{\ddot{Q}}{Q}\right]v=0 \qquad (117.10)$$

就是我们所要的微分方程[代替 WKB 方程 (117.7) 式]

类似于 (117.3) 或 (117.5)，将解写成

$$v(x)=Q^{-\frac{1}{2}}F(x), \qquad (117.11)$$

我们得到

$$\ddot{F}+\left[1+\frac{5}{36x^2}\right]F=0, \qquad (117.12)$$

由此得出的完全解是

$$v(x)=\sqrt{\frac{x}{Q}}\{C_1J_{\frac{1}{3}}(x)+C_2J_{-\frac{1}{3}}(x)\}. \qquad (117.13)$$

由于 (115.8) 式，这个解在 $x=0$ 处没有奇异性，它和 WKB 方程的解的差别，只是将因子 $e^{\pm ix}$ 换成 $\sqrt{x}J_{\pm\frac{1}{3}}(x)$，后者在 $x\gg\frac{1}{3}$ 时的渐近行为是

$$\sqrt{x}J_{\pm\frac{1}{3}}(x)\to\sqrt{\frac{2}{\pi}}\cos\left(x-\frac{\pi}{4}\mp\frac{\pi}{6}\right). \tag{117.14}$$

现在我们来表述边界值问题. 知道在 $r>r_t(Q>0,\ x>0)$ 区域内的完全解(117.13)后，我们需要将它延拓到 $r<r_t$ 的区域，在这个区域内

$$Q=i|Q|;\quad x=e^{\frac{3i\pi}{2}}\xi,\ \xi>0. \tag{117.15}$$

对于小的复变量 x，有如下的关系式:

$$J_{\frac{1}{3}}(x)=\frac{1}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)}\left(\frac{x}{2}\right)^{\frac{1}{3}};\quad J_{-\frac{1}{3}}(x)=\frac{1}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}\left(\frac{x}{2}\right)^{-\frac{1}{3}}$$

当 x 取(117.15)的虚数值时，上二式给出

$$J_{\frac{1}{3}}(x)=\frac{i}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)}\left(\frac{\xi}{2}\right)^{\frac{1}{3}};\quad J_{-\frac{1}{3}}(x)=-\frac{i}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}\left(\frac{\xi}{2}\right)^{-\frac{1}{3}}.$$

对于实 $\xi>0$，由

$$J_{\frac{1}{3}}(x)=iI_{\frac{1}{3}}(\xi);\ J_{-\frac{1}{3}}(x)=-iI_{-\frac{1}{3}}(\xi)$$

定义的所谓修正贝塞耳函数 $I_\nu(\xi)$ 是实的. 对于由

$$K_\nu(\xi)=\frac{\pi}{2\sin\nu\pi}[I_{-\nu}(\xi)-I_\nu(\xi)]=\frac{i\pi}{2}e^{\frac{i\nu\pi}{2}}H_\nu^{(1)}(i\xi)$$

定义的修正汉克耳函也如此. 对于大的实 $\xi>0$，它的渐近行为是

$$K_\nu(\xi)\to\sqrt{\frac{\pi}{2\xi}}\,e^{-\xi}. \tag{117.16}$$

利用这个普遍的数学工具，自变量为(117.15)的解(117.13)可以写成

$$v(x)=\left\{e^{i\pi}\frac{\xi}{|Q|}\right\}^{\frac{1}{2}}\{C_1iI_{\frac{1}{3}}(\xi)-C_2iI_{-\frac{1}{3}}(\xi)\}$$

$$=\sqrt{\frac{\xi}{|Q|}}\{C_2I_{-\frac{1}{3}}(\xi)-C_1I_{\frac{1}{3}}(\xi)\}.$$

由于所要求的解在穿过势垒(ξ 增大)时将象组合(117.16)那样下降,因此我们必须令

$$C_1=C_2,\ \text{比如说}\ =C, \tag{117.17}$$

并且得到

$$v(x)=\sqrt{\frac{\xi}{|Q|}}C\frac{2\sin\frac{\pi}{3}}{\pi}K_{\frac{1}{3}}(\xi).$$

另一方面, 在大 x 值 ($x>0$) 处的相角因之也确定下来. 如果将(117.17)代入(117.13),考虑到(117.14),则得

$$v(x)\to\sqrt{\frac{x}{Q}}C\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\left\{\cos\left(x-\frac{\pi}{4}-\frac{\pi}{6}\right)+\cos\left(x-\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{6}\right)\right\}$$

或

$$v(x)\to C\sqrt{\frac{6}{\pi Q}}\sin\left(x+\frac{\pi}{4}\right). \tag{117.18}$$

这个渐近行为和 WKB 解(117.3)的渐近行为一致,但是这里的相角是完全确定的.

注 利用爱里函数(参见问题 40)可以简化经典回转点附近的解的讨论.

问题 113-115 的文献 Wentzel, G.: Z. Physik **38**, 518 (1926). Kramers, H. A.: Z. Physik **39**, 828 (1926). Brillouin, L.: C. R. Acad. Sci. Paris **183**, 24(1926). Langer, R. E.: Phys. Rev. **51**, 669(1937).

问题 118 用 WKB 近似方法解谐振子问题

试利用 WKB 波函数的朗格边界条件求谐振子能级.

解 在谐振子势

$$\overset{\bullet}{V}(r)=\frac{1}{2}\ m\omega^2x^2 \tag{118.1}$$

中对于能量为

$$E=\frac{1}{2}\ mv^2 \tag{118.2}$$

(其中 v 是 $x=0$ 处的经典速度)的经典运动,其回转点的位置是

$$x=\pm x_0;\ x_0=\frac{v}{\omega} \tag{118.3}$$

由此可见

$$Q^2=k^2\left(1-\frac{V(x)}{E}\right)=k^2\left(1-\frac{x^2}{x_0^2}\right). \tag{118.4}$$

在回转点 $x=-x_0$ 处满足朗格边界条件的 WKB 波函数是

$$\tilde{u}(x)=Q^{-\frac{1}{2}}\cos\left\{\int_{-x_0}^{x}dx\,Q(x)-\frac{\pi}{4}\right\}. \tag{118.5}$$

将(118.4)式中的 Q 代入上式，利用

$$kx_0=\frac{mv}{\hbar}\,\frac{v}{\omega}=\frac{2E}{\hbar\omega},$$

积分后得出

$$\tilde{u}(x)=Q^{-\frac{1}{2}}\cos\left\{\frac{E}{\hbar\omega}\left[\sin^{-1}\frac{x}{x_0}+\frac{x}{x_0}\sqrt{1-\frac{x^2}{x_0^2}}+\frac{\pi}{2}\right]-\frac{\pi}{4}\right\}. \tag{118.6}$$

还必须使这个解也满足在 $x=+x_0$ 处的另一个朗格边界条件．这意味着它或者是偶函数或者是奇函数．利用缩写

$$y(x)=\frac{E}{\hbar\omega}\left[\sin^{-1}\frac{x}{x_0}+\frac{x}{x_0}\sqrt{1-\frac{x^2}{x_0^2}}\right];\quad \varphi=\frac{E}{\hbar\omega}\cdot\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{4} \tag{118.7}$$

则得

$$\tilde{u}(x)=Q^{-\frac{1}{2}}\cos\{y(x)+\varphi\}=Q^{-\frac{1}{2}}\{\cos y\cos\varphi-\sin y\sin\varphi\}.$$

由于 $y(x)$ 是 x 的奇函数，$y(-x)=-y(x)$，因此

当 $\varphi=2n\frac{\pi}{2}$ 时；

$$\tilde{u}_{2n}(x)=Q^{-\frac{1}{2}}(-1)^n\cos y \text{ 是偶函数} \tag{118.8 a}$$

当 $\varphi=(2n+1)\frac{\pi}{2}$ 时；

$$\tilde{u}_{2n+1}(x)=Q^{-\frac{1}{2}}(-1)^{n+1}\sin y \text{ 是奇函数．} \tag{118.8 b}$$

关于 φ 的这两个条件可以合并为一个公式

$$\varphi = n\frac{\pi}{2}$$

或者，按照(118.7)式，

$$E = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{118.9}$$

由于 $E>V_{\min}=0$ 是应用 WKB 方法的必要条件，因此上式中的 n 不能取负值。

为了对波函数的 WKB 近似法有一个定性的估计，将 WKB 波函数 $\tilde{u}_n$ 的零点位置和问题 30 中准确解 u_n 的零点位置相比较是值得的。这些零点的位置搜集在附表中。

n	$\tilde{u}_n$ 和 u_n 零点位置的 x/x_0 值	
	$\tilde{u}_n$	u_n
0	—	—
1	0	0
2	±0.320	±0.316
3	0	0
	±0.466	±0.462
4	±0.1754	±0.1750
	±0.553	±0.550

问题 119　均匀场的 WKB 本征值

试用 WKB 近似确定在地球表面($z=0$)上空重力场

$$V(z) = mgz$$

中定态运动的本征值。参见问题 40 的精确解。

解　经典回转点有两个：$z_1=0$ 和 $z_2=E/mg$。在左面回转点 $z_1=0$ 处的朗格边界条件给出

$$\tilde{u}(z) = Q^{-\frac{1}{2}}\cos\left\{\int_0^z dz\,Q(z) - \frac{\pi}{4}\right\} \tag{119.1}$$

其中

$$Q(z)=k\sqrt{1-\frac{mg}{E}z}. \tag{119.2}$$

以(119.2)代入(119.1)，积分后，则得

$$\tilde{u}(z)=Q^{-\frac{1}{2}}\cos\left\{\frac{2}{3}kz_2\left[1-\left(\frac{z}{z_2}\right)^{\frac{3}{2}}\right]-\frac{\pi}{4}\right\}. \tag{119.3}$$

另一方面，在 $z=z_2$ 处也必须满足朗格条件. 利用变量 $y=-z$，则 $y=-z_2$ 就变成一个左面的回转点，于是①

$$\tilde{u}(z)=\pm Q^{-\frac{1}{2}}\cos\left\{\int_{-z_2}^{-z}dy\,Q(-y)-\frac{\pi}{4}\right\}$$

$$=\pm Q^{-\frac{1}{2}}\cos\left\{-\int_{z_2}^{z}dz\,Q(z)-\frac{\pi}{4}\right\}$$

或

$$\tilde{u}(z)=\pm Q^{-\frac{1}{2}}\cos\left\{\int_{z_2}^{z}dz\,Q(z)+\frac{\pi}{4}\right\}, \tag{119.4a}$$

由于(119.1)式可以推广为

$$\tilde{u}(z)=Q^{-\frac{1}{2}}\cos\left\{\int_{z_1}^{z}dz\,Q(z)-\frac{\pi}{4}\right\}, \tag{119.4b}$$

(119.4a) 和 (119.4b) 中两个余弦函数的自变量只能相差 π 的整数倍：

$$\int_{z_1}^{z}dz\,Q(z)-\frac{\pi}{4}=\int_{z_2}^{z}dz\,Q(z)+\frac{\pi}{4}+n\pi$$

或

$$\int_{z_1}^{z_2}dz\,Q(z)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi. \tag{119.5}$$

这是普遍的 WKB 本征值公式. 现在我们将它应用于重力场，则得

$$\frac{2}{3}kz_2=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi. \tag{119.6}$$

用能量代替 k，并令 $z_2=E/mg$，最后得到

① 公式中的双重符号是胡格公式的推导过程中遗留下来没有解决的问题，因为它和归一化无关.

$$E_n=\frac{1}{2}\left[3\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{2}{3}}\sqrt[3]{\hbar^2mg^2},\qquad(119.7)$$

它和精确解的渐近表示式(40.14)是一致的.

注　不难将(119.5)式应用于问题 118 的谐振子. 对于谐振子

$$\int_{-x_0}^{+x_0}dx\,Q(x)=\frac{E}{\hbar\omega}\pi,$$

代入(119.5)式右边,立即给出能级公式

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega.$$

问题 120　WKB 近似法中的开普勒问题

试将 WKB 方法应用于吸引库仑场

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}$$

的径向波动方程,确定其本征值.

解　WKB 本征值条件

$$\int_{r_1}^{r_2}Q(r)dr=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi;\quad n_r=0,\ 1,\ 2,\ \cdots\qquad(120.1)$$

可以应用于正能量也可以应用于负能量 E,其中

$$Q^2=\frac{2m}{\hbar^2}[E-V_{eff}(r)]\qquad(120.2)$$

并且 $r_1<r_2$ 是二个经典回转点,符号 V_{eff} 表示其中包括离心项,并且将 $l(l+1)$ 换成 $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$(参见问题 121). 因此,在现在的情况下

$$Q^2=\frac{2m}{\hbar^2}\left\{-|E|+\frac{e^2}{r}-\frac{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{2mr^2}\right\},\qquad(120.3)$$

利用缩写

$$k^2=\frac{2m|E|}{\hbar^2};\quad a=\frac{\hbar^2}{me^2};\quad \lambda=l+\frac{1}{2}\qquad(120.4)$$

则两个回转点变成

$$r_1=\frac{1}{k^2a}\{1-\sqrt{1-(\lambda ka)^2}\};$$

$$r_2=\frac{1}{k^2a}\{1+\sqrt{1-(\lambda ka)^2}\} \tag{120.5}$$

而

$$Q^2=\frac{k^2}{r^2}(r-r_1)(r_2-r). \tag{120.6}$$

因此本征值条件(120.1)化为

$$k\int_{r_1}^{r_2}\frac{dr}{r}\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi. \tag{120.7}$$

积分(120.7)可分三步进行计算. 先引用一个新变量 x, 令

$$r=\frac{1}{2}(r_2-r_1)x+\frac{1}{2}(r_2+r_1).$$

这样一来, 根号内的二次形就对角化了. 接着可以用第二个代换

$$y=\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}$$

将(120.7)化为有理函数的积分:

$$k\frac{(r_2-r_1)^2}{r_1}\int_{-\infty}^{+\infty}dy\,\frac{y^2}{(y^2+1)^2(y^2+p^2)^2}=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi$$

其中

$$p^2=r_2/r_1.$$

将积分路线变形为上半复 y 平面中的无穷大半圆, 就剩下两个极点 $y=i$ 和 $y=ip$, 后者是二阶极点. 算出其留数, 最后得到

$$\frac{\pi}{2}kr_1(\sqrt{r_2/r_1}-1)^2=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi. \tag{120.8}$$

利用 $\lambda ka=t$, 上式可以写成

$$\frac{\lambda}{2t}[1-\sqrt{1-t^2}]\left(\sqrt{\frac{1+\sqrt{1-t^2}}{1-\sqrt{1-t^2}}}-1\right)^2=n_r+\frac{1}{2}$$

或者更简单地写成

$$\lambda\frac{1-t}{t}=n_r+\frac{1}{2}. \tag{120.9}$$

由此可见

$$t=\frac{\lambda}{n_r+\frac{1}{2}+\lambda} \quad 或 \quad ka=\frac{1}{n_r+\frac{1}{2}+\lambda};$$

因此，按照(120.4)式，则得

$$E=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{\left(n_r+\frac{1}{2}+\lambda\right)^2}. \tag{120.10}$$

由于 $\lambda=l+\frac{1}{2}$，上式就是熟知的具有主量子数

$$n=n_r+l+1 \tag{120.11}$$

的精确本征值公式。

注　为了得到上面的结果，重要的是将离心项中的 $l(l+1)$ 换成 $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$. 这意味着，即使对于 S 态，这一项也不等于零. 如果略去它而用

$$Q^2=\frac{2m}{\hbar^2}\left\{-|E|+\frac{e^2}{r}\right\}$$

进行计算，则得到的量子数 n 将是半整数. 这一点是容易看出来的. 由于 $\lambda=0$，(120.5)式给出的回转点位置是 $r_1=0$ 和 $r_2=2/(k^2a)$，条件(120.8)可以写成

$$\frac{\pi}{2}k\left(\sqrt{r_2}-\sqrt{r_1}\right)^2=\frac{\pi}{kz}=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi.$$

问题 121　没有力场时的 WKB 相角

试证明在径向波函数中用 $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$ 代替 $l(l+1)$ 后，没有力场的波函数具有正确的渐近行为.

解　按照(117.18)式，对于 $V=0$，在任意归一化下，我们有

$$\chi_l^{\mathrm{WKB}}=\left(1-\frac{\lambda^2}{k^2r^2}\right)^{-\frac{1}{4}}\sin\left\{k\int_{r_t}^{r}dr\sqrt{1-\frac{\lambda^2}{k^2r^2}}+\frac{\pi}{4}\right\} \tag{121.1}$$

其中 $\lambda^2=l(l+1)$，并且回转点在 $r_t=\lambda/k$ 处. 这个函数的振幅因子在 r 增大时趋近于 1，因此在讨论渐近行为时可以略去. 利用变

量 $x=r_t/r$ 不难将积分算出来：

$$\int_{r_t}^{r} dr\sqrt{1-\frac{r_t^2}{r^2}}=r_t\left[\sqrt{\frac{r^2}{r_t^2}-1}+\sin^{-1}\frac{r_t}{r}-\frac{\pi}{2}\right].$$

对于大 r，由于 $r_t/r\ll 1$，上述表示式可以展成 r_t/r 的幂级数，由此可得

$$r_t\left[\frac{r}{r_t}\left(1-\frac{1}{2}\,\frac{r_t^2}{r^2}\right)+\frac{r_t}{r}+\cdots-\frac{\pi}{2}\right]\to r-\frac{\pi}{2}r_t.$$

因此 WKB 函数在大 r 处变为

$$\chi_l^{\mathrm{WKB}}\to\sin\left(kr-\frac{\pi}{2}kr_t+\frac{\pi}{4}\right)=\sin\left[kr-\frac{\pi}{2}\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)\right]. \tag{121.2}$$

另一方面，在同样归一化下的精确解是

$$\chi_l=j_l(kr)\to\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right). \tag{121.3}$$

如果

$$\lambda-\frac{1}{2}=l\ \text{或}\ \lambda=l+\frac{1}{2}, \tag{121.4}$$

则对于大 r，表示式(121.2)和(121.3)完全一样．这就证明在离心项中应当用 $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$ 代替 $l(l+1)$．

问题 122　WKB 相角的计算

试证明，当用

$$\lambda^2=\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{122.1}$$

代替 $l(l+1)$ 时，由朗格边界条件(问题 117)确定的径向 WKB 波函数的渐近相角同样可以由式

$$\delta_l=k\lim_{r\to\infty}\left\{\int_{r_t}^{r}dr\sqrt{1-\frac{V}{E}-\frac{\lambda^2}{k^2r^2}}-\int_{\lambda/k}^{r}dr\sqrt{1-\frac{\lambda^2}{k^2r^2}}\right\} \tag{122.2}$$

计算出来，即 δ_l 等于有散射势和没有散射势的两个 WKB 积分之差，每个积分的下限是各自的回转点.

解 相角 δ_l 的朗格表示式可以由对于大 r 的渐近式(117.18)得到

$$\sin\left\{k\int_{r_t}^{r}dr\sqrt{1-\frac{V}{E}-\frac{\lambda^2}{k^2r^2}}+\frac{\pi}{4}\right\}\to\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right),$$

即

$$\delta_l=k\lim_{r\to\infty}\left\{\int_{r_t}^{r}dr\sqrt{1-\frac{V}{E}-\frac{\lambda^2}{k^2r^2}}-r\right\}+\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}. \quad (122.3)$$

不难证明(122.2)式和(122.3)式是相等的. 由于(见问题 121)

$$\int_{\lambda/k}^{r}dr\sqrt{1-\frac{\lambda^2}{k^2r^2}}=\frac{\lambda}{k}\left[\sqrt{\frac{r^2}{(\lambda/k)^2}-1}+\sin^{-1}\frac{\lambda/k}{r}-\frac{\pi}{2}\right],$$

对于大 r，上式趋近于

$$\frac{\lambda}{k}\left[\frac{r}{\lambda/k}-\frac{\pi}{2}\right]=r-\frac{\lambda}{k}\frac{\pi}{2}=r-\frac{1}{k}\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}.$$

用上式替换(122.2)式的第二个积分，(122.2) 式就变成 (122.3)式，这就是我们要证明的.

问题 123 用 WKB 方法计算库仑场的相角

试用 WKB 近似计算库仑场的分波相角并与精确解比较.

解 利用缩写

$$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2;\quad\frac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v}=\varkappa;\quad l+\frac{1}{2}=\lambda, \quad (123.1)$$

径向波函数有如下的渐近行为[见问题 111 的(111.10)式]

$$\chi_l\propto\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}-\varkappa\log 2kr+\eta_l\right) \quad (123.2)$$

其中

$$\eta_l=\arg\Gamma(l+1+i\varkappa). \quad (123.3)$$

另一方面，WKB 法给出

$$\chi_l \propto \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \tag{123.4}$$

其中

$$\delta_l = \lim_{r\to\infty}\left\{\int_{r_z}^{r} dr\sqrt{k^2 - \frac{2\varkappa k}{r} - \frac{\lambda^2}{r^2}} - \int_{\lambda/k}^{r} dr\sqrt{k^2 - \frac{\lambda^2}{r^2}}\right\}. \tag{123.5}$$

因此我们必须证明(123.5)是精确解

$$\delta_l = -\varkappa\log 2kr + \eta_l \tag{123.6}$$

的一个近似表示式. 其中的 η_l 由(123.3)式给出.

利用变量 $x=kr$ 以及缩写

$$X = x^2 - 2\varkappa x - \lambda^2,$$

可以将(123.5)改写为

$$\delta_l = \lim_{x\to\infty}\left\{\int_{x_z}^{x}\frac{dx}{x}\sqrt{X} - \int_{\lambda}^{x}\frac{dx}{x}\sqrt{x^2-\lambda^2}\right\},$$

其中

$$x_z = \varkappa + \sqrt{\varkappa^2+\lambda^2}.$$

利用积分公式

$$\int\frac{dx}{x}\sqrt{X} = \sqrt{X} - \varkappa\log(x-\varkappa+\sqrt{X}) + \lambda\sin^{-1}\frac{\varkappa x+\lambda^2}{x\sqrt{\varkappa^2+\lambda^2}}$$

(并考虑到正确的积分限)则得

$$\delta_l = \lim_{x\to\infty}\left\{\sqrt{X} - \sqrt{x^2-\lambda^2} - \varkappa\log\frac{x-\varkappa+\sqrt{X}}{\sqrt{\varkappa^2+\lambda^2}}\right.$$
$$\left. + \lambda\left[\sin^{-1}\frac{\varkappa x+\lambda^2}{x\sqrt{\varkappa^2+\lambda^2}} - \sin^{-1}\frac{\lambda}{x}\right]\right\}.$$

将上式展开成 $\frac{1}{x}$ 的幂级数,就可以算出极限值. 结果是

$$\delta_l = -\varkappa + \varkappa\log\sqrt{\varkappa^2+\lambda^2} + \lambda\sin^{-1}\frac{\varkappa}{\sqrt{\varkappa^2+\lambda^2}} - \varkappa\log 2x$$

或者,与(123.6)式比较后得到

$$\left.\begin{aligned}\eta_l &= \varkappa(\log x-1)+\varkappa f\left(\frac{\lambda}{\varkappa}\right),\\ f(z) &= \log\sqrt{1+z^2}+z\sin^{-1}\frac{1}{\sqrt{1+z^2}}.\end{aligned}\right\} \tag{123.7}$$

现在必须将 WKB 的结果(123.7)式和正确表示式(123.3)加以比较.

在附表中对于 $\varkappa=2$ 给出几个数值结果. 由(123.7)式可以直接算出 WKB 值; 而(123.3)式中 η_l 的计算要用到关系式

$$\eta_l=\tan^{-1}\frac{\varkappa}{l}+\eta_{l-1}, \tag{123.8a}$$

$$\eta_0=-\frac{\pi}{4}+\varkappa(\log\varkappa-1)-\frac{1}{12\varkappa}-\frac{1}{360\varkappa^3}\cdots \tag{123.8b}$$

其中 (123.8b) 对于 $\varkappa\geqslant 2$ 是一个收敛很快的级数. 由附表可见, WKB 值和正确值符合得很好. 对于 $l=0$, 这种符合可以看得更清楚, 这时由于 $z=\frac{\lambda}{\varkappa}=\frac{1}{4}\ll 1$, (123.7)式可以展开为

$$\eta_0^{\mathrm{WKB}}=\frac{\pi}{4}+\varkappa(\log\varkappa-1)-\frac{1}{8\varkappa}+\frac{1}{192\varkappa^3}\cdots,$$

上式和(123.8b)只相差

$$\eta_0^{\mathrm{WKB}}-\eta_0\simeq-\frac{1}{24\varkappa}.$$

另一方面, 当 $\lambda\gg\varkappa$ 并且 $\lambda\gg 1$ 时, (123.7)式给出

$$(\eta_{l+1}-\eta_l)^{\mathrm{WKB}}=\frac{\varkappa}{\lambda}-\frac{\varkappa}{2\lambda^2}+\frac{\varkappa}{3\lambda^3}-\frac{\varkappa^3}{3\lambda^3}\cdots$$

而由(123.8a)则有

$$(\eta_{l+1}-\eta_l)^{\text{精确}}=\frac{\varkappa}{\lambda}-\frac{\varkappa}{2\lambda^2}+\frac{\varkappa}{4\lambda^3}-\frac{\varkappa^3}{3\lambda^3}\cdots$$

两者之差象 $\frac{\varkappa}{12\lambda^3}$ 那样趋于零. 这意味着, 如果在附表中继续列出 $l=4$ 以上的值, 则 WKB 的相角值和正确的相角值将不会有显著的差别.

l	η_l 的正确值	η_l 的 WKB 值
0	0.130	0.110
1	1.237	1.222
2	2.022	2.012
3	2.610	2.610
4	3.074	3.076

问题 124　准　　势

引入一个新变量

$$t=r\sqrt{1-\frac{V}{E}} \tag{124.1}$$

代替变量 r(Sabatier 变换)，往往是有帮助的．试证明，利用上述变换可以将 WKB 相角写成一个对于准势

$$Q(t)=2E\log\frac{r(t)}{t} \tag{124.2}$$

的简单积分(用 t 作变量)，这个准势基本上代替了势 $V(r)$．

解　利用缩写

$$\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\Big/k\right]=b\ (\text{“碰撞参数”}) \tag{124.3}$$

WKB 相角(122.2)可以写为

$$\delta_l=k\lim_{r\to\infty}\left\{\int_{r_t}^{r}dr\sqrt{1-\frac{V}{E}-\frac{b^2}{r^2}}-\int_{b}^{r}dr\sqrt{1-\frac{b^2}{r^2}}\right\} \tag{124.4}$$

其中 r_t 是第一个积分中根式的最大的零点．稍许麻烦的是，当 $r\to\infty$ 时，只有两个积分的差是存在的，而每一个积分都趋于无穷大，并且两个积分有不同的下限．

然而，利用变换(124.1)可以消除这一困难，这个变换使(124.4)的第一个积分变成

$$\int_{r_t}^{r}dr\sqrt{1-\frac{V}{E}-\frac{b^2}{r^2}}=\int_{b}^{t}dt\,\frac{d\log r(t)}{dt}\sqrt{t^2-b^2}. \tag{124.5}$$

当然，只有当变换 $t=t(r)$ 存在着唯一的逆变换 $r=r(t)$（亦即 t 是 r 的单调函数）时，才能这样做．如果将(124.5)代入(124.4)，并把(124.4)式第二个积分中的字母 r 换成 t，则得

$$\delta_l = k\int_b^t dt\,\sqrt{t^2-b^2}\left\{\frac{d\log r(t)}{dt}-\frac{1}{t}\right\}. \tag{124.6}$$

利用恒等式

$$\frac{d\log r}{dt}-\frac{1}{t}=\frac{d}{dt}\log\frac{r(t)}{t}$$

代入(124.6)式，分部积分后，则得更简单的表示式

$$\delta_l=-\frac{1}{2}\,k\int_b^t\frac{dt\,t}{\sqrt{t^2-b^2}}\,\frac{Q(t)}{E}, \tag{124.7}$$

其中 $Q(r)$ 是由(124.2)式定义的函数．

只要 $|V(r)|\ll E$，函数 $Q(t)$ 与 $V(r)$ 相差就很小．如果把(124.2)改写成

$$Q(t)=-E\log\left(1-\frac{V(r)}{E}\right), \tag{124.8}$$

就可以看出这一点．上式在一级近似下给出 $Q(t)=V(r)$．实际上，$Q(t)$ 的零点以及靠近零点邻域内的函数值和同样区域内的 $V(r)$ 的零点及函数值完全重合．

文献：Sabatier, P. C. 提出(124.1)式的变换：Nuovo Cimento **37**, 1180 (1965)．由 Vollmer, G., Krüger H. 发展的准势方法：Physics Letlers **28 A**, no. 2(1968)．由 Vollmer, G. 给出的详细讨论：Z. Physik **226**, 423(1969)．

F. 磁　　场

问题 125　磁场的引入

试建立有磁场存在时的哈密顿量，并证明，在这样推广的薛定谔方程中出现矢势，并不与规范不变性矛盾．

解 在经典电动力学中已经证明，①用矢势 $\boldsymbol{A}$ 描述的磁场使得电荷为 e 的任意粒子的动量 $\boldsymbol{p}$ 要用

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A} \tag{125.1}$$

来代替，于是非相对论性的哈密顿量变成

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\Phi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r}), \tag{125.2}$$

其中 Φ 是标量电磁势，而 $V(\boldsymbol{r})$ 是由非电磁力（例如核力）所引起的任何另外的势．将 $\boldsymbol{p}$ 换成算符 $\frac{\hbar}{i}\nabla$，经典表示式(125.2)就可以转换成量子力学的表示式．因此我们得到推广的薛定谔方程

$$\left.\begin{aligned}&-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi\\ \text{其中}\quad&H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{e\hbar i}{2mc}(\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\\&\quad+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2+e\Phi+V.\end{aligned}\right\} \tag{125.3}$$

由于

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}\psi=\psi\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi,$$

上式可化为

$$\begin{aligned}H=&-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{e\hbar}{mc}i\left(\boldsymbol{A}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}\right)\\&+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2+e\Phi+V.\end{aligned} \tag{125.4}$$

在麦克斯韦场的经典理论中还证明，矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 Φ 可以同时进行如下的规范变换

① 证明的办法是：利用哈密顿量 (125.2) 建立正则方程，消去动量后导出运动方程

$$m\ddot{\boldsymbol{r}}=e\left(\boldsymbol{\mathscr{E}}+\frac{1}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{\mathscr{B}}\right),$$

即作用在电荷为 e 的粒子上的洛仑兹力的正确表示式。

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla\chi;\quad \Phi\to\Phi'=\Phi-\frac{1}{c}\dot{\chi}, \tag{125.5}$$

(其中 χ 是时间和空间的任意函数),而不会改变场强

$$\mathscr{B}=\operatorname{curl}\boldsymbol{A};\quad \mathscr{E}=-\operatorname{grad}\Phi-\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}. \tag{125.6}$$

如果物理现象仅仅决定于场强而不决定于势,则这个规范不变性在量子理论中也必须成立.

现在如果我们简单地将(125.5)代入哈密顿量(125.4),当然会得到一些破坏薛定谔方程规范不变性的附加项. 为了可能消去这些项,只有让波函数也参与规范变换. 但是由于 $\psi^*\psi$ 有确定的物理意义,因此它和场强一样不会由于变换而改变,唯一的可能是设

$$\psi\to\psi'=e^{i\alpha}\psi, \tag{125.7a}$$

其中 α 仍然可以是 $\boldsymbol{r}$ 和 t 的任意适当的函数. 这样一来,

$$\nabla\psi'=e^{i\alpha}\{\nabla\psi+i\psi\nabla\alpha\};$$
$$\nabla^2\psi'=e^{i\alpha}\{\nabla^2\psi+2i\nabla\psi\cdot\nabla\alpha+i\psi\nabla^2\alpha-(\nabla\alpha)^2\psi\};$$
$$\dot{\psi}'=e^{i\alpha}\{\dot{\psi}+i\dot{\alpha}\psi\}.$$

将这些表示式代入(125.4)式,按(125.5)同时用 $\boldsymbol{A}'$, Φ' 代替 $\boldsymbol{A}$, Φ. 则得

$$\begin{aligned}e^{-i\alpha}H'\psi'=&-\frac{\hbar^2}{2m}\{\nabla^2\psi+2i\nabla\alpha\cdot\nabla\psi+i\psi\nabla^2\alpha-(\nabla\alpha)^2\psi\}\\&+\frac{e\hbar}{mc}i\left\{\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi+i\psi\boldsymbol{A}\cdot\nabla\alpha+\nabla\chi\cdot\nabla\psi+i\psi\nabla\chi\cdot\nabla\alpha\right.\\&\left.+\frac{1}{2}\psi(\nabla\cdot\boldsymbol{A})+\frac{1}{2}\psi\nabla^2\chi\right\}\\&+\frac{e^2}{2mc^2}\{\boldsymbol{A}^2+2\boldsymbol{A}\cdot\nabla\chi+(\nabla\chi)^2\}\psi\\&+\left(e\Phi-\frac{e}{c}\dot{\chi}\right)\psi+V\psi.\end{aligned}$$

重新整理后可得

$$e^{-i\alpha}H'\psi' = H\psi + \frac{e\hbar}{mc} i\nabla\left(\chi - \frac{\hbar c}{e}\alpha\right)\cdot\nabla\psi$$
$$+ \frac{e\hbar}{2mc} i\left\{\nabla^2\left(\chi - \frac{\hbar c}{e}\alpha\right)\right.$$
$$\left. + \frac{e^2}{mc^2} \boldsymbol{A}\cdot\nabla\left(\chi - \frac{\hbar c}{e}\alpha\right)\right\}\psi$$
$$+ \frac{e^2}{2mc^2}\left\{(\nabla\chi)^2 - 2\frac{\hbar c}{e}\nabla\chi\cdot\nabla\alpha + \frac{\hbar^2c^2}{e^2}(\nabla\alpha)^2\right\}\psi$$
$$- \frac{e}{c}\dot{\chi}\psi + V\psi$$

如果令

$$\alpha = \frac{e}{\hbar c}\chi, \tag{125.7b}$$

则上述表示式就可简化成

$$e^{-i\alpha}H'\psi' = H\psi - \frac{e}{c}\dot{\chi}\psi.$$

由于在同样的变换下薛定谔方程(125.3)式的左边给出

$$-\frac{\hbar}{i}e^{-i\alpha}\dot{\psi}' = -\frac{\hbar}{i}(\dot{\psi} + i\dot{\alpha}\psi) = -\frac{\hbar}{i}\dot{\psi} - \frac{e}{c}\dot{\chi}\psi,$$

上二式中右边第二项互相抵消，于是得到 $-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}' = H'\psi'$. 这就证明了，当 ψ 按照(125.7a, b)变换时，薛定谔方程具有规范不变性.

问题 126　有磁场存在时的流

试导出带有矢势的薛定谔方程的流密度，并证明它的规范不变性.

解　在问题 1 中已经导出过几率守恒定律，所用的办法是由薛定谔方程及其复共轭构成一个连续性方程. 这里我们将采用相同的办法，由

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{e\hbar}{mc}i\left(\boldsymbol{A}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\operatorname{div}\boldsymbol{A}\right)\psi$$
$$+\left(\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2+e\Phi+V\right)\psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (126.1a)$$

和

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*-\frac{e\hbar}{mc}i\left(\boldsymbol{A}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\operatorname{div}\boldsymbol{A}\right)\psi^*$$
$$+\left(\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2+e\Phi+V\right)\psi^*=+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \qquad (126.1b)$$

出发. 在(126.1a)两边乘以 ψ^*, 而在(126.1b)两边乘以 ψ, 然后相减,则得

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)$$
$$+\frac{e\hbar}{mc}i\{\boldsymbol{A}\cdot\nabla(\psi^*\psi)+\psi^*\psi\operatorname{div}\boldsymbol{A}\}=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi).$$

由于

$$\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*=\operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$$

和

$$\boldsymbol{A}\cdot\nabla(\psi^*\psi)+\psi^*\psi\operatorname{div}\boldsymbol{A}=\operatorname{div}(\boldsymbol{A}\psi^*\psi),$$

前式左边可以写成一个矢量场的散度, 保持几率密度的定义

$$\rho=\psi^*\psi \qquad (126.2)$$

则得连续性方程

$$\operatorname{div}\boldsymbol{s}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \qquad (126.3)$$

其中几率流密度

$$\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*-2i\frac{e}{\hbar c}\boldsymbol{A}\psi^*\psi\right) \qquad (126.4)$$

这是(1.6)式(对于 $\boldsymbol{A}=0$ 导出的)的推广.

运用前一问题中导出的规范变换

$$\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla\chi;\quad \psi'=e^{i\alpha}\psi;\quad \alpha=\frac{e}{\hbar c}\chi \qquad (126.5)$$

得到

$$(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)'=\psi^*(\nabla\psi-i\psi\nabla\alpha)-\psi(\nabla\psi^*-i\psi^*\nabla\alpha)$$
$$=(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+2i\psi^*\psi\nabla\alpha$$

和

$$-2i\frac{e}{\hbar c}(\boldsymbol{A}\psi^*\psi)'=-2i\frac{e}{\hbar c}(\boldsymbol{A}\psi^*\psi+\psi^*\psi\nabla\chi)$$
$$=-2i\frac{e}{\hbar c}\boldsymbol{A}\psi^*\psi-2i\psi^*\psi\nabla\alpha.$$

这表明流密度(126.4)具有规范不变性. 显然, (126.2)式的 ρ 也具有规范不变性,因此几率守恒定律是规范不变的.

问题 127 正常塞曼效应

试确定中心力场中的一个电子在均匀外磁场 $\mathscr{H}$ 作用下的定态,不考虑电子的自旋.

解 如果略去相对论性效应,(125.3)式化为(对于定态,并注意电子的电荷为 $-e$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2u-\frac{e\hbar}{mc}i(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)u+Vu=Eu. \qquad (127.1)$$

这里我们选取 $\boldsymbol{A}$ 的规范使 $\operatorname{div}\boldsymbol{A}=0$. 对于一个沿 z 方向的均匀磁场 $\mathscr{H}$,只要令

$$A_x=\frac{-1}{2}\mathscr{H}y;\ A_y=\frac{1}{2}\mathscr{H}x;\ A_z=0, \qquad (127.2)$$

就可以做到这一点. 这样一来

$$\boldsymbol{A}\cdot\nabla u=\frac{1}{2}\mathscr{H}\left(x\frac{\partial u}{\partial y}-y\frac{\partial u}{\partial x}\right)=\frac{1}{2}\mathscr{H}\frac{\partial u}{\partial\varphi} \qquad (127.3)$$

并且(127.1)式可以写为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2u-\frac{e\hbar}{2mc}\mathscr{H}i\frac{\partial u}{\partial\varphi}+Vu=Eu \qquad (127.4)$$

含磁场的项也可以写成

$$\frac{e}{2mc}\mathscr{H}\cdot\boldsymbol{L} \tag{127.5}$$

的形式，其中 $\boldsymbol{L}$ 是角动量算符，它的 z 分量是

$$L_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

按照电磁场的麦克斯韦理论，一个以角动量 $\boldsymbol{L}$ 运动的带电荷 $-e$ 的产生一个磁偶极场，其磁偶极矩是

$$\boldsymbol{M}=-\frac{e}{2mc}\boldsymbol{L}, \tag{127.6}$$

因此(127.5)式可以写成 $-\boldsymbol{M}\cdot\mathscr{H}$. 事实上，这正是熟知的一个偶极子 $\boldsymbol{M}$ 在磁场 $\mathscr{H}$ 中的势能表示式.

为求解微分方程(127.4)式，我们令

$$u=f_l(r)Y_{l,\mu}(\theta,\ \varphi), \tag{127.7}$$

这样，磁矩项就化为

$$\frac{e\hbar}{2mc}\mathscr{H}\mu\cdot u,$$

因此，代替(127.4)式，有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2u+Vu=\left(E-\frac{e\hbar}{2mc}\mathscr{H}\mu\right)u. \tag{127.8}$$

这个微分方程和 $\mathscr{H}=0$ 的方程是一样的. 如果我们用 $E^0_{n,l}$ 表示 $\mathscr{H}=0$ 时方程的本征值，则在有磁场存在时，能级将移动到

$$E_{n,l,\mu}=E^0_{n,l}+\frac{e\hbar}{2mc}\mathscr{H}\mu \tag{127.9}$$

或者，由于 $\hbar\mu=L_z$，再利用(127.6)式，则有

$$E_{n,l,\mu}=E^0_{n,l}-\boldsymbol{M}\cdot\mathscr{H}, \tag{127.10}$$

这正如所期望的，与经典的考虑一致.

特征磁矩 $e\hbar/2mc$ 称为玻尔磁子，量子数 μ 称为磁量子数. 现在我们得到的本征态和 $\mathscr{H}=0$ 的相同，但是在能量值中的方向简并性则被磁场破坏了.

注 如果将磁能算符(127.5)

$$W_{\text{mag}}=\frac{e}{2mc}\mathscr{H}L_z, \tag{127.11}$$

看作微扰，同样可以得到能量公式(127.9)。按微扰理论，能量的一级修正是 W_{mag} 在未受微扰的本征态中的对角元素

$$\Delta E_{n\,l,\mu}=\langle n,\ l,\ \mu|\,W_{\text{mag}}\,|n,\ l,\ \mu\rangle$$

$$=\frac{e}{2mc}\mathscr{H}\int d^3x\,u^*_{n,l,\mu}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}u_{n,l,\mu}=\frac{e}{2mc}\mathscr{H}\hbar\mu. \tag{127.12}$$

这个近似值和(127.9)的准确结果完全一致，因为积分(127.12)中的零级本征函数和精确的本征函数一样——可参看问题 216 中对于选择定则的讨论。

问题 128 无自旋时顺磁和抗磁的磁化率

对一个在中心力场中无自旋的束缚电子，试推导顺磁和抗磁磁化率的公式。

解 如果一个 $\mathscr{H}\parallel z$ 的磁场作用在所考虑原子的电子上，设 $\mathscr{H}=0$ 时，电子在原子中运动的哈密顿量为 H_0，则 $\mathscr{H}\neq 0$ 时，有

$$H=H_0-\frac{e\hbar}{mc}i\boldsymbol{A}\cdot\nabla+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2. \tag{128.1}$$

这里假设矢势 $\boldsymbol{A}$ 的归一化满足 $\boldsymbol{A}$ 的散度为零。这一点是可以做到的，如取

$$A_x=-\frac{1}{2}\mathscr{H}y;\quad A_y=+\frac{1}{2}\mathscr{H}x;\quad A_z=0 \tag{128.2}$$

于是

$$H=H_0+\frac{e\hbar}{mc}i\frac{\mathscr{H}}{2}\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)+\frac{e^2}{2mc^2}\cdot\frac{\mathscr{H}^2}{4}(x^2+y^2)$$

或

$$H=H_0+\frac{e\mathscr{H}}{2mc}L_z+\frac{e^2\mathscr{H}^2}{8mc^2}r^2\sin^2\theta. \tag{128.3}$$

在态 $|n\rangle$ 中(n 表示描述电子态的全部量子数)，磁能微扰计算到二级修正为

$$\Delta E_n = \left\langle n \left| \frac{e\mathscr{H}}{2mc} L_z + \frac{e^2\mathscr{H}^2}{8mc^2} r^2 \sin^2\theta \right| n \right\rangle + \sum_{n'}{}' \frac{\left| \left\langle n' \left| \frac{e\mathscr{H}}{2mc} L_z \right| n \right\rangle \right|^2}{E_n - E_{n'}}. \tag{128.4}$$

设物质中所有的原子都处在它们的基态（这是一个合理的假设，因为激发能一般地等于几个电子伏，因而比所得到的热能大得多）. 设这个基态的角动量为 $\hbar l$，这时仍可以出现在场方向上投影为 $\hbar m_l$ 的任意取向. 这样一来，对一个原子，(128.4)式中第一项对磁能的贡献是

$$E^{(1)} = \frac{e\mathscr{H}}{2mc} \hbar m_l. \tag{128.5}$$

在热平衡时具有角动量分量 $\hbar m_l$ 的原子数与玻尔兹曼因子 $\exp(-E^{(1)}/kT)$ 成正比. 于是对每一个原子，磁能项的热平均变成

$$\overline{E^{(1)}} = \frac{e\hbar}{2mc} \mathscr{H} \frac{\sum_{m_l=-l}^{+l} m_l e^{-\alpha m_l}}{\sum_{m_l=-l}^{+l} e^{-\alpha m_l}} \quad \text{其中} \quad \alpha = \frac{e\hbar}{2mc} \frac{\mathscr{H}}{kT}. \tag{128.6}$$

对于所有合理的场强 $\mathscr{H}$，无量纲的量 α 是很小的 $(\alpha \ll 1)$，于是指数函数可以展开

$$\frac{\Sigma m_l e^{-\alpha m_l}}{\Sigma e^{-\alpha m_l}} = \frac{\Sigma \left(m_l - \alpha m_l^2 + \frac{1}{2} \alpha^2 m_l^3 \cdots \right)}{\Sigma \left(1 - \alpha m_l + \frac{1}{2} \alpha^2 m_l^2 \cdots \right)}.$$

所有的求和对于 $m_l = 0$ 是对称的，因此所有 m_l 奇次方项的求和都等于零. 而上式化为

$$\frac{-\alpha \Sigma m_l^2 + O(\alpha^3)}{\Sigma 1 + O(\alpha^2)} = -\alpha \frac{\frac{1}{3} l(l+1)(2l+1) + \cdots}{(2l+1) + \cdots},$$

略去的项比留下的首项小 α^2 的数量级. 因此最后得到，当每立方

厘米有 N 个原子时，每立方厘米的磁能是

$$\overline{E^{(1)}}\,N=-N\frac{e\hbar}{2mc}\mathscr{H}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\frac{\mathscr{H}}{kT}\right)\frac{1}{3}l(l+1). \qquad (128.7)$$

注意，虽然原来的 $E^{(1)}$ 只和 $\mathscr{H}$ 的一次方成正比，而上式的能量却与场强的平方成正比.

(128.4)式的第二项

$$E^{(2)}=\frac{e^2\mathscr{H}^2}{8mc^2}\langle n|r^2\sin^2\theta|n\rangle \qquad (128.8)$$

比 $E^{(1)}$ 小得多(参见下面)，于是在第一项不等于零时，它实际上不起作用. (128.4)式中的第三项也是这样，因此，对于所有 $l>0$ 的情形，第一项已经足够. 而对于 $l=0$，第二项 $E^{(2)}$ 决定这物质的磁性行为. 由于

$$\frac{1}{4\pi}\oint d\Omega\sin^2\theta=\frac{2}{3},$$

我们得到

$$E^{(2)}=\frac{e^2\mathscr{H}^2}{12mc^2}\langle 0|r^2|0\rangle, \qquad (128.9)$$

其中 $|0\rangle$ 表示基态 S 波函数，并且 $\langle 0|r^2|0\rangle$ 是 r^2 在这个态中的期待值. 这时不需要取热平均. 由于 $L_z|0\rangle=0$，(128.4)式的第一和第三两项，对于 S 态，均等于零. 因而不需要考虑它们.

按照麦克斯韦的电动力学，$\mathscr{H}$ 的改变 $\delta\mathscr{H}$ 引起磁能密度的改变是

$$\delta E=-\mathscr{M}\delta\mathscr{H} \qquad (128.10)$$

其中 $\mathscr{M}$ 是磁化强度，即由磁场感生的每立方厘米的磁矩. 假设 $\mathscr{M}$ 正比于 $\mathscr{H}$

$$\mathscr{M}=\chi\mathscr{H}, \qquad (128.11)$$

因子 χ 称为磁化率. 将上面二个式子结合起来，就得到

$$\delta E=-\chi\mathscr{H}\,\delta\mathscr{H},$$

因此磁能密度变为

$$E=-\frac{1}{2}\chi\mathscr{H}^2. \tag{128.12}$$

如果 χ 是正的，则称为顺磁性，如果 χ 是负的，则称为抗磁性.

磁能密度的宏观表示式(128.12)，应当和(128.7)式(当 $l\neq 0$ 时)或者和(128.9)式乘上 N 倍(当 $l=0$ 时)一样. 对于 $l\neq 0$ 的情况，我们得到顺磁的行为，其正的磁化率是

$$\chi_{顺}=\frac{2}{3}N\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2\frac{l(l+1)}{kT} \tag{128.13}$$

对于 $l=0$ 的情况，则得到抗磁的行为，其负的磁化率是

$$\chi_{抗}=-N\frac{e^2}{6mc^2}\langle 0|r^2|0\rangle. \tag{128.14}$$

正如所料，(128.13)式和一个恒定偶极矩

$$\boldsymbol{\mu}=\frac{e}{2mc}\boldsymbol{L} \tag{128.15}$$

对取向求统计的经典朗之万表示式相同. 由下面的比值可以看出，抗磁磁化率比顺磁磁化率小得多(正因为如此，在顺磁物质中我们才可以忽略它)

$$\left|\frac{\chi_{顺}}{\chi_{抗}}\right|=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{m\langle r^2\rangle}\Big/kT \tag{128.16}$$

这个比值等于电子转动能量与热能之比，前者[①]达到几个电子伏，而后者在室温下只有 0.03 电子伏这个数量级.

① 其中 $\langle r^2\rangle\sim(\hbar^2/me^2)^2$ 是波尔半径平方的数量级，当 $l=1$ 时，(128.16)式的分子变为 $2me^4/\hbar^2=54.4$ 电子伏.