分离变量法在量子力学中的应用

孙俊峰[1],杨悦玲[1],黄金书[2]

(1. 河南师范大学 物理与电子工程学院,河南 新乡 453007;
2. 南阳师范学院 物理与电子工程学院,河南 南阳 473061)

摘 要:分离变量法是量子力学中求解问题时最常用的方法之一. 本文在分析分离变量法特性的基础上阐明了它在量子力学中的应用,以便于教师和学生在教与学的过程注意总结量子力学的基本特点与方法.

关键词:量子力学;分离变量法;对易关系

中图分类号: O 413.1 **文献标志码**:A **文章编号**:1671 - 6132(2015)03 - 0064 - 04

量子力学作为大学本科物理学专业的四大力学之一,是一门比较难学的课程. 难学的原因除了它的基本概念、描述方法同经典物理学有较大的差别之外,大量数学符号、数理方程和数学方法的应用也是重大困难之一. 比如说,数学符号中除了较常用的微积分符号外,还有 Dirac 符号 $\delta(x-x_0)$,Knoneck 符号 δ_{mn},Levi-Civita 符号 ε_{ijk},Nabla 符号∇和 Laplace 算符∇^2等;数理方程中有用于描写线性谐振子的 Hermit 方程和描写氢原子的球谐方程、Bessel 方程、Lagendre 方程及相应的多项式;数学方法中有 Fourier 变换法、Laplace 变换法、分离变量法、Green 函数法等[1-2]. 其中分离变量法尽管相对比较简单,但应用最广,在整个量子力学的学习中占有重要的位置.

本文通过分析分离变量法的特点和性质,以及它在量子力学中的广泛应用,帮助学生总结量子力学课程的学习规律,培养他们的学习兴趣和解决问题的自信心.

[3] 汪鸽,潘宪民. 中外体育教育专业课程设置比较研究[J]. 北京体育大学学报,2005(4):516 - 519.

[4] 体育院系教材编审委员会《游泳》编写组. 游泳[M]. 北京:人民体育出版社,1985.

[5] 全国体育院校教材委员会游泳教材小组. 游泳运动[M] 北京: 人民体育出版社,2001:104.

[6] 田麦久. 运动训练学. [M]. 北京:人民体育出版社,2000:436 - 439.

[7] 刘庆山. 广东省竞技体育优势项目研究[J]. 西安体育学院学报,2007(1):89 - 93.

[8] 文超. 体育学院田径通用教材的建设与发展[J]. 成都体育学院学报,1993(1):5 - 11.

Study on the characteristics of the swimming materials development in physical education department of colleges and universities in China

YUE Xin-po

(*College of Physical Education*, *Henan Normal University*, *Xinxiang* 453007, *China*)

Abstract:The author studied the swimming teaching materials used in physical education department since the founding of the PRC by means of literature, logic analysis and comparative research methods. Swimming teaching material in China was divided into five developing stages and according to the five stages longitudinal analysis was made. Meanwhile, a comparative study of teaching materials, teaching principles and teaching methods were discussed to prepare for a useful reference for new swimming materials.

Key words:physical education department; swimming; teaching materials

收稿日期:2014 - 11 - 26
基金项目:河南省高校科技创新人才支持计划(2012HASTIT030);河南师范大学博士科研启动课题(QD14205);南阳师范学院教学研究项目

作者简介:孙俊峰(1975—),河南偃师人,副教授,主要从事重味物理现象学和物理教育教学研究.

1 分离变量法的特点和性质

数学上,分离变量法是解析常微分方程或偏微分方程的一种常用方法,它的理论基础是 Fourier 级数展开[3-4]. 它通过代数方法将方程式进行重新编排,让方程式的一部分只含有一个变量,而剩余部分则与此变量无关,这样分离出的两个部分的值都分别等于常数,从而达到求解问题的目的.

一个常微分方程可以写为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)=g(x)h(f(x)). \tag{1}$$

若定义变量 $y=f(x)$,那么

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=g(x)h(y).$$

只要是 $h(y)\neq 0$,就可以将上式变为[5]

$$\frac{\mathrm{d}y}{h(y)}=g(x)\mathrm{d}x.$$

这样,可以将两个变量 x,y 分离到方程式的两边. 由于任何一边的表达式跟另外一边的变量无关,表达式恒等于常数 k. 因此,可以得到两个较易解的常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}y}{h(y)}=g(x)\mathrm{d}x=k. \tag{2}$$

在量子力学中,使用分离变量法以使多元偏微分方程化成几个含有更少变量的偏微分方程,甚至可以化为常微分方程,使问题得到简化和解决[6]. 但要特别注意的是由于量子力学中是用算符来表示力学量的,只有在算符对易的情况下,数学上的分离变量法才能一般性的适用.

2 分离变量法在量子力学中的广泛应用

分离变量法在量子力学中的应用很广泛,如在求解定态薛定谔方程、动量算符的本征方程、算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态、氢原子体系、两体问题、氦原子体系、包含电子自旋的波函数、全同粒子体系等方面. 下面我们就几种情形进行分析和说明.

2.1 定态薛定谔方程

我们知道,在量子力学中求解微观体系的状态,需要求解薛定谔方程,即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t). \tag{3}$$

一般情况下,体系的相互作用势能 $V(\vec{r},t)$ 和描写系统状态的波函数 $\Psi(\vec{r},t)$ 都是空间变量 $\vec{r}$ 和时间变量 t 的函数,求解非常困难,经常没有办法给出精确解. 但是当体系相互作用势与时间无关时,则有算符 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$和 $\hat{H}=\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right]$相互对易,此时可以利用分离变量法将体系的波函数分解成时间部分和空间部分的乘积,即

$$\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})f(t), \tag{4}$$

将波函数(4)式代入薛定谔方程(3)式,可以得到两个微分方程,即

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}), \tag{5}$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}f(t)=Ef(t). \tag{6}$$

可以看出,(5)式是波函数空间部分所满足的偏微分方程,称为定态薛定谔方程,而(6)式是波函数的时间部分所满足的常微分方程. (5)(6)式与(3)式相比,变量的个数减少了,尤其是(6)式变成了一个变量的常微分方程,也很容易求得,即 $f(t)=Ce^{-iEt/\hbar}$. 这样要想知道描述微观体系状态的波函数,实际上只需要求解定态薛定谔方程就可以了,使问题得以简化.

2.2 算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态

在求解算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态时,量子力学教材中一般是采用球坐标(r,θ,φ)来处理,此时算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征方程可以表示成

$$\hat{L}^2\psi(\theta,\varphi) = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\psi(\theta,\varphi) = \lambda\hbar^2\psi(\theta,\varphi), \tag{7}$$

$$\hat{L}_z\psi(\theta,\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(\theta,\varphi) = m\hbar\psi(\theta,\varphi). \tag{8}$$

这两个方程表面看起来很复杂,但由于算符 $\hat{L}_z$ 仅仅是变量 φ 的函数,与变量 θ 无关,并且算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 相互对易,因此可以采用分离变量法,将算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态 $\psi(\theta,\varphi)$ 分解成

$$\psi(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)f(\varphi),$$

则(7)(8)式可以写成

$$-\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\right)+\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right\}\Theta(\theta) = \lambda\hbar^2\Theta(\theta), \tag{9}$$

$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}f(\varphi) = m\hbar f(\varphi). \tag{10}$$

显然(9)(10)式都是常微分方程,这样就使问题得到了简化.

2.3 氢原子体系

氢原子中电子和原子核之间的相互作用势是有心力场,因此采用球坐标处理比较方便.由于原子核的质量远远大于电子的质量,若假定原子核不动,用 r 表示电子到原子核的距离,则体系的哈密顿量形式是

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e}-\frac{e_s^2}{r} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m_e}+\frac{\hat{L}^2}{2m_er^2}-\frac{e_s^2}{r}, \tag{11}$$

其中 $e_s^2 = e^2/4\pi\varepsilon_0$.等号右边第一项称为径向动能,它仅仅是变量 r 的函数,与方位角 (θ,φ) 无关;第二项称为转动动能,角动量平方算符仅仅是方位角 (θ,φ) 的函数,而与径向变量 r 无关;第三项是相互作用势能,它也仅仅是变量 r 的函数,与方位角 (θ,φ) 无关;其中径向动量的定义[2]是

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{\vec{r}}}{r}\hat{\vec{p}}+\hat{\vec{p}}\frac{\hat{\vec{r}}}{r}\right) = -i\hbar\left(\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right), \tag{12}$$

并且算符 $\hat{H}$ 和 $\hat{L}^2$ 是相互对易的,因此可以采用分离变量法,将相应的波函数写成径向部分和角度部分的乘积形式,即

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Omega(\theta,\varphi), \tag{13}$$

这样定态薛定谔方程

$$\hat{H}\psi(r,\theta,\varphi) = \left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m_e}+\frac{\hat{L}^2}{2m_er^2}-\frac{e_s^2}{r}\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \tag{14}$$

就可以分解成两个微分方程,即

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m_e}+\frac{\lambda\hbar^2}{2m_er^2}-\frac{e_s^2}{r}\right]R(r) = ER(r), \tag{15}$$

$$\hat{L}^2\Omega(\theta,\varphi) = \lambda\hbar^2\Omega(\theta,\varphi). \tag{16}$$

其中,(16)式所对应的角度部分已经在(7)式中求得,这样一来问题就简化为求解径向部分函数所满足的常微分方程(15)式了,问题即可大大简化.

本质上,由电子和原子核组成的氢原子体系是一个两体问题.体系的定态薛定谔方程是

$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}_e^2}{2m_e}+\frac{\hat{\vec{p}}_p^2}{2m_p}-\frac{e_s^2}{|\vec{r}_e-\vec{r}_p|}\right]\psi(\vec{r}_e,\vec{r}_p) = E\psi(\vec{r}_e,\vec{r}_p), \tag{17}$$

其中,m_e,$\vec{r}_e$ 和 $\vec{p}_e$ 分别是电子的质量、坐标和动量,m_p,$\vec{r}_p$ 和 $\vec{p}_p$ 分别是原子核的质量、坐标和动量,这是一个含有六个变量的偏微分方程.

若定义质心坐标 $\vec{r}_c$ 和电子相对原子核运动的相对坐标 $\vec{r}$ 为

$$\vec{r}_c = m_e\vec{r}_e+m_p\vec{r}_p, \quad \vec{r} = \vec{r}_e-\vec{r}_p, \tag{18}$$

则(17)式可以改写成

$$(\hat{H}_c+\hat{H})\psi(\vec{r}_c,\vec{r}) = \left[\frac{\hat{\vec{p}}_c^2}{2m}+\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu}-\frac{e_s^2}{r}\right]\psi(\vec{r}_c,\vec{r}) = E\psi(\vec{r}_c,\vec{r}), \tag{19}$$

其中 $\hat{H}_c$ 描述质心运动的动能,$\hat{H}$ 是描述电子和核之间相对运动的哈密顿,μ 是约化质量,m 是质心的质

量,它们的表示形式为

$$\hat{H}_c = \frac{\hat{\vec{p}}_c^2}{2m},\ \hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} - \frac{e_s^2}{r},\ \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p},\ m = m_e + m_p. \tag{20}$$

显然 $\hat{H}_c$ 和 $\hat{H}$ 是相互对易的,可以采用分离变量法,将体系的波函数分解成质心运动部分和相对质心运动部分函数的乘积形式,即

$$\psi(\vec{r}_c, \vec{r}) = \Phi(\vec{r}_c)\psi(\vec{r}). \tag{21}$$

相应地,体系所满足的微分方程(19)式可以写成

$$\hat{H}_c\Phi(\vec{r}_c) = \frac{\hat{\vec{p}}_c^2}{2m}\Phi(\vec{r}_c) = E_c\Phi(\vec{r}_c), \tag{22}$$

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} - \frac{e_s^2}{r}\right]\psi(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r}), \tag{23}$$

$$E = E_c + E_r. \tag{24}$$

这样(17)式或者(19)式原来是六个变量的偏微分方程就变成两个偏微分方程(22)和(23)式,而它们只是三个变量的偏微分方程,其中(22)式对应的是质心运动,相应的波函数 $\Phi(\vec{r}_c)$ 是一个平面波形式的解,而(23)式在之前的(14)式中已经给出,这样就使问题得以求解.

对于动量算符的本征方程、氦原子体系、包含电子自旋的波函数、全同粒子体系等问题,都可以做相似的分析.

可以看出,在量子力学中,使用分离变量法时,通常要求相关的算符之间是相互对易的,这样与之对应的变量是相互独立的,此时可以使用分离变量法将波函数写成几个不同变量的函数的乘积形式,进而将原来多个变量的偏微分方程化成几个偏微分方程或者常微分方程,从而使问题得到简化,甚至解决.

3　结束语

应用分离变量法来求解问题的情形贯穿于量子力学的始终,由此可以看出这种方法在量子力学教学和学习过程中的重要性,因此教师在教学的过程中要让学生熟练地掌握和应用分离变量法.

这种方法也可以使物理学专业的本科生在日常学习和生活中形成一种理科生所特有的解决问题的思维方式,即将复杂问题进行化简和分解,逐个解决,在学习和解决问题的过程中获得成就感,有利于培养学生的学习兴趣,增强学生解决问题的自信心.

参　考　文　献

[1]　周世勋,陈灏. 量子力学基础[M]. 2 版. 北京: 高等教育出版社,2009.
[2]　曾谨言. 量子力学导论[M]. 北京:北京大学出版社,1998.
[3]　胡嗣柱,倪光炯. 数学物理方法[M] . 2 版. 北京:高等教育出版社,2002.
[4]　管平,计国君,黄骏. 数学物理方法[M]. 北京:高等教育出版社,2001.
[5]　宋林森,王军涛. 正确求解变量分离微分方程[J]. 河南科技学院学报:自然科学版,2008(4):114 - 115.
[6]　贾庆菊. 可化为变量分离型的微分方程及其通积分[J]. 中央民族大学学报:自然科学版,2011,20(4):28 - 32.

Application of separation of variables in quantum mechanics

SUN Jun-feng[1], YANG Yue-ling[1], HUANG Jin-shu[2]
(1. *College of Physics and Electronic Engineering*, *Henan Normal University*, *Xinxiang* 453007, *China*;
2. *School of Physics and Electronic Engineering*, *Nanyang Normal University*, *Nanyang* 473061, *China*)

Abstract: Separation of variables is a very important and commonly used method in quantum mechanics. In this paper, the properties of separation of variables and its application in quantum mechanics were studied in order to further understand the methods of mathematical physics in quantum mechanics.

Key words: quantum mechanics; separation of variables; commutation relation