关于微扰理论的薛定谔级数项的诠释

［苏］ P. X. Сабиров

量子力学的大多数课题归结为相当复杂的方程，而精确地解这些方程是不可能的. 因此在解方程时，采用了各种近似方法. 当在所解问题里含有小量时，计算中通常应用微扰理论的各种作法[1]、[2]. 一般都很熟悉薛定谔表述的微扰理论，这一理论经常用于实际问题的解决上[3]. 但在运算中，往往不得不去计算系统的能量和波函数相应级数项之终值. 既然分析这些级数的收敛性是困难的，在上面提到的级数中，其序次小项族意义的数学诠释问题无疑是令人感兴趣的.

为了解决所面临的问题，本文提出了一种建立薛定谔微扰理论的处理方法，它与一般文献里所叙述的不同.

解薛定谔方程

$$(\hat{H}_0+\hat{V})\Phi=E\Phi \tag{1}$$

其中 $\hat{V}$ 表示对无微扰哈密顿算符 $\hat{H}_0$ 的微扰算符. 假定 $\hat{H}_0$ 的本征函数 $|n\rangle$ 和本征值 ε_n 已知. 将待求的波函数 Φ 按本征函数 $|n\rangle$ 展开：

$$\Phi=\sum_n C_n|n\rangle \tag{2}$$

并将(2)式代入方程(1)，经变换后便能得到(3)式

$$(E-\varepsilon_n)C_n=\sum_m V_{nm}C_m \tag{3}$$

式中 $V_{nm}=\langle n|V|m\rangle$，是用无微扰本征函数确定的微扰算符矩阵元.

关系式 (3) 是在计算由于微扰而产生修正时的出发点.

为此，在方程 (3) 里把系数 C_n 和能量 E 换写成级数形式：

$$C_n=C_n^{(0)}+C_n^{(1)}+C_n^{(2)}+\cdots,\ E=\varepsilon+E^{(1)}+E^{(2)}+\cdots, \tag{4}$$

式中的 $C_n^{(k)}$、$E^{(k)}$ 是由于微扰而引起的 k 级小量. 随后比较同一级小量项.

对于我们所讨论的问题，可以较方便地把表达式(3)改写成稍许不同的另一种形式. 将(3)式两边乘上 C_n^*，并对 n 求和. 考虑到波函数的归一化条件，所以有

$$E=\sum_n C_n^*C_n\varepsilon_n+\sum_{n,m}C_n^*C_mV_{n、m} \tag{5}$$

应指出，这一关系式与关系式 $E=\langle\Phi|H_0+V|\Phi\rangle$ 两者完全等价. 由(4)式和(5)式直接得到

$$\varepsilon=\sum_n C_n^{(0)*}C_n^{(0)}\varepsilon_n$$

$$E^{(1)}=\sum_n(C_n^{(0)*}C_n^{(1)}+C_n^{(0)}C_n^{(1)*})\varepsilon_n+\sum_{n,m}C_n^{(0)*}C_m^{(0)}V_{nm}$$

$$E^{(2)}=\sum_n(C_n^{(0)*}C_n^{(2)}+C_n^{(1)*}C_n^{(1)}+C_n^{(2)*}C_n^{(0)})\varepsilon_n+\sum_{n,m}(C_n^{(0)*}C_m^{(1)}+C_n^{(1)*}C_m^{(0)})V_{nm} \tag{6}$$

$$E^{(3)}=\sum_n(C_n^{(0)*}C_n^{(3)}+C_n^{(1)*}C_n^{(2)}+C_n^{(2)*}C_n^{(1)}+C_n^{(3)*}C_n^{(0)})\varepsilon_n+\sum_{n,m}(C_n^{(0)*}C_m^{(2)}+C_n^{(1)*}C_m^{(1)}+C_n^{(2)*}C_m^{(0)})V_{nm}$$

我们求第 k 个状态的修正. 据此，假定 $C_n^{(0)}=\delta_{nk}$. 式中 δ_{nk} 是克朗内克符号. 那么，由(6)式和 Φ 的归一化条件

$$\sum_n C_n^*C_n=1+C_k^{(1)}+C_k^{(1)*}+C_k^{(2)}+C_k^{(2)*}+\sum_n C_n^{(1)*}C_n^{(1)}+C_k^{(3)}+C_k^{(3)*}+\sum_n(C_n^{(1)*}C_n^{(2)}+C_n^{(2)*}C_n^{(1)})+\cdots=1 \tag{7}$$

有 $\varepsilon=\varepsilon_k \quad E^{(1)}=V_{kk}$

$$E^{(2)}=\sum_n C_n^{(1)*}C_n^{(1)}(\varepsilon_n-\varepsilon_k)+\sum_n(C_n^{(1)}V_{kn}+C_n^{(1)*}V_{nk})$$

$$E^{(3)}=\sum_n(C_n^{(1)*}C_n^{(2)}+C_n^{(2)*}C_n^{(1)})(\varepsilon_n-\varepsilon_k)+\sum_n(C_n^{(2)}V_{kn}+C_n^{(2)*}V_{nk})+\sum_{n,m}C_n^{(1)*}C_m^{(1)}V_{nm} \tag{8}$$

$$E^{(4)}=\sum_n(C_n^{(1)*}C_n^{(3)}+C_n^{(2)*}C_n^{(2)}+C_n^{(3)*}C_n^{(1)})\times(\varepsilon_n-\varepsilon_k)+\sum_n(C_n^{(3)}V_{kn}+C_n^{(3)*}V_{nk})+\sum_{n,m}(C_n^{(1)*}C_m^{(2)}+C_n^{(2)*}C_m^{(1)})V_{nm}$$

为了确定系数 $C_n^{(1)}$，我们应用变分原理，同时把它们看作变量. 求表达式 $E^{(2)}$ 的极值，便得到

$$C_n^{(1)}=\frac{V_{nk}}{\varepsilon_k-\varepsilon_n}\ (k\neq n) \tag{9}$$

(量 $C_k^{(1)}$ 不确定，但 $C_k^{(1)}+C_k^{(1)*}=0$) 因此，能量的二级

修正为

$$E^{(2)}=\sum_{n(\neq k)}\frac{V_{kn}V_{nk}}{\varepsilon_k-\varepsilon_n} \tag{10}$$

考虑到(9)式和归一化条件(7)，$E^{(3)}$的表达式可写成

$$E^{(3)}=-V_{kk}\sum_{n(\neq k)}\frac{V_{kn}V_{nk}}{(\varepsilon_k-\varepsilon_n)^2}+\sum_{n,m(\neq k)}\frac{V_{kn}V_{nm}V_{mk}}{(\varepsilon_k-\varepsilon_m)(\varepsilon_k-\varepsilon_n)} \tag{11}$$

我们要强调指出，用该种处理方法，修正值 $E^{(3)}$仅取决于系数 $C_n^{(1)}$，而不是象用通常方法那样取决于 $C_n^{(2)}$[3]. 这个结果是 Dalgarno 和 Stewart 定理的结果[4]。该定理主要内容是：如果波函数精确地已知到 n 级，则能估算出能量到$(2n+1)$级。对于更高级修正也有类似的情形。例如，考虑到(7)式和(9)式，$E^{(4)}$可写成：

$$\begin{aligned}E^{(4)}=&\sum_{n(\neq k)}C_n^{(2)*}C_n^{(2)}(\varepsilon_n-\varepsilon_k)\\&-V_{kk}\sum_{n(\neq k)}(C_n^{(1)*}C_n^{(2)}+C_n^{(2)*}C_n^{(1)})\\&+\sum_{n,m(\neq k)}(C_m^{(1)}C_n^{(2)*}V_{nm}+C_m^{(1)*}C_n^{(2)}V_{mn})\\&-\Big(\sum_{n(\neq k)}C_n^{(1)*}C_n^{(1)}\Big)\sum_{n(\neq k)}C_n^{(1)}V_{kn}\end{aligned} \tag{12}$$

求极值时，我们便得到系数 $C_n^{(2)}$

$$C_n^{(2)}=C_n^{(1)}\frac{V_{kk}}{\varepsilon_n-\varepsilon_k}-\sum_{m(\neq k)}C_m^{(1)}\frac{V_{nm}}{\varepsilon_n-\varepsilon_k}\quad(n\neq k) \tag{13}$$

将(9)式和(13)式代入(12)式，便得到同薛定谔结果相符的 $E^{(4)}$的最终表达式。如果利用归一化条件(7)，便能够确定系数 $C_k^{(2)}$。

由此可见，根据新的方法可得出下列结论：当系统的波函数 Φ 按无微扰波函数分解时，在薛定谔理论范围里，决定其分解特点的系数 $C_n^{(l)}(l=1,2,3,\cdots)$相应地由如下条件确定

$$\frac{\partial E^{(2)}}{\partial C_n^{(1)}}=0,\frac{\partial E^{(4)}}{\partial C_n^{(2)}}=0,\cdots,\frac{\partial E^{(2l)}}{\partial C_n^{l}}=0,\cdots \tag{14}$$

由(14)式直接得到，在薛定谔近似里，偶数级能量的修正达到自己的极值。为建立微扰理论体系所提出的新的处理方法，可以认为是证明 Dalgarno 和 Stewart 定理的可能方法之一。

参 考 文 献

[1] К. Кумар, Теория возмущений И Пробиема мнотих Тел Для атомного Ядра. М. Мир 294. С. 1964

[2] Н. Мотт, И. Снеддон, Волная Механика И её применения. М. Наука, 427. С. 1966

[3] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифщиц, Квантовая механика, Нерелятивисткая Теория. М. Наука, 752 С. 1974

[4] A. Dalgarno, L. Stewart, *Proc. Roy, Soc, A* 238, 269, 1956

河北矿冶学院　丛选忠(译)　司殿朔(校)

译自[苏]高等学校通报《Физика》1982年第2期

编者按：在 1985 年第 2 期发表《矢量场的旋度处处为零一定是保守场吗》一文后，本刊陆续收到一忠实读者、北京师范大学田晓岑、浙江丝绸工学院田中一等读者来函或来稿，对该文提出不同意见，限于篇幅，难以一一刊载，现将一忠实读者来函发表如后。

编辑部：

《大学物理》1985 年第 2 期所载“矢量场的旋度处处为零一定是保守场吗”一文认为，无限细无穷长的直导线的磁场“旋度处处为零”，在载流导线上“对磁场来说是奇点，但它的旋度依然为零”(见封三式⑤下面的话)。以上提法是不妥的，实际上该处的旋度是无穷大，而不是零。故而该文的结论应修改为“在单连通区域内，我们判断一个矢量场是否为保守场，既可根据在任意选择闭合路径情况下，它沿闭合路线积分是否恒为零值来确定，又可由它的旋度是否处处为零来判断”。实际上两者是等价的。值得注意的倒是计算奇点处的旋度时要格外小心，不可从奇点以外的地方处处为零推断出奇点处也为零。在该处旋度往往呈 δ 函数形式，它的值是不能从周围连续过渡的。

一忠实读者

三月八日