一、 实例一

推导:

$$\frac{\int d^3pe^{-\beta p^2/2m+i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{\int d^3pe^{-\beta p^2/2m}}=e^{-\pi r^2/\lambda^2} \tag{1}$$

其中 $r=|\vec{r}|$ 且 $\lambda=\sqrt{2\pi\hbar^2/mkT}$, 为了保证后面推导过程中的简洁, 我们定义

$$\gamma^2=\frac{\beta}{2m},\quad \vec{R}=\frac{\vec{r}}{\hbar} \tag{2}$$

于是需要做的积分转化成

$$\frac{\int d^3pe^{-\gamma^2p^2+i\vec{p}\cdot\vec{R}}}{\int d^3pe^{-\gamma^2p^2}} \tag{3}$$

(一) 分母部分的积分——Γ 函数的应用

由 Γ 函数的表达式

$$\Gamma(x)=2\int_0^{+\infty}t^{2x-1}e^{-t^2}dt \tag{4}$$

令 $t=\gamma\eta$, 则有 $\gamma d\eta=dt$, 于是

$$\Gamma(x)=2\int_0^{+\infty}(\gamma\eta)^{2x-1}e^{-\gamma^2\eta^2}\gamma d\eta \tag{5}$$

令 $t=3/2$, 得到

$$\begin{aligned}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)&=2\int_0^{+\infty}\gamma^3\eta^2e^{-\gamma^2\eta^2}d\eta\\&=2\gamma^3\int_0^{+\infty}\eta^2e^{-\gamma^2\eta^2}d\eta\end{aligned} \tag{6}$$

故

$$\begin{aligned}\int d^3p\exp\left(-\gamma^2p^2\right)&=4\pi\int_0^{+\infty}p^2\exp\left(-\gamma^2p^2\right)dp\\&=4\pi\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{2\gamma^3}\end{aligned} \tag{7}$$

其中

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)=\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{\sqrt{\pi}}{2} \tag{8}$$

（二） 分子部分——换元、配方与延拓

首先先利用球坐标系进行初步的运算:

$$\begin{aligned}\int d^3pe^{-\gamma^2p^2+i\vec{p}\cdot\vec{R}} &= \int_0^{+\infty} p^2dp\exp\left(-\gamma^2p^2\right)\int_0^{2\pi}d\theta\int_0^{+\pi}sin\varphi d\varphi\exp\left(ipRcos\varphi\right)\\ &= 2\pi\int_0^{+\infty} p^2dp\exp\left(-\gamma^2p^2\right)\int_0^{+\pi}d\left(-cos\varphi\right)\exp\left(ipRcos\varphi\right)\\ &= 2\pi\int_0^{+\infty} p^2dp\exp\left(-\gamma^2p^2\right)\int_{-1}^{1}dt\exp\left(ipRt\right)\\ &= 2\pi\int_0^{+\infty} p^2dp\exp\left(-\gamma^2p^2\right)\frac{1}{ipR}\left[\exp\left(ipR\right)-\exp\left(-ipR\right)\right]\end{aligned} \tag{9}$$

利用欧拉公式有

$$sin\varphi = \frac{1}{2i}\left[\exp\left(i\varphi\right)-\exp\left(-i\varphi\right)\right] \tag{10}$$

于是上面的式子化为:

$$\begin{aligned}&\frac{4\pi}{R}\int_0^{+\infty}p\sin(pR)\exp\left(-\gamma^2p^2\right)dp\\ =&\frac{2\pi}{R}\int_{-\infty}^{+\infty}p\sin(pR)exp\left(-\gamma^2p^2\right)dp.\\ =&\operatorname{Im}\left[\frac{2\pi}{R}\int_{-\infty}^{+\infty}p\exp\left(-\gamma^2p^2+ipR\right)dp\right].\end{aligned} \tag{11}$$

上面的运算中第一步进行了偶延拓, 为了后面配方换元后积分上下限仍是 0 或 $\pm infty$, 这一步代换是必要的。而第二步则利用了欧拉公式

$$\exp\left(i\varphi\right) = cos\varphi + isin\varphi \tag{12}$$

因此对于含有 sin 型函数的积分可以化为对于 e 指数型函数积分再取虚部, 这是较为实用的技巧。因此上面的积分部分:

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty}p\exp\left(-\gamma^2p^2+ipR\right)dp\\ =&\int_{-\infty}^{+\infty}p\exp\left\{-\gamma^2\left[p^2-\frac{iR}{\gamma^2}p+\left(\frac{iR}{2\gamma^2}\right)^2-\left(\frac{iR}{2\gamma^2}\right)^2\right]\right\}\\ =&\exp\left[\left(\frac{iR}{2\gamma^2}\right)^2\gamma^2\right]\int_{-\infty}^{+\infty}p\exp\left[-\gamma^2\left(p-\frac{iR}{2\gamma^2}\right)^2\right]dp\end{aligned} \tag{13}$$

取 $p' = p - iR/2\gamma^2$, 有

$$\exp\left[\left(\frac{iR}{2\gamma^2}\right)^2\gamma^2\right]\int_{-\infty}^{+\infty}\left(p'+\frac{iR}{2\gamma^2}\right)\exp\left(-\gamma^2{p'}^2\right)dp' \tag{14}$$

由于奇函数在该区域积分为 0, 故

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Im}\left[\frac{2\pi}{R}\int_{-\infty}^{+\infty} p\exp\left(-\gamma^2p^2+ipR\right)dp\right].\\
=&\frac{2\pi}{R}\exp\left[\left(\frac{iR}{2\gamma^2}\right)^2\gamma^2\right]\frac{R}{2\gamma^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\gamma^2p'^2\right)dp'
\end{aligned}
\tag{15}
$$

令 $q=\gamma p'$, 有 $dp'=dq/\gamma$。于是

$$
\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\gamma^2p'^2\right)dp=\frac{1}{\gamma}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-q^2\right)dq=\frac{\sqrt{\pi}}{\gamma}
\tag{16}
$$

(三) 计算最终结果

综上, 有

$$
\begin{aligned}
&\frac{\int d^3pe^{-\gamma^2p^2+i\vec{p}\cdot\vec{R}}}{\int d^3pe^{-\gamma^2p^2}}\\
=&\frac{\frac{2\pi}{R}\cdot\frac{R}{2\gamma^2}\exp\left[-\frac{R^2}{4\gamma^2}\right]\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{\gamma}}{4\pi\cdot\frac{\frac{\sqrt{\pi}}{2}}{2\gamma^3}}\\
=&\frac{\frac{\sqrt{\pi}}{2\gamma^3}\exp\left(-\frac{R^2}{4\gamma^2}\right)}{\frac{\sqrt{\pi}}{2\gamma^3}}\\
=&\exp\left(-\frac{R^2}{4\gamma^2}\right)\\
=&\exp\left(-\frac{r^2}{\hbar^2}\frac{1}{4\cdot\frac{\beta}{2m}}\right).\\
=&\exp\left(-\frac{\pi r^2}{2\pi\hbar^2/mkT}\right)= \quad \exp\left(-\frac{\pi r^2}{\lambda^2}\right)
\end{aligned}
\tag{17}
$$