16-1

2023年12月22日 21:39

CH 16 近似方法

大多数实际问题无法精确求解，需要用到近似方法

§16.1 变分法

变分法的主要应用是用来求解束缚态基态能量. 基本思想如下

设 $\hat{H}$ 的本征能量为 E_n $(n=0,1,2\cdots)$，其中基态能量为 E_0，

$\forall$ 态矢 $|\psi\rangle \equiv \sum_{n=0}^{+\infty} C_n |E_n\rangle$，设 $|E_n\rangle$ 为归一化本征态

$$\langle E\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\sum_{i,j=0}^{+\infty} C_i^* C_j \langle E_i|\hat{H}|E_j\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$= \frac{\sum_{i,j=0}^{+\infty} C_i^* C_j E_j \delta_{ij}}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\sum_{i=0}^{+\infty} |C_i|^2 E_i}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$\geq E_0 \frac{\sum_{i=0}^{+\infty} |C_i|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = E_0$$

理论上，我们可以穷举所有 $|\psi\rangle$，找到最小的 $\langle E\rangle$，即为基态能量 E_0

实际上 我们可以根据对波函数的物理图像，猜出一个波函数的参数形式，然后再对参数求导找 $\langle E\rangle$ 的最小值.

Ex 16.1 用变分法估计一维问题 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \lambda x^4$ $(\lambda>0)$ 的基态能量.

解: 回忆一维谐振子，基态波函数为高斯波包

猜测本题中基态波函数也有高斯波包形式

$$\langle x|\psi\rangle = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \qquad \alpha>0$$

16-2

2023年12月22日　22:11

$$\Rightarrow \langle E\rangle = \frac{\langle\psi|\frac{\hat{p}^2}{2m}+\lambda x^4|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\left[\frac{(-i\hbar)^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\lambda x^4\right]\psi(x)$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\left[\frac{(-i\hbar)^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\, e^{-\alpha x^2/2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{-\alpha x^2/2}\right.$$

$$\left. +\lambda\int_{-\infty}^{+\infty}dx\, x^4 e^{-\alpha x^2}\right]$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{1}{2}\sqrt{\alpha\pi}\right)+\lambda\frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^{5/2}}\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m}\alpha + \frac{3\lambda}{4\alpha^2}$$

α增加，粒子有更大概率分布在x~0处，势能减小.

α增加，高斯波包越窄，动能项越大

$$\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\alpha}=0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{4m}-\frac{3\lambda}{2\alpha^3}=0 \Rightarrow \alpha=\left(\frac{6m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3}$$

对应的最低能量为

$$\langle E\rangle = \left(\frac{6m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left[\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{3\lambda}{4}\frac{\hbar^2}{6m\lambda}\right]$$

$$= \left(\frac{6m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3}\frac{3\hbar^2}{8m}$$

//

- 变分法的难点：利用所有信息猜出合适的波函数
- 缺点：难以估计误差，只能不断改进波函数的形式.

  实际操作上常表现为：若多加一个参数后 $\langle E\rangle$ 不显著改变，则认为 $\langle E\rangle$ 已经很靠近基态能量 E_0
- 优点：简单！

  若 $|\psi\rangle$ 和基态波函数 $|\psi_0\rangle$ 的差为小量，则 $\langle E\rangle$ 与 E_0 的差别为二阶小量.(见 Ex 16.2)

16-3

2023年12月23日 10:20

Ex16.2 设猜测的态矢为$|\psi\rangle$，基态的态矢为$|E_0\rangle$，定义两者的差

$$|\delta\psi\rangle = |\psi\rangle - |E_0\rangle$$

因为$|\delta\psi\rangle$也是Hilbert空间中的态矢，所以$|\delta\psi\rangle$也可以用$|E_n\rangle$展开

$$|\delta\psi\rangle = \alpha|E_0\rangle + |\delta\psi_\perp\rangle$$

其中$|\delta\psi_\perp\rangle$为$|\delta\psi\rangle$中垂直于$|E_0\rangle$的分量.

计算$\langle E\rangle$和E_0的差别

解: $$\langle E\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

$$= \frac{(\langle E_0| + \alpha\langle E_0| + \langle\delta\psi_\perp|)\hat{H}(|E_0\rangle + \alpha|E_0\rangle + |\delta\psi_\perp\rangle)}{(\langle E_0| + \alpha\langle E_0| + \langle\delta\psi_\perp|)(|E_0\rangle + \alpha|E_0\rangle + |\delta\psi_\perp\rangle)}$$

$$= \frac{(1+\alpha)^2E_0 + \langle\delta\psi_\perp|\hat{H}|\delta\psi_\perp\rangle}{(1+\alpha)^2 + \langle\delta\psi_\perp|\delta\psi_\perp\rangle}$$

若$|\psi\rangle$足够接近$|E_0\rangle$，$|\delta\psi_\perp\rangle$即为小量

$$\approx \frac{1}{(1+\alpha)^2}\left[(1+\alpha)^2E_0 + \langle\delta\psi_\perp|\hat{H}|\delta\psi_\perp\rangle\right]\left[1 - \frac{1}{(1+\alpha)^2}\langle\delta\psi_\perp|\delta\psi_\perp\rangle\right]$$

$$= E_0 + \frac{1}{(1+\alpha)^2}\langle\delta\psi_\perp|\hat{H}|\delta\psi_\perp\rangle - \frac{1}{(1+\alpha)^4}\langle\delta\psi_\perp|\delta\psi_\perp\rangle + O\left((\delta\psi_\perp)^4\right)$$

所以$\langle E\rangle - E_0$正比于$\langle\delta\psi_\perp|\delta\psi_\perp\rangle$，为二阶小量.

另一个发现是$|\psi\rangle$在$|E_0\rangle$上的分量α对估计E_0的值不造成误差. //

16-4

2023年12月23日 10:36

Ex 16.3 对于He原子，其外层有两个电子，取He原子核质量为 ∞，只考虑 Coulomb 相互作用，有

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_1^2}{2M}+\frac{\hat{p}_2^2}{2M}-\frac{2e^2}{|\hat{r}_1|}-\frac{2e^2}{|\hat{r}_2|}+\frac{e^2}{|\hat{r}_1-\hat{r}_2|}$$

用变分法估计基态能量.

解: Hilbert 空间为 $V_{1,xyz}\otimes V_{2,xyz}$

由氢原子基态波函数，猜测双电子坐标空间波函数为

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\psi_{100}(\vec{r}_1)\,\psi_{100}(\vec{r}_2)$$

其中 $\psi_{100}(\vec{r})$ = 氢原子基态波函数并将 $e^2\to 2e^2$)

$$\psi_{100}(\vec{r})=\left(\frac{8}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}e^{-2r/a_0}$$

其中 $a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$ 为 Bohr 半径.

则 $$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\left(\frac{8}{\pi a_0^3}\right)e^{-2(r_1+r_2)/a_0}$$

由于 ψ 已经归一化

$$\langle E\rangle=\left(\frac{8}{\pi a_0^3}\right)^2\int d^3r_1\,d^3r_2\,e^{-2(r_1+r_2)/a_0}$$

$$*\left\{\frac{\hat{\vec{p}}_1^2}{2m}-\frac{2e^2}{r_1}+\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\right\}e^{-2(r_1+r_2)/a_0}$$

$$=\underbrace{\left(\frac{\hat{\vec{p}}_1^2}{2m}-\frac{2e^2}{r_1}\right)e^{-2r_1/a_0}}_{=E_{100}e^{-2r_1/a_0}}*e^{-2r_2/a_0}$$

$$+\underbrace{\left(\frac{\hat{\vec{p}}_2^2}{2m}-\frac{2e^2}{r_2}\right)e^{-2r_2/a_0}}_{=E_{100}e^{-2r_2/a_0}}*e^{-2r_1/a_0}$$

$$+\cancel{\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}e^{-2(r_1+r_2)/a_0}}$$

暂时先忽略

其中 $E_{100}=-\frac{me^4*4}{2\hbar^2}$

$$\simeq\left(\frac{8}{\pi a_0^3}\right)(2E_{100})\int d^3r_1\,e^{-4r_1/a_0}*\int d^3r_2\,e^{-4r_2/a_0}$$

$$=2E_{100}=-\frac{4me^4}{\hbar^2}$$

16-5

2023年12月23日 11:53

代入数字 $\langle E\rangle = 2 * Z^2 * (-13.6\,eV)$

$$= -108.8\,eV$$

实验值 $E_{exp} = -78.6\,eV$

前面说过 $\langle E\rangle \geq E_0$，现在 $\langle E\rangle < E_{exp}$，说明不是 $|\psi\rangle$ 选的不好，而是 $\hat{H}$ 中有重要的贡献没考虑

在上面的推导中，我们忽略了两个电子相互作用项 $\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$

因为这一项大于0，包含这一项有可能使 $\langle E\rangle > E_{exp}$。但直接考虑这一项很困难，所以我们近似认为电子之间相互作用主要表现在一个电子会对核电荷有屏蔽作用，导致另一个电子感受到的核电荷 Z 小于2.

所以我们将波函数改为

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right) e^{-Zr_1/a_0} e^{-Zr_2/a_0}$$

哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_2}$$

类似可得

$$\langle E\rangle = -2\left(4Z - Z^2 - \frac{5}{8}Z\right)\frac{me^4}{2\hbar^2} \quad \text{——} (*)$$

$$\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial Z} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\left(4 - 2Z - \frac{5}{8}\right) = 0 \quad \Rightarrow Z = \frac{27}{16} < 2$$

说明电子屏蔽了 $\frac{5}{16}e$ 的核电荷

代入 $(*)$ 可得

$$\langle E\rangle = -2\underbrace{\frac{me^4}{2\hbar^2}}_{13.6\,eV}\left(\frac{27}{8} * \frac{27}{16} - \left(\frac{27}{16}\right)^2\right) = -77.5\,eV \quad \text{略高于实验值}$$

思考 每个电子是否真的屏蔽了 $\frac{5}{16}e$ 的核电荷，说明了什么？

16-6

2023年12月23日 21:35

§16.2 非简并微扰论

- 微扰思想是物理学最重要的思想之一
- 微扰论应用的场景为：只有主要因素时可以比较简单的求解
  但考虑次要因素时系统变的非常复杂
  从而不能简单解出
- 微扰论在不同场景中有不同的数学上的表现形式.
- 在量子力学中，一般考虑 $\hat{H}$ 的微扰，即

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$$

其中 $\hat{H}_0$ 的贡献 $\gg$ $\hat{H}_1$ 的贡献. $\hat{H}_0$ 的本征态很容易求出，
$\hat{H}$ 的本征态不容易直接解出

- 微扰论
  - 不含时微扰论（$\hat{H}_1$ 不含时间 t）
    - 非简并微扰论（$\hat{H}_0$ 本征态无简并）
    - 简并微扰论（$\hat{H}_0$ 本征态存在简并）（17章）
  - 含时微扰论（$\hat{H}_1$ 含时间 t）（18章，略）

- 下面推导非简并微扰论的理论框架

Ex 16.4 设 $\hat{H}_0$ 的归一化本征态为 $|n\rangle_0$ $(n=1,2,3\dots)$

$$\hat{H}_0|n\rangle_0=E_{n,0}|n\rangle_0$$

$|n\rangle_0$ 和 $E_{n,0}$ 可以解出.

设 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$ 的归一化本征态为 $|n\rangle$ $(n=1,2,3\dots)$

$$\hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle$$

$|n\rangle$ 和 E_n 不容易解出.

在 $\hat{H}_1\ll\hat{H}_0$ 的极限下，推导出 $|n\rangle$ 和 $|n\rangle_0$，E_n 和 $E_{n,0}$ 的关系.

16-7

2023年12月23日 22:28

解：· 考虑逐渐加入 $\hat{H}_1$，开始时只有 $\hat{H}_0$，其本征态为 $|n\rangle_0$。逐渐加入 $\hat{H}_1$，$\hat{H}$ 的本征态在 Hilbert 空间中从 $|n\rangle_0$ 逐渐转动到 $|n\rangle$，因为 $\hat{H}_1 \ll \hat{H}_0$，所以我们期待

$$|\psi\rangle = |n\rangle - |n\rangle_0$$

是个小矢量，可以将 $|\psi\rangle$ 用 $\hat{H}_0$ 的本征态 $\{|m\rangle_0 \mid m=1\dots\}$ 展开

$$|\psi\rangle = C_n |n\rangle_0 + \sum_{\substack{m=1\\ m\neq n}} C_m |m\rangle_0$$

这里我们将 $|n\rangle_0$ 上的分量和其他 $|m\rangle_0$ 上的分量分开写。"$|\psi\rangle$ 是个小矢量"表现为 C_n 和 C_m 都是比较小的数。

· $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

同上可知 E_n 和 $E_{n,0}$ 的差也应该是个小量。

· 因为 $\hat{H}_1$ 很小，所以我们期待 E_n 和 $|n\rangle$ 可以对 $\hat{H}_1$ 做 Taylor 展开。

$$E_n = \underset{0\text{阶}}{\underset{\uparrow}{E_{n,0}}} + \underset{1\text{阶}}{\underset{\uparrow}{E_{n,1}}} + \underset{2\text{阶}}{\underset{\uparrow}{E_{n,2}}} + \cdots$$

$$|n\rangle = \underset{0\text{阶}}{\underset{\uparrow}{|n\rangle_0}} + \underset{1\text{阶}}{\underset{\uparrow}{|n\rangle_1}} + \underset{2\text{阶}}{\underset{\uparrow}{|n\rangle_2}} + \cdots$$

由此可得微扰论的数学表示

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$\Rightarrow (\underset{0\text{阶}}{\underset{\uparrow}{\hat{H}_0}} + \underset{1\text{阶}}{\underset{\uparrow}{\hat{H}_1}})(|n\rangle_0 + |n\rangle_1 + |n\rangle_2 + \dots) = (E_{n,0} + E_{n,1} + E_{n,2} + \dots) * (|n\rangle_0 + |n\rangle_1 + |n\rangle_2 + \dots) \qquad (*1)$$

16-8

2023年12月24日 11:35

由此我们可以写出 0阶和 1阶方程

$$\left.\begin{aligned} &0\text{阶:} \quad \hat{H}_0 |n\rangle_0 = E_{n,0} |n\rangle_0 \\ &1\text{阶:} \quad \hat{H}_0 |n\rangle_1 + \hat{H}_1 |n\rangle_0 = E_{n,0} |n\rangle_1 + E_{n,1} |n\rangle_0 \end{aligned}\right\} (*2)$$

$\vdots$

一个简化的方法是引入一个辅助参数 λ，将(*1)式改写为

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1)(|n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2 + \cdots)$$

$$= (E_{n,0} + \lambda E_{n,1} + \lambda^2 E_{n,2} + \cdots)(|n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2 + \cdots)$$

这样只需找到 λ 的相同次幂的项即可

λ^0: $\hat{H}_0 |n\rangle_0 = E_{n,0} |n\rangle_0$

λ^1: $\hat{H}_0 |n\rangle_1 + \hat{H}_1 |n\rangle_0 = E_{n,0} |n\rangle_1 + E_{n,1} |n\rangle_0$

与(*2)相同. 用这种方法计算高阶更直接

- 0阶方程即为 $\hat{H}_0$ 的本征方程，按假设 $E_{n,0}$ 和 $|n\rangle_0$ 可以解出 $(n=1,2,\ldots)$
- 为了解 1阶方程，我们将 $|n\rangle_1$ 用 $\{|m\rangle_0 \mid m=1,2\ldots\}$ 为基进行展开

$$|n\rangle_1 = C_n |n\rangle_0 + \sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{+\infty} C_m |m\rangle_0 \quad \text{其中} C_n, C_m \text{待求} \quad \text{—— (*3)}$$

代入 1 阶方程，利用 $\hat{H}_0 |m\rangle_0 = E_{m,0} |m\rangle_0$

$$\cancel{C_n E_{n,0} |n\rangle_0} + \sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{+\infty} C_m E_{m,0} |m\rangle_0 + \hat{H}_1 |n\rangle_0$$

$$= E_{n,0} \Big(\cancel{C_n |n\rangle_0} + \sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{+\infty} C_m |m\rangle_0 \Big) + E_{n,1} |n\rangle_0$$

$$\Rightarrow \sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{+\infty} C_m (E_{n,0} - E_{m,0}) |m\rangle_0 = \hat{H}_1 |n\rangle_0 - E_{n,1} |n\rangle_0 \quad \text{—— (*4)}$$

用 $_0\langle k|$ 左乘(*4)，由无简并假设，先取 $_0\langle k| \neq {_0\langle n|}$

$$C_k(E_{n,0}-E_{k,0}) = {_0\langle k|\hat{H}_1|n\rangle_0}$$

$$\Rightarrow C_k = \frac{_0\langle k|\hat{H}_1|n\rangle_0}{E_{n,0}-E_{k,0}} \quad (k\neq n) \quad \text{——— } (*5a)$$

再取 $_0\langle k| = {_0\langle n|}$

$$\Rightarrow E_{n,1} = {_0\langle n|\hat{H}_1|n\rangle_0} \quad \text{——— } (*5b)$$

• 还需解(*3)中的 C_n，利用归一化关系 $\langle n|n\rangle = 1$

$$({_0\langle n|}+\lambda\,{_1\langle n|}+\lambda^2\,{_2\langle n|}+\dots)(|n\rangle_0+\lambda|n\rangle_1+\lambda^2|n\rangle_2+\dots)=1$$

0阶：$_0\langle n|n\rangle_0 = 1$ 按假设，自然成立

1阶：$_0\langle n|n\rangle_1 + {_1\langle n|n\rangle_0} = 0$

代入(*3)

$\Rightarrow C_n + C_n^* = 0 \Rightarrow C_n$ 为纯虚数，令 $C_n = i\alpha,\ \alpha\in\mathbb{R}$. ——— (*5c)

• 由(*5a)(*5c)可得

$$|n\rangle\big|_{0+1} = |n\rangle_0 + |n\rangle_1$$

$$= \underbrace{|n\rangle_0 + i\alpha|n\rangle_0}_{=|n\rangle_0 e^{i\alpha}+O(\alpha^2)} + \sum_{\substack{m=1\\ m\neq n}}^{+\infty} \frac{_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0}{E_{n,0}-E_{m,0}} |m\rangle_0$$

重新定义 $|n\rangle\big|_{0+1}$ 的相位，在上式左右都乘以 $e^{-i\alpha}$，由于右手边第二项已经为1阶项，所以在保证0阶和1阶的情况下，有

$$\boxed{|n\rangle_{0+1} = |n\rangle_0 + \sum_{\substack{m=1\\ m\neq n}}^{+\infty} \frac{_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0}{E_{n,0}-E_{m,0}} |m\rangle_0} \quad \text{——— } (*6)$$

(*6)和(*5b)即为1阶修正所需的全部信息 //

16-10

2023年12月24日 15:33

讨论：

(1) 由(*5b)可知，E_n的一阶修正只依赖于$\hat{H}_1$和$|n\rangle_0$，对$|n\rangle_1$的依赖出现在E_n的二阶修正中，这一点和变分法类似。在变分法中，"猜测"的波函数与真实基态波函数的差别只会影响E_0的二阶修正。

(2) 由(*6)，对态矢的修正正比于$_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0$，反比于$E_{n,0}-E_{m,0}$

前者的物理意义为"在$\hat{H}_1$的影响下从$|n\rangle_0$态跳到$|m\rangle_0$态的概率振幅"

注：$|_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0|^2$为概率，$_0\langle m|\hat{H}|n\rangle_0$常被称为概率振幅

后者为$|n\rangle_0$和$|m\rangle_0$本征能量的差，类似从$|n\rangle_0$跳到$|m\rangle_0$的"台阶高度"，台阶越高，跳上去就越困难

(3) 由微扰论的假设，(*6)右边的第2项的系数必须很小，这即要求$E_{n,0}-E_{m,0}$不能太小；

当$E_{n,0}-E_{m,0}$很小时，需要用简并微扰论。

Ex 16.5 推导出$E_{n,2}$和$|n\rangle_2$的表达式，证明 $E_{n,2}=\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{+\infty}\dfrac{|_0\langle n|\hat{H}_1|m\rangle_0|^2}{E_{n,0}-E_{m,0}}$

16-11

2023年12月24日 15:50

§16.3 非简并微扰论举例.

Ex.16.6 考虑一个电荷为 q 的谐振子，在空间中存在一个弱电场 $\phi=-fx$.

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

$$\hat{H}_1=-qf\hat{x}$$

将 $\hat{H}_1$ 作为小量，

(1) 求第 n 个能级本征能量的1阶和2阶修正

(2) 求第 n 个本征态的1阶修正.

解 (1) $E_{n,0}=\frac{1}{2}(2n+1)\hbar\omega$

$$E_{n,1}={}_0\langle n|\hat{H}_1|n\rangle_0=-qf\,{}_0\langle n|\hat{x}|n\rangle_0$$

由升降算符定义

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}+\frac{i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar m\omega}}$$

$$\hat{a}^+=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}-\frac{i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar m\omega}}$$

$$\Rightarrow \hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+)$$

$$\Rightarrow {}_0\langle n|\hat{x}|n\rangle_0=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,{}_0\langle n|\hat{a}+\hat{a}^+|n\rangle_0=0$$

$\Rightarrow E_{n,1}=0$ 即本征能量的1阶修正为0

$$E_{n,2}=\sum_{\substack{k=0\\k\neq n}}^{+\infty}\frac{|{}_0\langle n|\hat{H}_1|k\rangle_0|^2}{E_{n,0}-E_{k,0}}$$

其中 ${}_0\langle n|\hat{H}_1|k\rangle_0=-qf\,{}_0\langle n|\hat{x}|k\rangle_0=-qf\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,{}_0\langle n|\hat{a}+\hat{a}^+|k\rangle_0$

$$=-qf\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\sqrt{k}\,\delta_{n,k-1}+\sqrt{k+1}\,\delta_{n,k+1}\right]$$

$$\Rightarrow |{}_0\langle n|\hat{H}_1|k\rangle_0|^2=q^2f^2\frac{\hbar}{2m\omega}\left[k\,\delta_{n,k-1}+(k+1)\,\delta_{n,k+1}\right]$$

$$E_{n,0}-E_{k,0}=\frac{1}{2}(2n+1)\hbar\omega-\frac{1}{2}(2k+1)\hbar\omega=(n-k)\hbar\omega$$

所以 $E_{n,2}=\frac{g^2f^2}{2m\omega^2}\underbrace{\sum_{\substack{k=0\\k\neq n}}\frac{k\delta_{n,k-1}+(k+1)\delta_{n,k+1}}{(n-k)}}_{=\frac{(n+1)}{(-1)}+n=-1}$

$$=-\frac{g^2f^2}{2m\omega^2}$$

所以 $\hat{H}_0+\hat{H}_1$ 的包含 2 阶修正的本征能量为

$$E_{n,0+1+2}=\frac{1}{2}(2n+1)\hbar\omega-\frac{g^2f^2}{2m\omega^2} \qquad (*1)$$

(2) $|n\rangle_{0+1}=|n\rangle_0+|n\rangle_1$

其中 $|n\rangle_1=\sum_{\substack{k=0\\k\neq n}}^{+\infty}\frac{{}_0\langle k|\hat{H}_1|n\rangle_0}{E_{n,0}-E_{k,0}}|k\rangle_0$

$$=\sum_{\substack{k=0\\k\neq n}}^{+\infty}(-gf)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\sqrt{k}\delta_{n,k-1}+\sqrt{k+1}\,\delta_{n,k+1}}{(n-k)\hbar\omega}|k\rangle_0$$

$$=(-gf)\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}*\left\{\frac{\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle_0}{(-1)}+\frac{\sqrt{n}|n-1\rangle_0}{1}\right\}$$

$$=-\frac{gf}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left\{\sqrt{n}\,|n-1\rangle_0-\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle_0\right\}$$

$$\Rightarrow |n\rangle_{0+1}=|n\rangle_0+\frac{gf}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left\{\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle_0-\sqrt{n}\,|n-1\rangle_0\right\} \qquad (*2)$$

//

Ex 16.7 Ex16.6中的Hamiltonian可以严格求解，
(1) 解出第n个本征值并与Ex16.6的结果比较
(2) 解出 ---- 本征态 ----------

解: (1)
$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2-gf\hat{x}$$
$$=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}-\frac{gf}{m\omega^2}\right)^2-\frac{g^2f^2}{2m\omega^2}$$

此即一个平衡位置为 $\frac{gf}{m\omega^2}$ 的谐振子
能量即为谐振子本征能量减去 $\frac{g^2f^2}{2m\omega^2}$

$$\Rightarrow \quad E_n=\frac{1}{2}(2n+1)\hbar\omega-\frac{g^2f^2}{2m\omega^2}$$

和(*1)的结果恰巧相同，这说明对 $E_{n,0}$ 的3阶及以上的修正为0

(2) 考虑坐标表象波函数
平衡位置为0时波函数

$$\psi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar\, 2^{2n}(n!)^2}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

平衡位置为 $\frac{gf}{m\omega^2}$ 时的波函数

$$\psi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar\, 2^{2n}(n!)^2}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x-\frac{gf}{m\omega^2}\right)^2}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x-\frac{gf}{m\omega^2}\right)\right) \quad (*3)$$

当 $\frac{gf}{m\omega^2}\ll x$ 时，对 $\frac{gf}{m\omega^2 x}$ 作Taylor展开，保留到一阶

利用 $$\frac{d}{dy}H_n(y)=2nH_{n-1}(y)$$
$$H_{n+1}(y)=2yH_n(y)-2nH_{n-1}(y)$$

2023年12月24日 22:00

(*3)

$$\psi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2n}(n!)^2}\right)^{1/4}\Big\{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$+\Big[e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x-\frac{qf}{m\omega^2}\right)^2}\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\right)*2*\left(x-\frac{qf}{m\omega^2}\right)(-1)H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x-\frac{qf}{m\omega^2}\right)\right)$$

$$+e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x-\frac{qf}{m\omega^2}\right)^2}*2nH_{n-1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x-\frac{qf}{m\omega^2}\right)\right)*\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(-1)\Big]\Big|_{\frac{qf}{m\omega}=0}$$

$$*\frac{qf}{m\omega^2}\Big\}$$

$$=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2n}(n!)^2}\right)^{1/4}\Big\{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$+\Big[e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}*\frac{m\omega}{\hbar}*xH_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$-e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}*2nH_{n-1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\Big]*\frac{qf}{m\omega^2}$$

$$=e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\Big\{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}*\frac{1}{2}\left[H_{n+1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)+2nH_{n-1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\right]$$

$$-2nH_{n-1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\Big]$$

$$=e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}*\frac{1}{2}\left[H_{n+1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)-2nH_{n-1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\right]$$

- $$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2n}(n!)^2}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{1}{2}H_{n+1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2(n+1)}[(n+1)!]^2}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{n+1}\,H_{n+1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$=\sqrt{n+1}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\psi_{n+1}(x)$$

- $$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2n}(n!)^2}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,n\,H_{n-1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2(n-1)}[(n-1)!]^2}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{n}\,H_{n-1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$=\sqrt{n}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\psi_{n-1}(x)$$

$$=\psi_n(x)+\left[\sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}(x)-\sqrt{n}\,\psi_{n-1}(x)\right]\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\frac{qf}{m\omega^2}$$

$$=\psi_n(x)+\left[\sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}(x)-\sqrt{n}\,\psi_{n-1}(x)\right]\frac{qf}{\sqrt{2\hbar m\omega^3}}$$ 与(*2)相同 //

通过这两个例子，我们可以更直观地感受到微扰论和Taylor展开的关系.

微扰论就是在系统存在一个小量的时候，假设所求的量可以对该小量作Taylor展开，然后一阶一阶地求该Taylor展开的系数.

Ex 16.7

*Exercise 17.2.1.** Consider $H^1 = \lambda x^4$ for the oscillator problem.

(1) Show that

$$E_n^1 = \frac{3\hbar^2\lambda}{4m^2\omega^2}[1+2n+2n^2]$$

(2) Argue that no matter how small λ is, the perturbation expansion will break down for some large enough n. What is the physical reason?

Ex.16.8

Exercise 17.2.3. In our study of the H atom, we assumed that the proton is a point charge e. This leads to the familiar Coulomb interaction $(-e^2/r)$ with the electron. (1) Show that if the proton is a uniformly dense charge distribution of radius R, the interaction is

$$\begin{aligned} V(r) &= -\frac{3e^2}{2R} + \frac{e^2r^2}{2R^3}, \qquad r \le R \\ &= -\frac{e^2}{r}, \qquad r > R \end{aligned}$$

(2) Calculate the first-order shift in the ground-state energy of hydrogen due to this modification. You may assume $e^{-R/a_0} \simeq 1$. You should find $E^1 = 2e^2R^2/5a_0^3$.

§16.4 简并微扰论

$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$ 但 $\hat{H}_0$ 有简并子空间，假设 §16.2 推导中的本征态 $|k\rangle_0$ 和 $|k+1\rangle_0$ 简并（k为定值），本征值 $E_{k+1,0}=E_{k,0}$

其余本征态均不简并

由 §16.2 节 (*4) 式

$$\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{+\infty} C_m(E_{n,0}-E_{m,0})|m\rangle_0=\hat{H}_1|n\rangle_0-E_{n,1}|n\rangle_0 \quad \text{——} (*1)$$

- 若 $n\neq k, n\neq k+1$，则 $E_{n,0}-E_{m,0}\neq 0$，推导和 §16.2 相同，可得

$$E_{n,1}={}_0\langle n|\hat{H}_1|n\rangle_0$$

$$C_m=\frac{{}_0\langle m|\hat{H}_1|n\rangle_0}{E_{n,0}-E_{m,0}}$$

- 若 $n=k$，则用 ${}_0\langle k+1|$ 左乘 (*1) 可得

$$C_{k+1}(E_{k,0}-E_{k+1,0})={}_0\langle k+1|\hat{H}_1|k\rangle_0$$

由前面假设，有 $E_{k,0}=E_{k+1,0}$，所以有

$${}_0\langle k+1|\hat{H}_1|k\rangle_0=0 \quad \text{————} (*2)$$

这是来自微扰论计算中的自洽性要求

$\hat{H}_1$ 在 $\{|k\rangle_0, |k+1\rangle_0\}$ 为基的简并子空间中的矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} {}_0\langle k|\hat{H}_1|k\rangle_0 & {}_0\langle k|\hat{H}_1|k+1\rangle_0 \\ {}_0\langle k+1|\hat{H}_1|k\rangle_0 & {}_0\langle k+1|\hat{H}_1|k+1\rangle_0 \end{pmatrix}$$

(*2) 表明该矩阵为对角矩阵。

- 因为在简并子空间中，我们可以自由地选择基矢。但是微扰论自洽性要求 (*2) 成立，即打破了这种自由度。(*2) 要求我们对简并子空间中基的选取必须使 $\hat{H}_1$ 对角化。

16-17

2023年12月25日 21:19

- 比如最简单的氢原子系统

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{|r|}$$

其本征能量为$E_{n,0}$的态有n^2重简并，记为$|n,l,m\rangle$.

$|n,l,m\rangle$为$\hat{H}_0$，$\hat{L}^2$，$\hat{L}_3$的共同本征态

若考虑某微扰$\hat{H}_1$，则为了使$\hat{H}_1$在该子空间对角化，我们很可能需要用不同l,m的$|n,l,m\rangle$构造在该子空间中新的基矢。新的基矢可能不再是$\hat{L}^2$，$\hat{L}_3$的本征态.

- 物理上，简并往往来自于某些对称性，比如氢原子中相同n的态的简并来源于三维旋转对称性.

而微扰项的引入一般情况下破坏了对称性，即破坏了简并.

Ex 16.9 考虑两个耦合谐振子（一维）

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}_1^2}{2m}+\frac{\hat{p}_2^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}_1^2+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}_2^2$$

$$\hat{H}_1=\lambda\hat{x}_1\hat{x}_2$$

$0<\lambda\ll\frac{1}{2}m\omega^2$，所以$\hat{H}_1$可认为是微扰

(1) 分析系统的简并度

(2) 对能量第2低的态，用简并微扰论求出能量和态矢的一阶修正.

解：(1) $\hat{H}_0$描述两个独立谐振子，能量分别为$E^{(1)}_{n_1}=\frac{1}{2}(2n_1+1)\hbar\omega$ 和$E^{(2)}_{n_2}=\frac{1}{2}(2n_2+1)\hbar\omega$，

总能量 $E_N=\frac{1}{2}(2N+2)\hbar\omega=(N+1)\hbar\omega \qquad (N=0,1\dots)$

其中$N=n_1+n_2$，简并度为$N+1$.

16-18

2023年12月25日 21:41

能量第二低的态为 $N=1$，包括两个本征态，记为 $|1,0\rangle_0$ 和 $|0,1\rangle_0$

其中第一个数字为 n_1，第二个数字为 n_2

首先求 $\hat{H}_1$ 在该空间中的矩阵表示

$$\hat{H}_1=\lambda\hat{x}_1\hat{x}_2=\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_1+\hat{a}_1^+)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_2+\hat{a}_2^+)$$

$$=\lambda\frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_1\hat{a}_2+\hat{a}_1^+\hat{a}_2+\hat{a}_1\hat{a}_2^++\hat{a}_1^+\hat{a}_2^+)$$

所以 $_0\langle1,0|\hat{H}_1|1,0\rangle_0=0$

$_0\langle0,1|\hat{H}_1|0,1\rangle_0=0$

$$_0\langle1,0|\hat{H}_1|0,1\rangle_0=\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}{}_0\langle1,0|\hat{a}_1^+\hat{a}_2|0,1\rangle_0$$

$$=\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}$$

$$_0\langle0,1|\hat{H}_1|1,0\rangle_0=({}_0\langle1,0|\hat{H}_1|0,1\rangle_0)^*=\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}$$

$$\begin{pmatrix} {}_0\langle0,1|\hat{H}_1|0,1\rangle_0 & {}_0\langle0,1|\hat{H}_1|1,0\rangle_0 \\ {}_0\langle1,0|\hat{H}_1|0,1\rangle_0 & {}_0\langle1,0|\hat{H}_1|1,0\rangle_0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & \frac{\lambda\hbar}{2m\omega} \\ \frac{\lambda\hbar}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix}$$

取 $|\psi\rangle_0=d_1|1,0\rangle_0+d_2|0,1\rangle_0$

则 $$\hat{H}_1|\psi\rangle_0=\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_1^+\hat{a}_2+\hat{a}_1\hat{a}_2^+)(d_1|1,0\rangle_0+d_2|0,1\rangle_0)$$

$$=\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}(d_1\hat{a}_1\hat{a}_2^+|1,0\rangle_0+d_2\hat{a}_1^+\hat{a}_2|0,1\rangle_0)$$

$$=\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}(d_1|0,1\rangle_0+d_2|1,0\rangle_0)$$

可以取 $|\psi_1\rangle_0=\frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle_0+|0,1\rangle_0)$

$|\psi_2\rangle_0=\frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle_0-|0,1\rangle_0)$

有 $\hat{H}_1|\psi_1\rangle_0=\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}|\psi_1\rangle_0$

$\hat{H}_2|\psi_2\rangle_0=-\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}|\psi_2\rangle_0$

16-19

2023年12月25日 21:53

加了$\hat{H}_1$后，原本简并的$|\psi_1\rangle_0$和$|\psi_2\rangle_0$不再简并

(*1)

$$\Rightarrow \sum_{\substack{n_1,n_2=0\\ n_1+n_2\neq 1}}^{+\infty} C_{n_1,n_2}\left(E_{i,0}-E_{n_1,n_2,0}\right)|n_1,n_2\rangle_0 = \hat{H}_1|\psi_i\rangle_0 - E_{i,1}|\psi_i\rangle_0 \qquad (*3)$$

其中 $i=1,2$,

$$E_{i,0} = 2\hbar\omega, \quad E_{n_1n_2,0} = (n_1+n_2+1)\hbar\omega$$

- ${}_0\langle\psi_i|$ 左乘 (*3)，得

$$E_{i,1} = \langle\psi_i|\hat{H}_1|\psi_i\rangle = \begin{cases} \dfrac{\lambda\hbar}{2m\omega} & i=1 \\ -\dfrac{\lambda\hbar}{2m\omega} & i=2 \end{cases}$$

- ${}_0\langle k_1,k_2|$左乘(*3)得 $(k_1+k_2\neq 1)$

$$C_{k_1k_2}\left[2\hbar\omega-(k_1+k_2+1)\hbar\omega\right] = {}_0\langle k_1k_2|\hat{H}_1|\psi_i\rangle_0$$

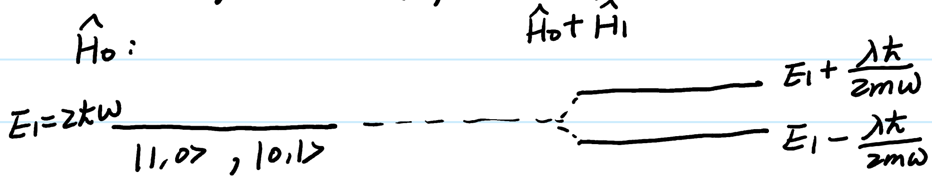
$$\Rightarrow C_{k_1k_2} = \frac{{}_0\langle k_1k_2|\hat{H}_1|\psi_i\rangle_0}{(1-k_1-k_2)\hbar\omega}$$

由$\hat{H}_1$的表达式和$|\psi_i\rangle_0$的表达式，可知有贡献的项为

$k_1=k_2=0$ 或 $k_1+k_2=3$， //

讨论:

- 加了$\hat{H}_1$后，原本的简并被打破



- 若不存在严格简并，但两个态能级很靠近，则加入微扰会极大地干扰这两个态，那么也应使用简并微扰论.
- 数学上说，在简并子空间对$\hat{H}_1$对角化，那么在微扰过程中简并态不发生混合，就避免非简并微扰论中 $E_{n,0}-E_{m,0}=0$ 的奇点

16-20

2023年12月25日 22:22

Ex 16.10 用 Ex 10.11 的方法另格求解 Ex 16.9，并和 Ex 16.9 比较.

(解见曾谨言，卷I，P376)

16-21

2023年12月25日 22:23

§16.5 WKB方法

全称：Wentzel-Kramers-Brillouin

考虑坐标表象下的能量本征方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi+V(x)\psi=E\psi$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi=(E-V(x))\psi \qquad (*1)$$

- 因为$\hbar$是个小量，自然想到用$\hbar$做微扰

首先假设ψ为$\hbar$的解析函数，则ψ可对$\hbar$做Taylor展开

$$\psi=\sum_{n=0}^{+\infty}C_n(x)\hbar^n$$

代入(*1)，有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{n=0}^{+\infty}\hbar^n\frac{\partial^2 C_n}{\partial x^2}=(E-V)\sum_{n=0}^{+\infty}C_n(x)\hbar^n$$

则0阶项为：$E-V(x)=0$

由于E为常数，而$V(x)$为x的函数，显然不符合物理

$\Rightarrow$ ψ不可能为$\hbar$的解析函数

$\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 和 $E-V$ 为相同阶数 $\Rightarrow$ $\frac{\partial}{\partial x}$会给出一个$\frac{1}{\hbar}$，

- 因为(*1)中ψ对x求导后仍正比于ψ，猜测ψ有e指数结构，

由于$\frac{\partial}{\partial x}\psi\sim\frac{1}{\hbar}\psi$，定义

$$\psi(x)=e^{\frac{i}{\hbar}\phi(x)} \qquad (*2)$$

这个定义只是将$\psi(x)$换成$\phi(x)\in\mathbb{C}$，没有做任何近似。

(*2)中的$\psi(x)$显然不是$\hbar$在0的邻域内的解析函数，

$\hbar=0$为$\psi(x)$的本性奇点。

- 其实这个结果也在预料之中，比如平面波解即为 $e^{\frac{i}{\hbar}px}$
- 将(*2)代入(*1)，

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\frac{i}{\hbar}\phi(x)} = \frac{\partial}{\partial x}\left[e^{\frac{i}{\hbar}\phi(x)} \frac{i}{\hbar}\phi'(x)\right]$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\phi(x)}\left(-\frac{1}{\hbar^2}\right)(\phi'(x))^2 + \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\phi(x)}\phi''(x)$$

$$(*1) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{1}{\hbar^2}(\phi'(x))^2 + \frac{i}{\hbar}\phi''(x)\right] = (E-V)$$

$$\Rightarrow -i\hbar\,\phi''(x) + [\phi'(x)]^2 = p^2(x) \qquad (*3)$$

其中 $p(x) \equiv \sqrt{2m(E-V(x))}$

- 猜测 $\phi(x)$ 为 $\hbar$ 的解析函数

$$\phi(x) = \phi_0(x) + \hbar\phi_1(x) + \hbar^2\phi_2(x) + \cdots \qquad (*4)$$

下面验证该猜测的正确性.

将(*4)代入(*3)，有

$$-i\hbar\left(\sum_{n=0}^{+\infty}\hbar^n\phi_n''(x)\right) + \left(\sum_{n=0}^{+\infty}\hbar^n\phi_n'(x)\right)^2 = p^2(x) \qquad (*5)$$

0阶：$(\phi_0')^2 = p^2(x)$ —— (*6a)

1阶 $-i\hbar\phi_0'' + 2\hbar\phi_0'\phi_1' = 0$ —— (*6b)

2阶 $-i\hbar^2\phi_1'' + 2\hbar^2\phi_0'\phi_2' + \hbar^2(\phi_1')^2 = 0$ —— (*6c).

- 0阶方程有形式解

$$\phi_0(x) = \pm\int_{x_0}^{x} dx'\, p(x') + \phi(x_0)$$

若只考虑0阶，代入(*2)，有

$$\psi_0(x) = e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} dx' p(x')}\,\psi_0(x_0) \qquad (*7)$$

其中 $\psi_0(x_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\phi(x_0)}$

16-23

2023年12月26日　21:49

考虑 $V(x)=0$ 的情况，$p(x)=\sqrt{2mE}$ 为常数，

$$(*7) \Rightarrow \psi_0(x) = \psi_0(x_0)\, e^{\pm\frac{i}{\hbar}px}$$

和 Schrödinger 方程的平面波解相同，

说明前面猜测 "$\phi(x)$ 是 $\hbar$ 的解析函数" 是合理的。

Ex 16.11 解一阶方程 (*6b)，分析其物理意义

解：将 (*7) 代入 (*6b)：

$$-i\hbar\left(\pm p'(x)\right) + 2\hbar\left(\pm p(x)\right)\phi_1'(x) = 0$$

$$\Rightarrow \phi_1'(x) = \frac{i}{2}\frac{p'(x)}{p(x)} = \frac{i}{2}\frac{d}{dx}\log p(x).$$

$$\Rightarrow \phi_1(x) - \phi_1(x_0) = \frac{i}{2}\log\frac{p(x)}{p(x_0)}$$

$$\Rightarrow \phi_1(x) = \frac{i}{2}\log\frac{p(x)}{p(x_0)} + \phi_1(x_0) \qquad \text{——————} \quad (*8)$$

将 (*8) (*7) 代入 (*2)

$$\psi_{0+1}(x) = e^{\frac{i}{\hbar}\phi_0(x)}\, e^{+i\phi_1(x)}$$

$$= \psi_0(x_0)\, e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}dx'p(x')}\, e^{-\frac{1}{2}\log\frac{p(x)}{p(x_0)} + i\phi_1(x_0)}$$

$$= \sqrt{\frac{p(x_0)}{p(x)}}\, \underbrace{\psi_0(x_0)\, e^{i\phi_1(x_0)}}_{\equiv\, \psi_{0+1}(x_0)} \ast e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}dx'p(x')} \qquad \text{——} \quad (*9)$$

物理意义，由于找到粒子的概率密度 $\propto |\psi(x)|^2$，

$$|\psi_{0+1}(x)|^2 = |\psi_{0+1}(x_0)|^2\, \frac{p(x_0)}{p(x)}$$

$$= |\psi_{0+1}(x_0)|^2\, \frac{v(x_0)}{v(x)}$$ 其中 $v(x)$ 为在 x_0 点的经典速度

这种概率 $\propto \frac{1}{v}$ 的行为与经典粒子相同！

16-24

2023年12月26日 22:11

- 只保留 $\phi_0(x)$ 和 $\phi_1(x)$ 的表达式 (*9) 即为传统的 WKB 近似，也称"半经典近似" (semi-classical approximation)
- WKB 近似给出了粒子的经典路径，和第2章中从波动光学利用程函近似得到几何光学的方法相同.
- 由 (*2) 和 (*4)，当取 $\hbar \to 0$ 时，只有 $\phi_0(x)$ 和 $\phi_1(x)$ 有贡献，所以人们常说"经典物理是量子物理在 $\hbar \to 0$ 的极限"
- 量子物理的波动信息可以通过 $\phi_n(x)$ $(n \geq 2)$ 逐渐加入到结果中.
- WKB 应用举例见

  Shankar. P444 – 449

  曾谨言 卷II. §2.4.