复旦大学毕业论文

关于非相对论束缚势下能级与原点波函数的若干定理

物理系 80 级 理论物理专业

姓　名 周子翔

指导教师 苏汝铿

1984 年 6 月 26 日

原稿为手写, 本稿用 LaTeX 重新打印.

• 复旦大学毕业论文 •

关于非相对论束缚势下能级与原点波函数的若干定理

物理 系 80 级 理论物理 专业

姓　　名 周子翔

指导教师 苏汝铿

1984 年 6 月 26 日

关于非相对论束缚势下能级与原点波函数的若干定理

1　关于能级与原点波函数的原有结果

关于 Schrödinger 方程的能级次序、能级间隔与原点波函数, 已有许多文章讨论过. 下面总结一下已有的结果, 并给出主要的证明思想.

1. 关于能级次序的结果

文献 [1]–[4] 分别讨论了势场 $-\frac{1}{r}+V(r)$, $r^2+V(r)$ ($V(r)$ 在原点非奇异, 下面不再重复) 中能级次序与势场的关系.

A. Martin 给出了如下的结果[1]: 对势 $-\frac{1}{r}+V(r)$, 若 $\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}r^3}(r^2V)>0$, 则 $E_{2s}>E_{2p}$. 此结果可自然推广为 $E_{3p}>E_{3d}$, $E_{4d}>E_{4f}$, $\cdots$. (由于以上各对态的径向量子数相同, 仅角量子数不同, 而 Martin 的证明只涉及波函数的零点).

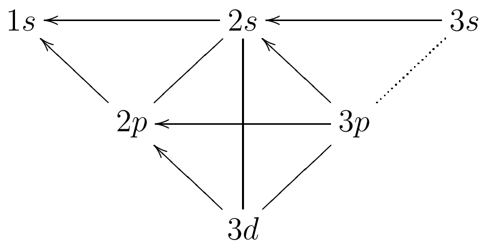
H. Grosse 利用了与 Martin 类似的方法证明了[2]: 对势 $-\frac{1}{r}+V(r)$, 若 $\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}r^3}(r^2V)>0$, 且 $\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^3(r^2V)<0$, 则 $E_{3d}>E_{2s}$. 此结果可自然推广为 $E_{4f}>E_{3p}$, $\cdots$.

以上结果讨论的态仅限于一个零点或无零点, 对于多个零点的情形, 这些方法难以应用. 因此, 有一些文章给出了一些近似结果.

G. Feldman, T. Fulton, A. Devoto 证明了[3]: 在 WKB 近似下, 对 $-\frac{1}{r}+V(r)$, 当 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)>0$ 时, $E_{nl}>E_{n,l+1}$; 对 $r^2+V(r)$, 当 $\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^2V<0$ 时, $E_{nl}<E_{n,l+2}$. H. Grosse, A. Martin 进一步证明了, 在微扰下, 对 $-\frac{1}{r}+\lambda V(r)$, 当 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\gtrless 0$ 时, $E_{nl}\gtrless E_{n,l+1}$; 对 $r^2+\lambda V(r)$, 当 $\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^2V\gtrless 0$ 时, $E_{nl}\gtrless E_{n,l+2}$.

除以上结果外, 有些能级次序可直接判断. 例如: 对相同 l 的态, 径向量子数 n_r 大的态能级较高, 对相同 n_r 的态, l 大的态能级较高. (这点的证明留在附录中).

由此, 对已有的结果, 可总结成下图 ($n\leq 3$)



其中 “⟶” 表示前者能级一定高于后者能级, “——” 表示前面提到的严格结果, “$\cdots\cdots$” 表示前面提到的近似结果.

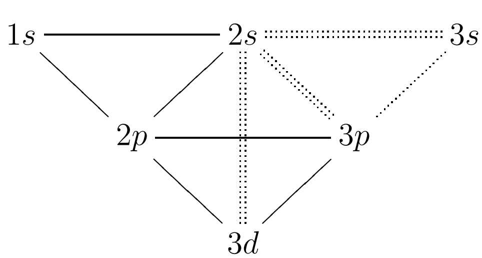
2. 关于能级间隔的结果

对于势场 $-\dfrac{1}{r}+\lambda V(r)$, 苏汝铿、梁俊的文章 [5] 中证明了: (1) 如果 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2V)(0)=0$, $\dfrac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}r^3}(r^2V)\gtreqless 0$, 则 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda}\lesseqgtr 0$, 其中 $\mathcal{E}=E_{2p}-E_{3d}$. (2) 如果 $0\le\lim\limits_{r\to\infty}\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^2(r^2V)<\infty$, $\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^3(r^2V)<0$, 则 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda}<0$; 如果 $-\infty<\lim\limits_{r\to\infty}\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^2V\le 0$, $\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^3(r^2V)>0$, 则 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda}>0$. (3) 如果 $\lim\limits_{r\to 0}\dfrac{1}{r^3}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2V)=0$, $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\dfrac{1}{r^3}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2V)\right)\gtreqless 0$, 则 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda}\lesseqgtr 0$. (4) 如果 $\left(\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^2(r^2V)\gtreqless 0$, 则 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda}\lesseqgtr 0$. 以上这些结论在条件不变的情况下可自然推广到 $\mathcal{E}=E_{1s}-E_{2p}, E_{3d}-E_{4f},\cdots$. (注意: 上面的势虽然写成 $-\dfrac{1}{r}+\lambda V(r)$ 的形式, 但 λV 并非微扰, λ 可取任意正数).

对于一组主量子数相同的态, 由于库仑势时有简并, 故 $-\dfrac{1}{r}+\lambda V(r)$ 中能级间隔与 $-\dfrac{1}{r}$ 中能级间隔 $(=0)$ 的比较就相当于讨论 $-\dfrac{1}{r}+\lambda V(r)$ 中的能级次序.

对于 $1s$ 与 $2s$ 态, $2p$ 与 $3p$ 态等, 可综合 Martin 的结论 [1] 与苏汝铿、梁俊的结论 [5]. 下面列出其中的一个结论: 当 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2V)(0)=0$, $\dfrac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}r^3}(r^2V)>0$ 时, $-\dfrac{1}{r}+V(r)$ 的能级间隔 $E_{2s}-E_{1s}$, $E_{3p}-E_{2p}$ 分别大于 $-\dfrac{1}{r}$ 对应的能级间隔.

至此, 能级间隔已被讨论过的态如下图.



(实线与虚线的意义如前, “⁞⁞⁞” 表示尚未给出结果的态).

3. 关于原点波函数的结果

Martin 证明了[6], 在势场 $V(r)$ 中, 如果 $\dfrac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}r^2}\gtrless 0$, 则 $|\psi_{2s}(0)|\gtrless|\psi_{1s}(0)|$.

4. 以上结果的主要证明方法

文章 [2], [5], [6] 的主要方法都与 [1] 类似, 因此, 下面比较详细地介绍 [1] 的证明, 另外, 还将简要地介绍 [4] 的证明.

Martin 证明的主要步骤如下[1]:

$2s$、$2p$ 态满足 Schrödinger 方程

$$2s: \quad -u'' - \frac{\beta}{r}u + \lambda^2 V(\lambda r)u = E_{2s}u \tag{1}$$

$$2p: \quad -v'' - \frac{\beta}{r}v + \frac{2}{r^2}v + \lambda^2 V(\lambda r)v = E_{2p}v \tag{2}$$

u 无零点, 不妨设 $u>0$, v 有一个零点, 不妨设 $r<r_0$ 时 $v>0$, $r>r_0$ 时 $v<0$.

由 Schrödinger 方程 (1), (2) 得

$$(uv'-u'v)' = uv\Big(\frac{2}{r^2}+E_{2s}-E_{2p}\Big)$$

$$uv'-u'v = \begin{cases} \displaystyle\int_0^r uv\Big(\frac{2}{r^2}+E_{2s}-E_{2p}\Big)\,\mathrm{d}r & r<r_0 \\ \displaystyle -\int_r^\infty uv\Big(\frac{2}{r^2}+E_{2s}-E_{2p}\Big)\,\mathrm{d}r & r>r_0 \end{cases} \tag{3}$$

如果 Martin 的结论不成立, 即 $E_{2s}\geq E_{2p}$, 则上式右端的被积函数恒号, 由此得 u^2-v^2 在 $(0,r_0)$, $(r_0,+\infty)$ 最多各有一个零点.

利用 Virial 定理得

$$\mathcal{E} = E_{2s}-E_{2p} = \int_0^\infty (u^2-v^2)\Big(-\frac{\beta}{r}+2\lambda^2V(\lambda r)+\lambda^2 r\frac{\partial V(\lambda r)}{\partial r}\Big)\,\mathrm{d}r$$

再由 Feynman-Hellmann 定理

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} = \int_0^\infty (u^2-v^2)\frac{\partial}{\partial\lambda}(\lambda^2V(\lambda r))\,\mathrm{d}r \tag{4}$$

得

$$2\mathcal{E} = -\beta\int_0^\infty \frac{u^2-v^2}{r}\,\mathrm{d}r + \lambda\frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} \tag{5}$$

如果 Martin 的结论不成立, 则有一点 $\lambda > 0$, 使 $\mathcal{E} = 0$. 在这点, 必有 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} > 0$. 若不然, 即在 $\mathcal{E} = 0$ 处 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} \leq 0$, 则由 (5), $\displaystyle\int_0^\infty \frac{u^2 - v^2}{r}\,\mathrm{d}r < 0$. 这时, $u^2 - v^2$ 有且仅有 2 个零点 $r_1 < r_2$. (若 $u^2 - v^2$ 仅有 1 个零点 r_1, 则由 $\displaystyle\int_0^\infty \Big(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_1}\Big)(u^2 - v^2)\,\mathrm{d}r < 0$ 及 $u^2 - v^2|_{r=0} > 0$ 得出矛盾). 因此, $u^2 - v^2$ 的符号如下:

$$u^2 - v^2 \begin{cases} > 0 & r < r_1 \\ < 0 & r_1 < r < r_2 \\ > 0 & r > r_2 \end{cases}$$

令 $I(r) = \displaystyle\int_r^\infty \frac{u^2 - v^2}{r'}\,\mathrm{d}r'$, $J(r) = \displaystyle\int_r^\infty I(r')\,\mathrm{d}r'$. 利用 $I(0) < 0$ 及 r 充分大时 $I(r) > 0$ 得 $I(r)$ 有且仅有一个零点. 再由归一条件得 $J(0) = 0$, 而 $J'(0) > 0$, 故 $J(r) > 0$.

由 (4) 式,

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} = \int_0^\infty J(r)\frac{\partial^3}{\partial r^3}(\lambda^2 r^2 V(\lambda r))\,\mathrm{d}r > 0$$

与 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} \leq 0$ 的假设矛盾. 从而在 $\mathcal{E} = 0$ 处必有 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} > 0$.

但由微扰结果, λ 充分小时, $\mathcal{E} > 0$, 从而在第一个零点处 $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} \leq 0$, 又产生矛盾. 故 $\lambda > 0$ 时, $\mathcal{E}$ 无零点, 即 $\mathcal{E} > 0$. 证毕.

Martin 关于原点波函数的证明如下. 首先与前面类似证明, $u^2 - v^2$ 在 $(0, r_0)$, $(r_0, +\infty)$ 最多各有一个零点. (u, v 分别代表 $1s$, $2s$ 的波函数). 如果 $|u'(0)| > |v'(0)|$, 则利用 r 充分大时, $|u| < |v|$, 得 $u^2 - v^2$ 有且仅有一个零点 r_1. 由 Schrödinger 方程及 $\dfrac{\mathrm{d}^2 V}{\mathrm{d}r^2} > 0$ 得

$$\begin{aligned}(u'(0))^2 - (v'(0))^2 &= \int_0^\infty (u^2 - v^2)\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\,\mathrm{d}r \\ &= \int_0^\infty (u^2 - v^2)\Big(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\Big|_{r_1}\Big)\,\mathrm{d}r < 0\end{aligned}$$

从而与 $|u'(0)| > |v'(0)|$ 矛盾.

关于 $\dfrac{\mathrm{d}^2 V}{\mathrm{d}r^2} < 0$ 时的结论的证明后面不再用到, 因此这里不再写出, 详细证明见 [6].

至此, 就是利用分析 $u^2 - v^2$ 零点的方法所给出的结论.

Grosse, Martin 在 [4] 中用微扰证明了 $-\dfrac{1}{r} + \lambda V(r)$ 与 $r^2 + \lambda V(r)$ 的能级次序. 下面简单介绍关于库仑势的证明.

$$H = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \lambda V(r)$$

记 $\Delta_{nl}=\lim\limits_{\lambda\to 0}\dfrac{E_{nl}-E_{n,l+1}}{\lambda}=\langle V\rangle_{nl}-\langle V\rangle_{n,l+1}$, Δ_{nl} 的符号就决定了 $E_{nl}-E_{n,l+1}$ 的符号.

构造角动量 "产生"、"湮灭" 算子:

$$A_l^{\pm}=\pm\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+\frac{1}{2(l+1)}$$

则 $A_l^-u_{n,l+1}=\alpha_l u_{nl}$, $A_l^+u_{nl}=\alpha_l u_{n,l+1}$, 其中 $4\alpha_l^2=\dfrac{1}{(l+1)^2}-\dfrac{1}{n^2}$.

利用 A_l^+, A_l^- 得

$$\alpha_l\Delta_{nl}=\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}u_{nl}u_{n,l+1}\,\mathrm{d}r$$

再用分部积分得

$$\alpha_l^2\Delta_{nl}=\Big\langle\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l+1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}-\frac{1}{2(l+1)}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\Big\rangle_{n,l+1}$$

由 Virial 定理又可得 $\Big\langle\dfrac{r-r_0}{r^3}\Big\rangle_{n,l+1}=0$, $r_0=2(l+1)(l+2)$, 从而有

$$\begin{aligned}\alpha_l^2\Delta_{nl}=&\Big\langle\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\Big\rangle_{n,l+1}\\&+\Big\langle\frac{1}{r^3}\Big(r^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}-r_0^2\frac{\mathrm{d}V(r_0)}{\mathrm{d}r}\Big)\frac{(r-r_0)}{2(l+1)}\Big\rangle_{n,l+1}\end{aligned}$$

由此, 利用 V 的条件即可得结论.

附录:

对相同 n_r 的态, l 大的态能级较高.

证: 记 $H_l=-\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r)+\dfrac{l(l+1)}{r^2}$. 记 $H_l^\lambda=H_l+\dfrac{2\lambda(l+1)}{r^2}$, 对应的本征值为 $E_{n_r,l}^\lambda$, 本征函数为 $u_{n_r,l}^\lambda$.

由 Feynman-Hellmann 定理,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}E_{n_r,l}^\lambda=\int_0^\infty\frac{2(l+1)}{r^2}u^2\,\mathrm{d}r>0$$

故 $E'_{n_r,l}>E^0_{n_r,l}=E_{n_r,l}$.

下面证明 $u'_{n_r,l}$ 与 $u_{n_r,l}$ 有相同的零点个数. 若不然, 则存在 $0<\lambda<1$, 使在 $u_{n_r,l}^\lambda$ 的零点处 $u_{n_r,l}^\lambda$ 的导数也为零, 利用 Schrödinger 方程得 $u_{n_r,l}^\lambda$ 的任意阶导数为零, 从而 $u_{n_r,l}^\lambda$ 恒为零, 矛盾. 因此, $u'_{n_r,l}$ 与 $u_{n_r,l}$ 有相同的零点个数 n_r, 即 $E'_{n_r,l}$ 对应的径向量子数 n_r, 而 $E'_{n_r,l}$ 是 H_{l+1} 的本征值, 故 $E'_{n_r,l}=E_{n_r,l+1}$. 由前面的结论得 $E_{n_r,l+1}>E_{n_r,l}$, 矛盾.

2 关于能级与原点波函数的几个定理

1. $l \geq 1$ 时原点波函数的比较

在具体讨论之前, 先给出几个直观上比较显然的引理. 假设对势场 $V(r)$, 在原点附近 $r^2V(r)$ 解析, 且 $\lim\limits_{r\to 0} r^2V(r)=0$.

引理 1: 对于 l 态, 当 $r\to 0$ 时, $u(r)\sim r^{l+1}$.

证: 径向 Schrödinger 方程为

$$-u''+\Big(V(r)+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)u=Eu$$

设在原点附近 $u(r)\sim r^\sigma$, 代入方程得

$$-\sigma(\sigma-1)r^{\sigma-2}+\Big(V+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)r^\sigma=Er^\sigma$$

比较 $r^{\sigma-2}$ 的系数得 $\sigma=l+1$ (由 $u(0)=0$, 必须 $\sigma>0$), 即 $u(r)\sim r^{l+1}$. 证毕.

引理 2: 对于束缚态, $\lim\limits_{r\to\infty}u(r)=0$, $\lim\limits_{r\to\infty}u'(r)=0$.

证: 对束缚态, r 充分大时, $V+\dfrac{l(l+1)}{r^2}-E>0$. 由于 u 仅有有限个零点, 不妨设 r 充分大时 $u>0$. 由 $u''=\Big(V+\dfrac{l(l+1)}{r^2}-E\Big)u$ 得 r 充分大时 $u''>0$, u' 单调上升. 设 $r>R$ 时 $u''>0$.

(1) $u'\to+\infty$ 或 $u'\to a>0$ $(r\to\infty)$

这时, $u(r)=\displaystyle\int_R^r u'(r)\,\mathrm{d}r+u(R)$. 当 $r\to\infty$ 时, $u(r)\to\infty$, 与归一条件 $\displaystyle\int_0^\infty u^2(r)\,\mathrm{d}r=1$ 矛盾.

(2) $u'\to a<0$ $(r\to\infty)$

这时, 当 $r\to+\infty$ 时, $u(r)\to-\infty$, 同样与归一化条件矛盾.

综合 (1), (2) 得, $\lim\limits_{r\to\infty}u'(r)=0$.

由于 $r>R$ 时 u' 单调上升, 故 $u'<0$, u 单调下降. 由归一条件得 $\lim\limits_{r\to\infty}u(r)=0$. 证毕.

对于处于势场 $V(r)$ 中的粒子, 将它的状态记为 $|n_r,l\,\rangle$, n_r 为径向量子数, l 为角量子数. 记 $\psi^{(k)}$ 为 ψ 的径向部分对 r 的 k 阶导数. 由引理 1, 对于 l 态, $\psi^{(k)}(0)=0$, $0\leq k<l$, 而 $\psi^{(l)}(0)\neq 0$. 因此, 下面给出比较 $|\psi_{0l}^{(l)}(0)|$ 与 $|\psi_{1l}^{(l)}(0)|$ 的一个充分条件.

记 E_0, E_1 分别为 $|0,l\,\rangle$, $|1,l\,\rangle$ 的能级, Schrödinger 方程为

$$-u'' + V(r)u + \frac{l(l+1)}{r^2}u = E_0 u \tag{6}$$

$$-v'' + V(r)v + \frac{l(l+1)}{r^2}v = E_1 v \tag{6}$$

由于 u 无零点, v 有一个零点, 不妨设 $u(r) > 0$, $r < r_0$ 时 $v(r) > 0$, $r > r_0$ 时 $v(r) < 0$.

引理 3: $\phi(r) = u^2(r) - v^2(r)$ 在 $(0, r_0)$, $(r_0, +\infty)$ 最多各有一个零点.

证: 由 (6), (7) 式得

$$(uv' - u'v)' = (E_0 - E_1)uv \tag{8}$$

由于 E_0, E_1 分别为 $|0,l\,\rangle$, $|1,l\,\rangle$ 的能量, 故 $E_0 < E_1$.

$r < r_0$ 时积分 (8) 式得

$$uv' - u'v = \int_0^r (E_0 - E_1)uv \,\mathrm{d}r < 0$$

即 $(v/u)' < 0$, 从而 v/u 在 $(0, r_0)$ 最多有一点等于 1, 即 $u - v$ 在 $(0, r_0)$ 最多有 1 个零点. 由于 $(0, r_0)$ 中 $u + v > 0$, 故 $\phi(r)$ 在 $(0, r_0)$ 中最多有 1 个零点.

再由 (8) 式得, $r > r_0$ 时

$$uv' - u'v = -\int_r^\infty (E_0 - E_1)uv \,\mathrm{d}r < 0$$

即 $(v/u)' < 0$. v/u 在 $(r_0, +\infty)$ 最多有一点等于 (-1), 即 $u + v$ 在 $(r_0, +\infty)$ 最多有 1 个零点, 而 $(r_0, +\infty)$ 中 $u - v > 0$, 故 $\phi(r)$ 在 $(r_0, +\infty)$ 中最多也只有 1 个零点.

由此得 $\phi(r)$ 在 $(0, r_0), (r_0, +\infty)$ 最多各有 1 个零点. 证毕.

引理 4: 如果 $|u^{(l+1)}(0)| > |v^{(l+1)}(0)|$, 则 $\phi(r)$ 在 $(0, +\infty)$ 有且仅有一个零点, 且在原点附近为正.

证: 在原点附近, $u \sim u^{(l+1)}(0)r^{l+1}/(l+1)!$, $v \sim v^{(l+1)}(0)r^{l+1}/(l+1)!$, 故当 r 充分小时, $\phi(r) > 0$.

由于 $\phi(r_0) > 0$, 由引理 1 得, $r < r_0$ 时 $\phi(r)$ 无零点, 且 $\phi(r) > 0$. 由归一条件得, $\displaystyle\int_0^\infty \phi(r)\,\mathrm{d}r = 0$, 从而 $\phi(r)$ 至少有一个零点, 故 $\phi(r)$ 在 $(0, +\infty)$ 有且仅有一个零点. 证毕.

定理 1: 如果 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\Big(V+\dfrac{l(l+1)}{r^2}\Big)>0$, 则 $|\psi_{0l}^{(l)}(0)|\le|\psi_{1l}^{(l)}(0)|$.

证: 由方程 (6), (7) 得

$$(u'^2-v'^2)'=\Big(V+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)(u^2-v^2)'+E_1(v^2)'-E_0(u^2)'$$

由引理 2, $u(\infty)=v(\infty)=u'(\infty)=v'(\infty)=0$. 在原点附近, $u,v\sim r^{l+1}$, 故 $u(0)=v(0)=u'(0)=v'(0)=0$.

积分 (9) 式得

$$\int_0^\infty\Big(V(r)+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)\phi'(r)\,\mathrm{d}r=0$$

分部积分得

$$\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(V(r)+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)\phi(r)\,\mathrm{d}r=0 \tag{10}$$

如果定理的结论不成立, 即 $|\psi_{0l}^{(l)}(0)|>|\psi_{1l}^{(l)}(0)|$, 则由引理 4, 存在 $a>0$, 使 $r<a$ 时 $\phi(r)>0$, $r>a$ 时 $\phi(r)<0$.

利用 $\displaystyle\int_0^\infty\phi(r)\,\mathrm{d}r=0$ 得

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(V(r)+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)\phi(r)\,\mathrm{d}r\\&=\int_0^\infty\Big\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(V(r)+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)-\Big[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(V(r)+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big)\Big]_{r=a}\Big\}\phi(r)\,\mathrm{d}r\end{aligned}$$

由于 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\Big(V(r)+\dfrac{l(l+1)}{r^2}\Big)>0$, 故上式 <0, 与 (10) 式矛盾. 所以必须 $|\psi_{0l}^{(l)}(0)|\le|\psi_{1l}^{(l)}(0)|$. 证毕.

2. 能级间隔在微扰下的变化

设势场为 $V_0(r)+\lambda W(r)$, λ 为小参数. 下面给出微扰下 $V_0(r)+\lambda W(r)$ 中的能级间隔与 $V_0(r)$ 中能级间隔的比较.

$V_0(r)+\lambda W(r)$ 的两个态 1, 2, 能量为 $\mathcal{E}_1$, $\mathcal{E}_2$, 径向波函数为 u_1, u_2. 记 $\mathcal{E}=E_1-E_2$. 当 $\lambda=0$ 时, 记 $\mathcal{E}=\mathcal{E}_0$, $u=u_0$, $v=v_0$. 不妨设 $\mathcal{E}_0>0$.

记 $I_0(r)=\displaystyle\int_r^\infty\frac{u_0^2(\rho)-v_0^2(\rho)}{\rho}\,\mathrm{d}\rho$.

定理 2: 设 $I_0(0)<0$, $I_0(r)$ 在 $(0,+\infty)$ 中仅有一个零点, 且在 $I_0(r)$ 的零点处 $|u_0|\ne|v_0|$. V_0 满足 $\lim\limits_{r\to\infty}V_0(r)=0$ 或 r 充分大时 $\dfrac{\mathrm{d}V_0}{\mathrm{d}r}>0$. 如果 $W(r)$ 满足 $\lim\limits_{r\to0}rW=0$,

$\lim\limits_{r\to 0} r^2W'=0$, r 充分大时 $\dfrac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}r}>0$, 存在 $\mu>0$, $\lim\limits_{r\to\infty} W\mathrm{e}^{-\mu r}=0$, 且对一切 r, $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rW)\lesseqgtr 0$, 则当 λ 充分小时, $\mathcal{E}\lesseqgtr\mathcal{E}_0$.

在证明定理之前, 先证明一个引理.

引理 5: 记 $I(r)=\displaystyle\int_r^\infty \frac{u^2(\rho)-v^2(\rho)}{\rho}\,\mathrm{d}\rho$, $J(r)=\displaystyle\int_r^\infty I(\rho)\,\mathrm{d}\rho$, 则在定理 2 的条件下, $\lim\limits_{r\to\infty} I(r)rW(r)=0$, $\lim\limits_{r\to\infty} J(r)(rW(r))'=0$.

证: 由定理关于 V_0, W 的条件得, $r\to\infty$ 时 $V_0+\lambda W$ 有极限 (有限或 $+\infty$).

(1) $\lim\limits_{r\to\infty}(V_0+\lambda W)=a(\lambda)$ (有限)

对束缚态, 能量 $E<a$, 取 A, 使 $0<A<a-E$. 不妨设 r 充分大时 $u>0$, 由 $u''=\left(V_0+\lambda W+\dfrac{l(l+1)}{r^2}-E\right)u$ 得, r 充分大时, $u''>Au$. 令 $u=w\mathrm{e}^{-\sqrt{A}\,r}$, 则 $w''>2\sqrt{A}\,w'$, 即 $(w'\mathrm{e}^{-2\sqrt{A}\,r})'>0$. 由于 $\lim\limits_{r\to\infty}(w'\mathrm{e}^{-2\sqrt{A}\,r})=\lim\limits_{r\to\infty}(u'+\sqrt{A}\,u)\mathrm{e}^{-\sqrt{A}\,r}=0$, 故 r 充分大时, $w'\mathrm{e}^{-2\sqrt{A}\,r}<0$, 即 $w'<0$, w 单调下降. 但 $w=u\mathrm{e}^{\sqrt{A}\,r}>0$, 从而 w 单调下降趋于 $w_0\geq 0$. 取 $w_1>w_0$, 则当 r 充分大时 $0<w<w_1$,

$$u(r)=w(r)\mathrm{e}^{-\sqrt{A}\,r}<w_1\mathrm{e}^{-\sqrt{A}\,r}$$

同样存在 $w_2>0$, 使 $v(r)<w_2\mathrm{e}^{-\sqrt{A}\,r}$,

$$I(r)<\int_r^\infty \frac{1}{\rho}(w_1^2+w_2^2)\mathrm{e}^{-2\sqrt{A}\,\rho}\,\mathrm{d}\rho<\frac{w_1^2+\omega_2^2}{2\sqrt{A}}\,\frac{\mathrm{e}^{-2\sqrt{A}\,r}}{r}$$

从而 $\lim\limits_{r\to\infty} I(r)rW(r)=0$.

由于 W 单调, 且 W 收敛于有限数, 故 $W'\to 0$. 与前面类似可证明,

$$\lim_{r\to\infty} J(r)(rW(r))'=\lim_{r\to\infty} J(r)rW'(r)+\lim_{r\to\infty} rW(r)=0$$

(2) $\lim\limits_{r\to\infty}(V_0+\lambda W)=+\infty$

设 r 充分大时 $u>0$. 令 $Q(r)=V_0+\lambda W+\dfrac{l(l+1)}{r^2}-E$, 则 r 充分大时 $Q(r)$ 单调上升趋于 $+\infty$.

取定充分大的 R, 则 $r\geq R$ 时, $u''(r)\geq Q(R)u(r)$. 令 $u(r)=w_R(r)\mathrm{e}^{-\sqrt{Q(R)}\,r}$, 则与第一部分类似, 存在 $w_{R_1}>0$, 使 r 充分大时 $w_R(r)<w_{R_1}$. R 充分大时, $2\sqrt{Q(R)}>\mu$, 从而

$$\begin{aligned}&\lim_{r\to\infty}|I(r)rW(r)|\leq\lim_{r\to\infty}\left|\frac{C}{r}\mathrm{e}^{-2\sqrt{Q(R)}\,r}rW(r)\right|\\&\leq\lim_{r\to\infty} C\mathrm{e}^{-2(\sqrt{Q(R)}-\mu)r}\cdot|W(r)\mathrm{e}^{-\mu r}|=0\end{aligned}$$

类似可证, $\lim\limits_{r\to\infty} J(r)(rW(r))' = 0$. 证毕.

定理 2 的证明: 由于 $I_0(r)$ 仅有一个零点, 且在零点处 $I_0'(r) = -\dfrac{u_0^2(r) - v_0^2(r)}{r} \neq 0$, 故当 λ 充分小时, $I(r)$ 仅有一个零点.

由 $J'(r) = -I(r)$ 得 $J'(r)$ 仅有一个零点, 又

$$
\begin{aligned}
J(0) &= \int_0^\infty \mathrm{d}r \int_r^\infty \frac{u^2(\rho) - v^2(\rho)}{\rho}\,\mathrm{d}\rho \\
&= \int_0^\infty \frac{u^2(\rho) - v^2(\rho)}{\rho}\,\mathrm{d}\rho \int_0^\rho \mathrm{d}r = 0
\end{aligned}
$$

所以 $J(r)$ 在 $(0, +\infty)$ 无零点.

由 $I_0(0) < 0$ 得到 λ 充分小时 $I(0) < 0$, 从而 r 充分小时 $J'(r) = -I(r) > 0$, 又因为 $J(0) = 0$, $J(\infty) = 0$, 故 $J(r) > 0$.

由 Feynman-Hellmann 定理[7],

$$
\frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} = \int_0^\infty (u^2(r) - v^2(r))W(r)\,\mathrm{d}r = -\int_0^\infty I'(r)rW(r)\,\mathrm{d}r
$$

分部积分得

$$
\frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} = -\lim_{r\to\infty} I(r)rW(r) + \lim_{r\to 0} I(r)rW(r) + \int_0^\infty I(r)(rW(r))'\,\mathrm{d}r
$$

由定理条件, $\lim\limits_{r\to 0} I(r)rW(r) = 0$, 由引理 5, $\lim\limits_{r\to\infty} I(r)rW(r) = 0$, 故

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} &= \int_0^\infty I(r)(rW(r))'\,\mathrm{d}r = -\int_0^\infty J'(r)(rW(r))'\,\mathrm{d}r \\
&= -\lim_{r\to\infty} J(r)(rW(r))' + \lim_{r\to 0} J(r)(rW(r))' + \int_0^\infty J(r)(rW(r))''\,\mathrm{d}r
\end{aligned}
$$

由引理 5, $\lim\limits_{r\to\infty} J(r)(rW(r))' = 0$, 由定理的条件,

$$
\begin{aligned}
&\lim_{r\to 0} J(r)(rW(r))' = \lim_{r\to 0}\Big(\frac{J(r)}{r} r^2 W'(r) + \frac{J(r)}{r} rW(r)\Big) \\
&= -I(0)\lim_{r\to 0} r^2 W'(r) - I(0)\lim_{r\to 0} rW(r) = 0
\end{aligned}
$$

由此得

$$
\frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} = \int_0^\infty J(r)(rW(r))''\,\mathrm{d}r
$$

由 $J(r) > 0$ 得, 当 $(rW)'' \lesseqgtr 0$ 时, $\dfrac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}\lambda} \lesseqgtr 0$, 即 $\mathcal{E} \lesseqgtr \mathcal{E}_0$. 证毕.

推论: 设 $V_0(r) = -\dfrac{\beta}{r}$. 如果 $\lim\limits_{r\to 0} rW = 0$, $\lim\limits_{r\to 0} r^2W' = 0$, $(rW)'' < 0$ (> 0), r 充分大时 $W' > 0$, 且存在 $\mu > 0$, $\lim\limits_{r\to +\infty} W\mathrm{e}^{-\mu r} = 0$, 则当 λ 充分小时, $3s - 2s$, $3p - 2s$, $3d - 2s$ 的能级间隔相对 $\lambda = 0$ 时均变窄 (变宽).

证: (验证 u_0, v_0 满足定理所需的条件)

令 $a = \dfrac{2}{\beta}$, $x = \dfrac{2r}{3a}$, 则各态的归一化波函数 (按 r 归一) 如下:

$$
\begin{aligned}
u_{2s} &= \frac{3}{8\sqrt{2a}}\, x(4-x)\mathrm{e}^{-3x/4} \\
u_{3s} &= \frac{1}{6\sqrt{3a}}\, x(x^2-6x+6)\mathrm{e}^{-x/2} \\
u_{3p} &= \frac{1}{6\sqrt{6a}}\, x^2(4-x)\mathrm{e}^{-x/2} \\
u_{3d} &= \frac{1}{6\sqrt{30a}}\, \mathrm{e}^{-x/2}
\end{aligned}
$$

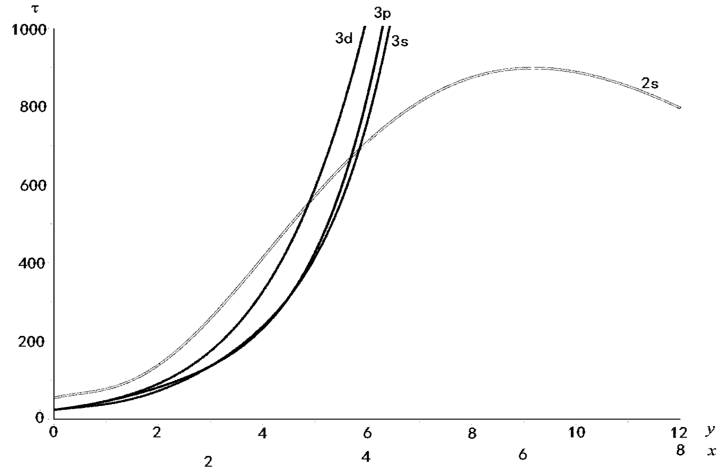
令 $\sigma(x) = a\displaystyle\int_x^{\infty} \frac{u^2(t)}{t}\,\mathrm{d}t$, 则

$$
\begin{aligned}
\sigma_{2s} &= \frac{1}{8}(y^3 - y^2 + 2y + 2)\mathrm{e}^{-y} \quad \left(y = \frac{3x}{2}\right) \\
\sigma_{3s} &= \frac{1}{108}(x^5 - 7x^4 + 20x^3 - 12x^2 + 12x + 12)\mathrm{e}^{-x} \\
\sigma_{3p} &= \frac{1}{216}(x^5 - 3x^4 + 4x^3 + 12x^2 + 24x + 24)\mathrm{e}^{-x} \\
\sigma_{3d} &= \frac{1}{1080}(x^5 + 5x^4 + 20x^3 + 60x^2 + 120x + 120)\mathrm{e}^{-x}
\end{aligned}
$$

令 $\tau(x) = 216\,\sigma(x)\mathrm{e}^{x}$,

$$
\begin{aligned}
\tau_{2s} &= 27(y^3 - y^2 + 2y + 2)\mathrm{e}^{-y/3} \\
\tau_{3s} &= 2(x^5 - 7x^4 + 20x^3 - 12x^2 + 12x + 12) \\
\tau_{3p} &= x^5 - 3x^4 + 4x^3 + 12x^2 + 24x + 24 \\
\tau_{3d} &= \frac{1}{5}(x^5 + 5x^4 + 20x^3 + 60x^2 + 120x + 120)
\end{aligned}
$$

作出 τ_{2s}, τ_{3s}, τ_{3p}, τ_{3d} 的图如下:



由图上看出, $\tau_{3s}-\tau_{2s}$, $\tau_{3p}-\tau_{2s}$, $\tau_{3d}-\tau_{2s}$ 均只有一个零点, 且在零点处 $u_0^2\neq v_0^2$. 由于 $I_0(r)$ 的零点即为 $\tau_{3s}-\tau_{2s}$, $\tau_{3p}-\tau_{2s}$, $\tau_{3d}-\tau_{2s}$ 的零点, 故满足定理的全部条件. 证毕.

3. 中心势场中的粒子受到非中心微扰势作用后能级关于 m 的简并的分裂

设微扰势为 $\lambda V(\vec{r})$, V 满足: 当 $\theta\to 0$ 或 $\theta\to\pi$ 时, $V\sin^{2-\delta}\theta\to 0$, $\dfrac{\partial V}{\partial\theta}\sin^{3-\delta}\theta\to 0$, $\dfrac{\partial^2 V}{\partial\theta^2}\sin^{4-\delta}\theta\to 0$, $\dfrac{\partial V}{\partial\phi}\sin^{2-\delta}\theta\to 0$, $\dfrac{\partial^2 V}{\partial\phi^2}\sin^{3-\delta}\theta\to 0$ $(\delta>0)$, 且存在 α, 使 $\lim\limits_{r\to\infty}\dfrac{V}{r^\alpha}=0$.

由于考虑的能级的 n_r, l 相同, 故下面略去下标 n_r, l.

令 $\Delta_m=\lim\limits_{\lambda\to 0}\dfrac{E_{m+1}(\lambda)-E_m(\lambda)}{\lambda}$, 则 $\Delta_m=\lim\limits_{\lambda\to 0}\dfrac{\langle\lambda V\rangle_{m+1}-\langle\lambda V\rangle_m}{\lambda}=\langle V\rangle_{m+1}-\langle V\rangle_m$, Δ_m 的正负就决定了能级的次序.

记 $L_\pm=L_x\pm \mathrm{i}L_y$, 则 $\bar{L}_+=-L_-$, $\bar{L}_-=-L_+$ ($\bar{L}_+$ 表示 L_+ 的复共轭).

$$L_+\psi_m=C_m\psi_{m+1}$$
$$L_-\psi_{m+1}=C_m\psi_m$$

其中 $C_m=\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\hbar$.

下面令 $\zeta=\cos\theta$.

$$\begin{aligned}\langle V\rangle_m&=C\iiint\left|R_{n_r,l}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}(1-\zeta^2)^{|m|/2}\frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}\zeta^{l+|m|}}(1-\zeta^2)^l\right|^2V(\vec{r})r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\\&=C\iiint|R_{n_r,l}|^2V(\vec{r})\left|\frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}\zeta^{l+|m|}}(1-\zeta^2)^l\right|^2\sin^{|m|+1}\theta\,r^2\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\end{aligned}$$

利用 V 在 $\theta\to 0,\pi$ 时的条件得积分收敛.

下面先考虑 $m \le -1$ 的情形.

$$\begin{aligned}\Delta_m &= \int \bar{\psi}_{m+1} V \psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau - \int \bar{\psi}_m V \psi_m\,\mathrm{d}\tau \\ &= \frac{1}{C_m}\int \overline{L_+\psi_m} V \psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau - \int \bar{\psi}_m V \psi_m\,\mathrm{d}\tau\end{aligned}$$

在球坐标中,

$$\begin{aligned}L_+\psi &= \hbar \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \mathrm{i}\hbar\cot\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\frac{\partial\psi}{\partial\phi} \\ L_-\psi &= -\hbar \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \mathrm{i}\hbar\cot\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\frac{\partial\psi}{\partial\phi}\end{aligned}$$

对 $\displaystyle\int \overline{L_+\psi_m} V \psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau$ 分部积分得

$$\begin{aligned}&\int \overline{L_+\psi_m} V \psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau = \int \bar{\psi}_m L_-(V\psi_{m+1})\,\mathrm{d}\tau \\ &+\iint \hbar \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}(\bar{\psi}_m V\psi_{m+1} r^2\sin\theta)\Big|_{\theta=0}^{\pi}\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\phi \\ &-\mathrm{i}\hbar\iint(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\cot\theta\,\bar{\psi}_m V\psi_{m+1})\Big|_{\phi=0}^{2\pi} r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\end{aligned}$$

利用 $\psi_m = CR_{n_r,l}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}(1-\zeta^2)^{|m|/2}\dfrac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}\zeta^{l+|m|}}(1-\zeta^2)^l$ 及 V 满足的条件, 边界上的积分为零, 从而

$$\int \overline{L_+\psi_m} V \psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau = \int \bar{\psi}_m L_-(V\psi_{m+1})\,\mathrm{d}\tau$$

由于 L_- 是一阶微分算子, 上式成为

$$\begin{aligned}&\int \bar{\psi}_m (L_-V)\psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau + \int \bar{\psi}_m V(L_-\psi_{m+1})\,\mathrm{d}\tau \\ &= \int \bar{\psi}_m (L_-V)\psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau + C_m\int \bar{\psi}_m V\psi_m\,\mathrm{d}\tau\end{aligned}$$

代入 Δ_m 的表达式得

$$\Delta_m = \frac{1}{C_m}\int \bar{\psi}_m (L_-V)\psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau$$

令 $\delta_m = C_m^2\Delta_m$, 则

$$\begin{aligned}\delta_m &= C_m\int \bar{\psi}_m (L_-V)\psi_{m+1}\,\mathrm{d}\tau \\ &= \int \bar{\psi}_m (L_-V) L_+\psi_m\,\mathrm{d}\tau\end{aligned} \tag{11}$$

分部积分上式:

$$\begin{aligned}\delta_m =& -\int L_+(\bar{\psi}_m(L_-V))\psi_m\,\mathrm{d}\tau + \hbar\iint \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\bar{\psi}_m(L_-V)\psi_m\,r^2\sin\theta\Big|_{\theta=0}^{\pi}\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\phi \\ &+\mathrm{i}\hbar\iint \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\cot\theta\,\bar{\psi}_m(L_-V)\psi_m\Big|_{\phi=0}^{2\pi} r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\end{aligned}$$

利用 $m \le -1$ 及 V 在 $\theta \to 0, \pi$ 的条件, 边界上的积分均为零, 因此,

$$\delta_m = \int \overline{L_- \psi_m} (L_- V) \psi_m \, \mathrm{d}\tau - \int (L_+ L_- V) |\psi_m|^2 \, \mathrm{d}\tau \tag{12}$$

$m > -l$ 时,

$$\delta_m = C_{m-1} \int \bar{\psi}_{m-1} (L_- V) \psi_m \, \mathrm{d}\tau - \int (L_+ L_- V) |\psi_m|^2 \, \mathrm{d}\tau.$$

由 (11) 式得,

$$\delta_m = \delta_{m-1} - \int (L_+ L_- V) |\psi_m|^2 \, \mathrm{d}\tau. \tag{13}$$

由 (12) 式, 由于 $L_- \psi_l = 0$, 故 $\delta_{-l} = -\int (L_+ L_- V) |\psi_{-l}|^2 \, \mathrm{d}\tau$.

利用递推关系 (13) 得

$$\delta_m = -\sum_{k=-l}^{m} \int (L_+ L_- V) |\psi_k|^2 \, \mathrm{d}\tau \quad (m \le -1) \tag{14}$$

下面再考虑 $m \ge 0$ 的情形.

积分的收敛性与分部积分时边界上为零不再讨论, 结论与前面类似.

$$\begin{aligned}
\Delta_m &= \int \bar{\psi}_{m+1} V \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau - \int \bar{\psi}_m V \psi_m \, \mathrm{d}\tau \\
&= \int \bar{\psi}_{m+1} V \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau - \frac{1}{C_m} \int \overline{L_- \psi_{m+1}} V \psi_m \, \mathrm{d}\tau \\
&= \int \bar{\psi}_{m+1} V \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau - \frac{1}{C_m} \int \bar{\psi}_{m+1} L_+ (V \psi_m) \, \mathrm{d}\tau \\
&= \int \bar{\psi}_{m+1} V \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau - \frac{1}{C_m} \int \bar{\psi}_{m+1} (L_+ V) \psi_m \, \mathrm{d}\tau - \frac{1}{C_m} \int \bar{\psi}_{m+1} V L_+ \psi_m \, \mathrm{d}\tau \\
&= -\frac{1}{C_m} \int \bar{\psi}_{m+1} (L_+ V) \psi_m \, \mathrm{d}\tau \\
&= -\frac{1}{C_m^2} \int \bar{\psi}_{m+1} (L_+ V) L_- \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau
\end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned}
\delta_m = C_m^2 \Delta_m &= -\int \bar{L}_+ (\bar{\psi}_{m+1} (L_+ V)) \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau \\
&= \int L_- (\bar{\psi}_{m+1} (L_+ V)) \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau \\
&= \int (L_- L_+ V) |\psi_{m+1}|^2 \, \mathrm{d}\tau - \int \overline{L_+ \psi_{m+1}} (L_+ V) \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau \\
&= \int (L_- L_+ V) |\psi_{m+1}|^2 \, \mathrm{d}\tau - C_{m+1} \int \bar{\psi}_{m+2} (L_+ V) \psi_{m+1} \, \mathrm{d}\tau
\end{aligned}$$

由 (15) 式

$$\delta_m = \delta_{m+1} + \int (L_- L_+ V) |\psi_{m+1}|^2 \, \mathrm{d}\tau \quad (m \ge 0) \tag{16}$$

由于 $L_+\psi_l = 0$, 故 $\delta_{l-1} = \displaystyle\int (L_- L_+ V)|\psi_k|^2 \,\mathrm{d}\tau$, 从而由递推关系 (16) 得

$$\delta_m = \sum_{k=m+1}^{l} \int (L_- L_+ V)|\psi_k|^2 \,\mathrm{d}\tau$$

δ_m 是实数, 故

$$\begin{aligned} \delta_m = \bar{\delta}_m &= \sum_{k=m+1}^{l} \int (\bar{L}_- \bar{L}_+ V)|\psi_k|^2 \,\mathrm{d}\tau \\ &= \sum_{k=m+1}^{l} \int (L_+ L_- V)|\psi_k|^2 \,\mathrm{d}\tau \quad (m \geq 0) \end{aligned} \tag{17}$$

在球坐标中,

$$\begin{aligned} L_+ L_- V &= \hbar^2 \Big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i} \cot\theta \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \frac{\partial}{\partial\phi} \Big) \Big(-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{i} \cot\theta \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \frac{\partial}{\partial\phi} \Big) V \\ &= \hbar^2 \Big(\frac{\partial^2 V}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial V}{\partial\theta} + \cot^2\theta \frac{\partial^2 V}{\partial\phi^2} + \mathrm{i} \frac{\partial V}{\partial\phi} \Big) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle L_+ L_- V \rangle_m &= \iiint (L_+ L_- V)|\psi_m|^2 r^2 \sin\theta \,\mathrm{d}r \,\mathrm{d}\theta \,\mathrm{d}\phi \\ &= \iiint |R_{n_r,l}(r)|^2 |P_l^m(\cos\theta)|^2 (L_+ L_- V) r^2 \sin\theta \,\mathrm{d}r \,\mathrm{d}\theta \,\mathrm{d}\phi \\ &= -\hbar^2 \Big\langle \frac{\partial^2 V}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial V}{\partial\theta} \Big\rangle_m \end{aligned}$$

令 $W = \dfrac{\partial^2 V}{\partial\theta^2} + \cot\theta \dfrac{\partial V}{\partial\theta}$, $\zeta = \cos\theta$, 则 $W = \dfrac{\partial}{\partial\zeta}\Big((1-\zeta^2)\dfrac{\partial V}{\partial\zeta}\Big)$. 由 (14), (17) 式得

定理 3: 设 V 满足前面所要求的条件. 若 $W < 0$, 则 $E_{-l} > E_{-l+1} > \cdots > E_0$, $E_l > E_{l-1} > \cdots > E_0$. 若 $W > 0$, 则 $E_{-l} < E_{-l+1} < \cdots < E_0$, $E_l < E_{l-1} < \cdots < E_0$.

3 其他工作

Grosse 与 Martin 对势 $-\dfrac{1}{r} + \lambda V$ 及 $r^2 + \lambda V(r)$ 给出了能级次序的判别条件[4], 我曾经试图将其中关于库仑势的结果推广到其他势中, 但结果未成功, 而得到了下面的结果.

对势场 $V_0(r) + \lambda W(r)$, V_0 满足: 若 l 态存在能量为 E 的态, 则 $l+1$ 态必存在能量为 E 的态 (库仑势自然满足), 那么可以证明, 如果存在角动量 “产生”、“湮灭” 算子 $A_l^\dagger$, A_l (见关于 [4] 的介绍部分), 且 $A_l^\dagger$, A_l 为一阶线性微分算子, 则 $V_0(r)$ 必为库仑势. 证明如下:

设 $A_l=-\phi_l(r)\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\mu_l(r)-\dfrac{1}{2}\dfrac{\mathrm{d}\phi_l(r)}{\mathrm{d}r}$, 则 $A_l^\dagger=\phi_l(r)\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\mu_l(r)+\dfrac{1}{2}\dfrac{\mathrm{d}\phi_l(r)}{\mathrm{d}r}$.

Hamilton 算子为 $H_l=-\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V_0(r)+\dfrac{l(l+1)}{r^2}$. 记 $H_l=-\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V_l(r)$, $V_l(r)=V_0(r)+\dfrac{l(l+1)}{r^2}$, $\delta_l(r)=\dfrac{2(l+1)}{r^2}$, 则 $V_{l+1}=V_l+\delta_l$.

$$
\begin{aligned}
&[H_l,A_l]=\Big[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V_l,\ -\phi_l\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\mu_l-\frac{1}{2}\phi_l'\Big]\\
&=\Big(-\frac{2\phi_l''}{\phi_l}+\frac{2\mu_l'}{\phi_l}\Big)A_l-2\phi_l'H_{l+1}+\phi_lV_l'-\mu_l''+\frac{1}{2}\phi_l'''+2\phi_l'V_l\\
&\quad+2\phi_l'\delta_l+\frac{1}{\phi_l}(2\mu_l-\phi_l')(\phi_l''-\mu_l')
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&[H_l,A_l^\dagger]=\Big[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V_l,\ \phi_l\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\mu_l+\frac{1}{2}\phi_l'\Big]\\
&=\Big(-\frac{2\phi_l''}{\phi_l}-\frac{2\mu_l'}{\phi_l}\Big)A_l^\dagger+2\phi_l'H_l-\phi_lV_l'-\mu_l''-\frac{1}{2}\phi_l'''-2\phi_l'V_l\\
&\quad+\frac{1}{\phi_l}(2\mu_l+\phi_l')(\phi_l''+\mu_l')
\end{aligned}
$$

作用在具体的态上得

$$
\begin{aligned}
&H_lA_l\,|n,l+1\,\rangle=[H_l,A_l]\,|n,l+1\,\rangle+A_l(H_{l+1}-\delta_l)\,|n,l+1\,\rangle\\
&\qquad=\lambda A_l\,|n,l+1\,\rangle+\xi\,|n,l+1\,\rangle\\
&H_{l+1}A_l^\dagger\,|n,l\,\rangle=[H_l,A_l^\dagger]\,|n,l\,\rangle+A_l^\dagger H_l\,|n,l\,\rangle+\delta_lA_l^\dagger\,|n,l\,\rangle\\
&\qquad=\eta A_l^\dagger\,|n,l\,\rangle+\zeta\,|n,l\,\rangle
\end{aligned}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
&\lambda=-\frac{2\phi_l''}{\phi_l}+\frac{2\mu_l'}{\phi_l}+\mathcal{E}_n-\delta_l\\
&\xi=-2\mathcal{E}_n\phi_l'+\phi_lV_l'-\mu_l''+\frac{1}{2}\phi_l'''+2\phi_l'V_l+\frac{2\mu_l\phi_l''}{\phi_l}-\frac{\phi_l'\phi_l''}{\phi_l}\\
&\qquad-\frac{2\mu_l\mu_l'}{\phi_l}+\frac{\mu_l'\phi_l'}{\phi_l}+2\phi_l'\delta_l+\phi_l\delta_l'\\
&\eta=-\frac{2\phi_l''}{\phi_l}-\frac{2\mu_l'}{\phi_l}+\mathcal{E}_n+\delta_l\\
&\zeta=2\mathcal{E}_n\phi_l'-\phi_lV_l'-\mu_l''-\frac{1}{2}\phi_l'''-2\phi_l'V_l+\frac{2\mu_l\phi_l''}{\phi_l}+\frac{\phi_l'\phi_l''}{\phi_l}\\
&\qquad+\frac{2\mu_l\mu_l'}{\phi_l}+\frac{\mu_l'\phi_l'}{\phi_l}
\end{aligned}
$$

由于 $A_l\,|n,l+1\,\rangle$ 是 H_l 的本征态, $A_l^\dagger\,|n,l\,\rangle$ 是 H_{l+1} 的本征态, 所以, λ, η 为常数,

$\xi=\zeta=0.$

$$\frac{1}{2}(\lambda+\eta)=-\frac{2\phi_l''}{\phi_l}+\mathcal{E}_n=\text{常数} \tag{18}$$

$$\frac{1}{2}(\lambda-\eta)=\frac{2\mu_l'}{\phi_l}-\delta_l=\text{常数} \tag{19}$$

$$\frac{1}{2}(\xi+\zeta)=-\mu_l''+\frac{2\mu_l\phi_l''}{\phi_l}+\frac{\mu_l'\phi_l'}{\phi_l}+\phi_l'\delta_l+\frac{1}{2}\phi_l\delta_l'=0 \tag{20}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(\xi-\zeta)=&-2\mathcal{E}_n\phi_l'+\phi_lV_l'+\frac{1}{2}\phi_l'''+2\phi_l'V_l-\frac{\phi_l'\phi_l''}{\phi_l}\\&-\frac{2\mu_l\mu_l'}{\phi_l}+\phi_l'\delta_l+\frac{1}{2}\phi_l\delta_l'=0\end{aligned} \tag{21}$$

由 (18), (19) 得

$$\phi_l''=P\phi_l \tag{22}$$

$$\mu_l'=\frac{1}{2}\phi_l\delta_l+Q\phi_l \tag{23}$$

(P, Q 为常数).

(22), (23) 代入 (20) 得

$$\Big(\frac{1}{2}\delta_l-Q\Big)\phi_l'=2P\mu_l$$

两边求导, 并利用 (23) 式得

$$\frac{1}{2}\delta_l'\phi_l'=\Big(\frac{1}{2}P\delta_l+3PQ\Big)\phi_l$$

将 $\phi_l=\frac{2(l+1)}{r^2}$ 代入得

$$\phi_l'=-\frac{Pr^3}{2(l+1)}\Big(\frac{l+1}{r^2}+3Q\Big)\phi_l \tag{24}$$

由 (22) 式, $P\neq 0$ 时, ϕ_l 为指数函数或三角函数, 不满足 (24) 式, 故只有 $P=0$, 从而 $\phi_l'=0$, ϕ_l 为常数. 不妨设 $\phi_l=1$.

由 (23) 式,

$$\mu_l'=\frac{l+1}{r^2}+Q$$

$$\mu_l=-\frac{l+1}{r}+Qr+R\quad (R\text{ 为常数})$$

将 $\phi_l=1$ 代入 (21) 式得

$$\begin{aligned}V_l'&=2\mu_l\mu_l'-\frac{1}{2}\phi_l\delta_l'\\&=-\frac{2l(l+1)}{r^3}+\frac{2R(l+1)}{r^2}+2Q^2r+2QR\end{aligned}$$

$$V_l=\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2R(l+1)}{r}+Q^2r^2+2QRr+S\quad (S\text{ 为常数})$$

$$V_0=V_l-\frac{l(l+1)}{r^2}=-\frac{2R(l+1)}{r}+Q^2r^2+2QRr+S$$

令 $2R(l+1)=\sigma$, 则

$$V_0 = -\frac{\sigma}{r} + Q^2 r^2 + \frac{\sigma Q}{l+1} r + S$$

V_0 应与角量子数 l 无关, 故 $\sigma Q = 0$.

当 $\sigma = 0$ 时, $V_0 = Q^2 r^2 + S$, 是谐振子势, 但不满足前面对 V_0 的要求 (因为谐振子的主量子数 $n = 2n_r + l$, 若 l 态有 $\mathcal{E}$ 能级, 则 $l+1$ 态必无 $\mathcal{E}$ 能级).

所以只有 $Q=0$, $V_0 = -\dfrac{\sigma}{r} + S$, 即为库仑势. 证毕.

4 结论

本文主要给出了三个结果, 即定理 1, 2, 3, 分别讨论了原点波函数、能级间隔与能级分裂.

粒子的寿命与原点波函数有关, 根据粒子物理的计算, 对 s 态, $\tau \sim |\psi_s(0)|^2$, 对 p 态, 如考虑双胶子交换, $\tau \sim |\psi'_p(0)|^2$, 因此原点波函数的大小就相当于粒子寿命的长短. 定理 1 是 Martin 的结论的推广, 它适用于 $l \geq 1$ 的态, 它给出的结果使 $V(r)$ 的理论模型直接与粒子寿命的实验数据取得联系.

定理 2, 3 是关于能级的微扰结果. 定理 2 是对 [4] 的推广, 它可对许多目前常用的势, 如 $-\dfrac{1}{r} + \lambda \ln r$, $-\dfrac{1}{r} + \lambda r^\alpha$ $(-1 < \alpha < 0$ 或 $\alpha > 0)$ 等给出能级间隔随 λ 的变化情况. 定理 3 对微扰势的要求比较高, 目前尚未找到它的应用.

参考文献

1. A. Martin, Phys. Lett. 67B (1977) 330
2. H. Grosse, Phys. Lett. 68B (1977) 343
3. G. Feldman, T. Fulton, A. Devoto, Nucl. Phys. B154 (1974) 441
4. H. Grosse, A. Martin, Phys. Lett. 134B (1984) 368
5. 苏汝铿、梁俊, 高能物理与核物理 5 (1981) 694
6. A. Martin, Phys. Lett. 70B (1977) 192
7. R. P. Feynman, Phys. Rev. 56 (1939) 340