文章编号: 1000-5641(2019)02-0097-09

对微扰论波函数的非正交修正

申佳音, 薛 迅

(华东师范大学 物理与材料科学学院, 上海 200241)

摘要: 不含时微扰论对非简并能级的修正是相当精确的, 然而对波函数的修正精度却不能令人满意. 经过审视微扰论的推导过程, 可以发现, 造成这一精度差异的原因或许就是“正交性假设”. “正交性假设”, 即零阶以上的任意阶修正波函数与零阶波函数都正交, 是建立微扰论的过程中习惯上使用的一个附加条件. 详细探讨了“正交性假设”, 并利用波函数的归一化属性得到了关于高阶修正波函数的一个约束条件, 而这个条件暗示了在二阶及以上精度不适合继续使用“正交性假设”. 可以证明, 在不引入“正交性假设”的情况下, 能级修正的结果和正交情况是完全一致的, 但是修正波函数的结果与正交情况却出现了不容忽视的差异. 这个现象可以合理解释之前的精度问题. 作为一个具体示例, 计算了匀强电场中一维带电谐振子系统的前三阶非正交修正波函数. 对比此系统的解析解, 可以发现波函数的非正交修正比正交修正确实具有更高的精度. 简单探讨了推广到简并微扰论的情况, 结合近期 Stark 问题的进展, 给出了检验非正交微扰修正的思路.

关键词: 不含时微扰论; 非简并能级修正; 波函数修正; 正交性假设

中图分类号: O413.1 **文献标志码**: A **DOI:** 10.3969/j.issn.1000-5641.2019.02.010

Non-orthogonal corrections to wave functions in perturbation theory

SHEN Jia-yin, XUE Xun

(*School of Physics and Materials Science*, *East China Normal University*, *Shanghai* 200241, *China*)

Abstract: Time-independent perturbation theory is fairly accurate for the correction of non-degenerate energy levels, but its accuracy is not satisfactory for the correction of wave functions. After examining the derivation process of perturbation theory, it was found that the reason for the difference in precision may be related to the Orthogonality Assumption. The Orthogonality Assumption — an arbitrary-order modified wave function above zero order is orthogonal to the zero-order wave function — is a condition used in establishing perturbation theory. This paper explored the Orthogonality Assumption in detail and obtained a constraint condition on higher-order modified wave functions by using the normalized properties of the wave function; this condition implies that the accuracy

收稿日期: 2018-03-06

基金项目: 国家自然科学基金(11435005, 11775080)

第一作者: 申佳音, 男, 硕士研究生, 研究方向为粒子物理与场论. E-mail: 2932334115@qq.com.

通信作者: 薛 迅, 男, 教授, 研究方向为粒子物理与场论. E-mail: xxue@phy.ecnu.edu.cn.

at second-order and above is not suitable for use with the Orthogonality Assumption. It can be shown that without introducing the Orthogonality Assumption, the result of the energy level correction is exactly the same as that of the orthogonal situation, but the result of the modified wave function has a difference that cannot be ignored. This phenomenon can reasonably explain the previous accuracy problem. In this paper, the first three-order non-orthogonal corrective wave function of the one-dimensional charged harmonic oscillator system in the homogeneous electric field is taken as a specific example. By comparing the analytical solution of this system, it can be demonstarted that the non-orthogonal correction of the wave function has higher accuracy than the orthogonal correction. The paper briefly discusses generalization to the degenerate perturbation theory. Combined with recent progress on the Stark problem, it offers a possible method to check for correction of non-orthogonal perturbation.

Keywords: time-independent perturbation theory; non-degenerate correct energy level; correct wave function; orthogonality assumption

0 引 言

量子力学创立于 20 世纪初期, 至今已经历了一百多年的严格检验, 并已建立了成熟的公理体系, 与狭义相对论结合形成的量子场论, 达到了前所未有的实验精度. 由于一般情况下, Schrödinger 方程作为二阶偏微分方程, 复杂度极高, 求出其解析解非常困难, 如何寻找方程的近似解就成为一个重要的课题. 在这一方面, 由 Schrödinger 于 1926 年首次提出的微扰论[1], 数学上称之为摄动理论[2-3], 取得了巨大的成功.

然而, 不含时微扰论在推导非简并修正能级和修正波函数的过程中, 习惯上都会直接或间接地使用一个未经证明的条件[4-8], 称之为正交性假设, 其内容是零阶以上的任意高阶修正波函数与零阶波函数都正交.

正交性假设其实是对各阶修正波函数相位的直接规定, 这来源于推导过程中方程数量 (参考式 (10)) 要少于自由度. 我们知道, 如果将波函数整体改变一个相位因子, 相当于重新选择规范, 不会导致任何物理效应[9]. 这是由于规范是我们在描述实际物理系统时的冗余自由度, 物理系统都应具有规范不变性. 但是, 规范一旦被选择, 那么相互关联的波函数都应该使用这个基准, 因为它们之间的相对相位是不可以随便更改的. 实际物理系统的波函数是所有阶修正波函数的累加, 修正波函数之间的相对相位是固定的, 一旦整体波函数的相位被确定, 各阶修正波函数的绝对相位也都随之被确定下来, 不具有过多的可选择的余地. 因此, 正交性假设并不显然也不是很自然. 而习惯于使用正交性假设的一个原因就是, 正交性假设可以保证修正波函数归一化到一阶精度[10](参考式(8)). 但是, 由于实际物理系统的复杂性, 并没有对微扰论展开级数的敛散性的通用判别方法, 甚至都不能保证级数收敛 (不收敛的情况称为非正则微扰), 且高阶修正项也未必是小量, 比如用微扰论计算非谐振子的基态能级, 从 19 项开始级数出现正负交错的现象, 而级数的前 4 项和才最接近于真值[11]. 著名物理学家汤川秀树在文献 [11] 中指出, 根据正交性假设确定的波函数一般并不是归一化的. 经过分析, 正交性假设在二阶以上的精度就开始失效. 从二阶开始积累的归一化误差可能会造成可观测效应, 只保证修正波函数的一阶归一化略显不够.

另一方面, 使用微扰论对能级的修正往往能到达令人惊讶的精确程度, 但是对波函数的

修正精度却不能令人满意[10]. 本文猜测, 这可能就是归一化误差的积累带来的效应. 与能级不同, 波函数并不是直接可观测的. 修正能级的高精度加上“正交性假设”对计算带来的极大便利性, 使人们忽略了“正交性假设”带来的问题. 本文在后面将证明, 如果在使用非简并微扰论时不引入正交性假设, 而进行一般化的讨论, 那么修正能级的结果和原来正交修正的情况完全相同, 但是修正波函数的结果却大相径庭. 这似乎可以间接印证本文的猜想.

1 波函数的非正交修正

设 Hamilton 量 $H_0+\lambda V$ 的本征能级和本征波函数为 $(V \ll H_0)$,

$$\varPsi_n(\lambda)=\psi_n^{(0)}+\lambda\psi_n^{(1)}+\cdots+\lambda^k\psi_n^{(k)}+\cdots, \tag{1}$$

$$\mathscr{E}_n(\lambda)=E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\cdots+\lambda^k E_n^{(k)}+\cdots. \tag{2}$$

固定指标 n. 零阶能级 $\mathscr{E}_n(0)$ 非简并, 并要求 $\varPsi_m(\lambda)$ 对于任意的 λ 都是正交归一的. 将 $\psi_n^{(k)}$ 分解为H_0表象下基底 $\psi_m^{(0)}$ 的线性组合 $\psi_n^{(k)}=\sum_m a_m^{(k)}\psi_m^{(0)}$, 其中系数 $a_m^{(k)}$ 满足

$$a_m^{(k)}=\langle\psi_m^{(0)}\mid\psi_n^{(k)}\rangle. \tag{3}$$

显然 $a_m^{(0)}=\delta_{mn}$. 由于指标 n 是固定的, 为简单起见记号 $a_m^{(k)}$ 省略了 n 指标.

“正交性假设”的数学表述为

$$c_n^{(k)}=\left\langle\psi_n^{(0)}\mid\psi_n^{(k)}\right\rangle=0, \quad k=1,2,\cdots, \tag{4}$$

这里 $c_m^{(k)}$ 与 $a_m^{(k)}$ 都由式 (3) 定义, 但 $c_m^{(k)}$ 专门指代式 (4) 成立时的情况.

利用 $\varPsi_n(\lambda)$ 的归一化可以得到对 $a_n^{(k)}$ 的约束,

$$\begin{aligned}1=\langle\varPsi_n(\lambda)\mid\varPsi_n(\lambda)\rangle&=\left\langle\sum_{i=0}^{\infty}\lambda^i\psi_n^{(i)}\,\middle|\,\sum_{j=0}^{\infty}\lambda^j\psi_n^{(j)}\right\rangle\\&=\left\langle\psi_n^{(0)}\mid\psi_n^{(0)}\right\rangle+\sum_{k=1}^{\infty}\lambda^k\sum_{i=0}^{k}\left\langle\psi_n^{(i)}\mid\psi_n^{(k-i)}\right\rangle.\end{aligned} \tag{5}$$

由于 $\psi_n^{(0)}$ 是归一的, λ 是任意的, 所以有

$$\sum_{i=0}^{k}\langle\psi_n^{(i)}\mid\psi_n^{(k-i)}\rangle=0. \tag{6}$$

将式 (6) 在 H_0 表象的基底下展开, 有

$$0=\sum_{i=0}^{k}\left\langle\sum_j a_j^{(i)}\psi_j^{(0)}\,\middle|\,\sum_l a_l^{(k-i)}\psi_l^{(0)}\right\rangle=a_n^{(k)}+a_n^{(k)*}+\sum_{i=1}^{k-1}\left(\sum_j a_j^{(i)*}a_j^{(k-i)}\right), \tag{7}$$

其中 $a_j^{(i)*}$ 表示 $a_j^{(i)}$ 的复共轭, 这里以及后文都默认约定, 对于公式中的求和符号, 当求和上标小于求和下标的时候此求和式为 0.

令 $k=1$ 可以得到

$$a_n^{(1)}+a_n^{(1)*}=0. \tag{8}$$

可见 $a_n^{(1)}$ 的实部 $\Re\left[a_n^{(1)}\right]=0$, $a_n^{(1)}$ 是个纯虚数.

对于 $k=2$, 有

$$a_n^{(2)}+a_n^{(2)*}+\sum_j|a_j^{(1)}|^2=0. \tag{9}$$

由于波函数的一阶修正一般不为 0, 即 $|a_j^{(1)}|^2$ 不全为 0, 所以必有 $a_n^{(2)}\neq 0$. 可见正交性假设在二阶精度上不再严格有效. 继续递推也可以得到相同结论.

所以本文将尝试对比引入与不引入正交性假设的两种情况, 查看正交性假设在波函数与能级的修正中究竟起了什么样的作用.

通过 Schrödinger 方程可以得到 (见文献 [11] 的式 (6.1.9))

$$(E_m^{(0)}-E_n^{(0)})a_m^{(k)}+\sum_j a_j^{(k-1)}V_{mj}=\sum_{i=1}^{k}a_m^{(k-i)}E_n^{(i)},\quad k=1,2,\cdots, \tag{10}$$

其中$V_{mj}=\langle\psi_m^{(0)}|\psi_j^{(0)}\rangle$.

对于 $m=n$, 式 (10) 可以得出修正能级的首项和递推关系, 即

$$\begin{cases}E_n^{(1)}=V_{nn},\\ E_n^{(k)}=\sum\limits_{j\neq n}a_j^{(k-1)}V_{nj}-\sum\limits_{i=2}^{k-1}a_n^{(k-i)}E_n^{(i)},\quad k=2,3,\cdots\end{cases} \tag{11}$$

对于 $m\neq n$, 式 (10) 可以得出修正波函数的首项和递推关系, 即

$$\begin{cases}a_m^{(1)}=\dfrac{V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}},\\ a_m^{(k)}=\dfrac{1}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\Big(\sum\limits_{i=1}^{k-1}a_m^{(k-i)}E_n^{(i)}-\sum\limits_j a_j^{(k-1)}V_{mj}\Big),\quad k=2,3,\cdots\end{cases} \tag{12}$$

注意到式 (12) 并不包含 $a_n^{(k)}$ 的递推关系, 但是 $a_n^{(k)}$ 却会对所有高阶的 $a_m^{(k+1)}$ 产生影响, 所以不确定 $a_n^{(k)}$ 就无法确定修正波函数. 正交性假设就是对 $a_n^{(k)}$ 的一种直接指定, 但是这种指定却不满足约束条件式 (7). 根据式 (7) 显然可以发现更好的指定, 比如规定 $a_n^{(k)}$ 的虚部为 0 而不是 $a_n^{(k)}$ 为 0, 后文将根据这种指定计算一个具体的实例.

把正交性假设下的修正能级记做 $\varepsilon_n^{(k)}$, 把修正波函数 $\phi_n^{(k)}$ 在 H_0 表象下的分量记做 $\phi_n^{(k)}=c_m^{(k)}\psi_n^{(0)}$. 将正交性假设 $c_n^{(l)}=0$ 代入式 (11) 和式 (12), 就可以得到 (文献 [11] 已经给出过类似的递推序列形式),

- 修正能级

$$\begin{cases}\varepsilon_n^{(1)}=V_{nn},\\ \varepsilon_n^{(k)}=\sum\limits_{j\neq n}c_j^{(k-1)}V_{nj},\quad k=2,3,\cdots\end{cases} \tag{13}$$

- 修正波函数

$$\begin{cases}c_m^{(1)}=\dfrac{V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}},\\ c_m^{(k)}=\dfrac{1}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\Big(\sum\limits_{i=1}^{k-1}c_m^{(k-i)}\varepsilon_n^{(i)}-\sum\limits_{j\neq n}c_j^{(k-1)}V_{mj}\Big),\\ \qquad m\neq n,\quad k=2,3,\cdots\end{cases} \tag{14}$$

那么修正波函数 $c_m^{(k)}$ 和 $a_m^{(k)}$ 之间的关系, 以及修正能级 $\varepsilon_n^{(k)}$ 和 $E_n^{(k)}$ 之间的关系, 可以由下述式 (15) 清晰地展示出来.

对于所有 $k=1,2,\cdots$ 和 $m\neq n$, 有

$$\begin{cases} a_m^{(k)}-c_m^{(k)}=\displaystyle\sum_{i=1}^{k-1}a_n^{(i)}c_m^{(k-i)}, \\ E_n^{(k)}=\varepsilon_n^{(k)}. \end{cases} \tag{15}$$

式 (15) 显示了 $a_n^{(k)}$ 对高阶的 $a_m^{(k+1)}$ 的影响. 可以看出, 修正波函数确实产生了很大的偏离, 而修正能级的结果与 $a_n^{(k)}$ 的指定无关.

下面利用数学归纳法给出式 (15) 的证明.

式 (11)、式 (12)、式 (13)、式 (14) 的首项已经给出了 $k=1$ 时命题成立. 当 $k>1$ 时, 假设式 (15) 对于 $1,\cdots,k-1$ 成立, 所以只需证明其对 k 成立.

用式 (12) 减去式 (14), 有

$$\begin{aligned} a_m^{(k)}-c_m^{(k)} &= \frac{1}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\Big(\sum_{i=1}^{k-2}(a_m^{(k-i)}-c_m^{(k-i)})E_n^{(i)}-\sum_{j\neq n}(a_j^{(k-1)}-c_j^{(k-1)})V_{mj}-a_n^{(k-1)}V_{mn}\Big) \\ &= \frac{1}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\Big(\sum_{i=1}^{k-2}\sum_{l=1}^{k-i-1}a_n^{(l)}c_m^{(k-i-l)}E_n^{(i)}-\sum_{j\neq n}\sum_{i=1}^{k-2}a_n^{(i)}c_j^{(k-1-i)}V_{mj}\Big)+a_n^{(k-1)}c_m^{(1)} \\ &= \frac{1}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\Big(\sum_{i=1}^{k-2}a_n^{(i)}\sum_{l=1}^{k-i-1}c_m^{(k-i-l)}E_n^{(l)}-\sum_{i=1}^{k-2}a_n^{(i)}\sum_{j\neq n}c_j^{(k-i-1)}V_{mj}\Big)+a_n^{(k-1)}c_m^{(1)} \\ &= \sum_{i=1}^{k-1}a_n^{(i)}c_m^{(k-i)}. \end{aligned} \tag{16}$$

用式 (11) 减去式 (13), 有

$$\begin{aligned} E_n^{(k)}-\varepsilon_n^{(k)} &= \sum_{j\neq n}(a_j^{(k-1)}-c_j^{(k-1)})V_{nj}-\sum_{i=2}^{k-1}a_n^{(k-i)}E_n^{(i)} \\ &= \sum_{j\neq n}\sum_{i=1}^{k-2}a_n^{(i)}c_j^{(k-1-i)}V_{nj}-\sum_{i=2}^{k-1}a_n^{(k-i)}E_n^{(i)} \\ &= \sum_{i=2}^{k-1}a_n^{(k-i)}\sum_{j\neq n}c_j^{(i-1)}V_{nj}-\sum_{i=2}^{k-1}a_n^{(k-i)}E_n^{(i)} \\ &= \sum_{i=2}^{k-1}a_n^{(k-i)}(\varepsilon_n^{(i)}-E_n^{(i)})=0. \end{aligned} \tag{17}$$

综合式 (16) 和式 (17), 就证明了式 (15).

2 示例: 匀强电场中的谐振子

这一节将通过计算一个实例, 来展示取消正交性假设后修正波函数的改变. 首先利用式

(14) 将正交性假设下微扰论的前三阶修正结果具体写出, 即

$$c_m^{(2)}=\sum_{j\neq n}\frac{V_{mj}V_{jn}}{(E_n^{(0)}-E_j^{(0)})(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})}-\frac{V_{mn}V_{nn}}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2}, \tag{18}$$

$$\begin{aligned}c_m^{(3)}=&\frac{V_{mn}V_{nn}^2}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^3}+\sum_{j,l\neq n}\frac{V_{mj}V_{jl}V_{ln}}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})(E_n^{(0)}-E_j^{(0)})(E_n^{(0)}-E_l^{(0)})}\\&-\sum_{j\neq n}\frac{V_{mj}V_{jn}V_{nn}}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})(E_n^{(0)}-E_j^{(0)})^2}-\sum_{j\neq n}\frac{V_{mj}V_{jn}V_{nn}+V_{mn}V_{nj}V_{jn}}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2(E_n^{(0)}-E_j^{(0)})}.\end{aligned} \tag{19}$$

根据式 (15), 不引入正交性假设的情况下应该在上面两式的结果上添加修正项

$$\begin{cases}a_m^{(2)}=c_m^{(2)}+a_n^{(1)}c_m^{(1)},\\ a_m^{(3)}=c_m^{(3)}+a_n^{(1)}c_m^{(2)}+a_n^{(2)}c_m^{(1)}.\end{cases} \tag{20}$$

目前只知道 $a_n^{(1)}$ 是纯虚数, 并没有更多的条件确定 $a_n^{(1)}$ 的虚部, 我们将所有 $a_n^{(k)}$ 的虚部都直接指定为 0. 这一指定并非仅仅为了简便, 对于接下来要计算的匀强电场中的带电谐振子系统, 所有的修正结果都取值在实数域 $\mathbb{R}$ 中, 因此虚部必须为 0.

式 (8) 加上虚部为 0 的指定可以得到 $a_n^{(1)}=0$, 从而 $a_m^{(2)}=c_m^{(2)}$. 再利用式 (9), 有

$$\begin{cases}a_n^{(2)}=-\dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{j\neq n}|c_j^{(1)}|^2=-\dfrac{1}{2}\sum_{j\neq n}\frac{V_{nj}V_{jn}}{(E_n^{(0)}-E_j^{(0)})^2},\\ a_m^{(3)}=c_m^{(3)}-\dfrac{1}{2}\dfrac{V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\displaystyle\sum_{j\neq n}\frac{V_{nj}V_{jn}}{(E_n^{(0)}-E_j^{(0)})^2}.\end{cases} \tag{21}$$

最后, 在式 (7) 代入 $k=3$, 再次利用虚部为 0 的指定, 有

$$a_n^{(3)}=-\frac{1}{2}\sum_{j\neq n}c_j^{(1)*}c_j^{(2)}+c_j^{(2)*}c_j^{(1)}=-\sum_{j\neq n}\Re[c_j^{(1)*}c_j^{(2)}]. \tag{22}$$

这样就得到了前三阶所有修正项的表达式.

利用上面的结果, 本文考虑一个具有解析解的系统: 匀强电场 E 中的带电荷 q 的一维谐振子. Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{\mu\omega^2}{2}x^2+qEx, \tag{23}$$

其中 $H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{\mu\omega^2}{2}x^2$ 是一维谐振子系统, 如果电场 E 较弱则 $V=qEx$ 是微扰作用. 通过代换 $x\to\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}x$, $H\to\hbar\omega H$ 可以使变量和方程无量纲化. 此时 Hamilton 量简化为

$$H=-\frac{1}{2}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}x^2+\epsilon x, \tag{24}$$

其中 $\epsilon=\sqrt{\frac{q^2E^2}{\mu\hbar\omega^3}}$. 此时 $V=\epsilon x$. 我们知道 H_0 的本征值为 $E_n^{(0)}=n+\frac{1}{2}$, 其对应的归一化本征波函数 $\psi_n^{(0)}(x)$为[8,11]

$$\psi_n^{(0)}(x)=\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}\pi^{-\frac{1}{4}}\exp\Big(-\frac{x^2}{2}\Big)H_n(x), \tag{25}$$

这里 $H_n(x)$ 是 Hermite 多项式, 即

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(e^{-x^2}). \tag{26}$$

Hamilton 量式 (24) 是有解析解的[8], 只需要对谐振子系统进行一个空间平移变换 $x'=x+\epsilon$, 就有 $\psi_n(x)=\psi_n^{(0)}(x')$, 能级对应于 $E_n=E_n^{(0)}-\frac{\epsilon^2}{2}=n+\frac{1}{2}(1-\epsilon^2)$. 为了简化讨论, 以下固定 $n=0$, 即只考虑基态波函数 $\psi_0^{(0)}(x)$ 的修正 $\psi_0(x)$. 通过解析解可以得到波函数 $\psi_0(x)$ 精确的幂级数展开, 即

$$\psi_0(x)=\psi_0^{(0)}(x+\epsilon)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\epsilon^k}{k!}\cdot\frac{\mathrm{d}^k\psi_0^{(0)}}{\mathrm{d}x^k}(x). \tag{27}$$

前三阶的精确修正为

$$\begin{cases}\epsilon\dfrac{\mathrm{d}\psi_0^{(0)}}{\mathrm{d}x}(x)=-\pi^{-\frac{1}{4}}\epsilon x\exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big),\\ \dfrac{\epsilon^2}{2!}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_0^{(0)}}{\mathrm{d}x^2}(x)=\pi^{-\frac{1}{4}}\dfrac{\epsilon^2}{2}(x^2-1)\exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big),\\ \dfrac{\epsilon^3}{3!}\dfrac{\mathrm{d}^3\psi_0^{(0)}}{\mathrm{d}x^3}(x)=-\pi^{-\frac{1}{4}}\dfrac{\epsilon^3}{6}(x^3-3x)\exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big).\end{cases} \tag{28}$$

将引入与不引入正交性假设的两种微扰论的前三阶修正结果与式 (28) 对比, 可以清晰地看出二者的区别.

设$\langle a|,\langle b|$是对应于能级$E_a^{(0)}$、$E_b^{(0)}$的零阶波函数, 则矩阵元V_{ab}为[11]

$$V_{ab}=\epsilon\langle a\mid x\mid b\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{b+1}\,\delta_{a,b+1}+\sqrt{b}\,\delta_{a,b-1}). \tag{29}$$

因此从式 (18)、式 (19)、式 (29) 可以看出, $c_m^{(1)}$ 中 $m\neq 1$ 时必然为 0, $c_m^{(2)}$ 中 $m\neq 2$ 时必然为 0, $c_m^{(3)}$ 中 $m\neq 1,3$ 时必然为 0, 即

$$\begin{cases}c_1^{(1)}=-\dfrac{\epsilon}{\sqrt{2}},\\ c_2^{(2)}=\dfrac{\epsilon^2}{2\sqrt{2}},\\ c_1^{(3)}=0,\\ c_3^{(3)}=-\dfrac{\epsilon^3}{4\sqrt{3}}.\end{cases} \tag{30}$$

因此,

$$\begin{cases}\phi_0^{(1)}=c_1^{(1)}\psi_1^{(0)},\\ \phi_0^{(2)}=c_2^{(2)}\psi_2^{(0)},\\ \phi_0^{(3)}=c_3^{(3)}\psi_3^{(0)}.\end{cases} \tag{31}$$

利用式 (25) 可得能够用到的 H_0 的本征波函数, 为

$$\begin{cases} \psi_0^{(0)}(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big), \\ \psi_1^{(0)}(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \sqrt{2} x \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big), \\ \psi_2^{(0)}(x) = \dfrac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2}} (2x^2-1) \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big), \\ \psi_3^{(0)}(x) = \dfrac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{3}} (2x^3-3x) \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big). \end{cases} \tag{32}$$

于是正交性假设下的修正波函数结果为

$$\begin{cases} \phi_0^{(1)}(x) = -\pi^{-\frac{1}{4}} \epsilon x \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big), \\ \phi_0^{(2)}(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \dfrac{\epsilon^2}{2}\Big(x^2-\dfrac{1}{2}\Big) \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big), \\ \phi_0^{(3)}(x) = -\pi^{-\frac{1}{4}} \dfrac{\epsilon^3}{6}\Big(x^3-\dfrac{3}{2}x\Big) \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big). \end{cases} \tag{33}$$

式 (33) 与精确结果式 (28) 进行对比, 可见除了第一阶波函数的正交修正与精确结果吻合, 高阶的修正结果都与精确结果有差异. 第一阶修正的吻合也印证了我们对虚部为 0 的指定是正确的.

再来计算波函数的非正交修正结果, 由式 (21)、式 (22)、式 (29), 有

$$\begin{cases} a_1^{(1)} = -\dfrac{\epsilon}{\sqrt{2}}, \\ a_2^{(2)} = \dfrac{\epsilon^2}{2\sqrt{2}}, \\ a_1^{(3)} = \dfrac{\epsilon^3}{4\sqrt{2}}, \\ a_3^{(3)} = -\dfrac{\epsilon^3}{4\sqrt{3}}, \end{cases} \tag{34}$$

以及

$$\begin{cases} a_0^{(1)} = 0, \\ a_0^{(2)} = -\dfrac{\epsilon^2}{4}, \\ a_0^{(3)} = 0. \end{cases} \tag{35}$$

可见, 波函数的非正交修正与正交修正的差异为

$$\begin{cases} \psi_0^{(2)} = \phi_0^{(2)} + a_0^{(2)} \psi_0^{(0)}, \\ \psi_0^{(3)} = \phi_0^{(3)} + a_1^{(3)} \psi_1^{(0)}. \end{cases} \tag{36}$$

具体地,

$$\begin{cases} \psi_0^{(1)}(x) = -\pi^{-\frac{1}{4}} \epsilon x \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big), \\ \psi_0^{(2)}(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \dfrac{\epsilon^2}{2}(x^2-1) \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big), \\ \psi_0^{(3)}(x) = -\pi^{-\frac{1}{4}} \dfrac{\epsilon^3}{6}(x^3-3x) \exp\Big(-\dfrac{x^2}{2}\Big). \end{cases} \tag{37}$$

式 (37) 与精确结果式 (28) 对比, 可见波函数的非正交修正的前三阶与直接展开的结果完全一致, 这与本文的猜想不谋而合. 虽然仅仅这一个例子的样本数量太少, 但至少没有否定本文的观点, 说明确实存在一些非正交修正的方法, 其更加有效、精度更高.

3 总结与展望

本文的结果是对非简并微扰论计算方法的一个完善, 但是本文所使用的方法可以类推到简并的情况中去, 即研究非正交修正对简并微扰论的影响. 初步的计算表明, 取消正交性假设对简并微扰论的影响比非简并情况更大, 简并情况下是否引入正交性假设会造成能级修正也出现差异, 至于这个差异能否像式 (15) 一样清晰还需要进一步的计算. 推广到简并情况也可以提供更多方法来检验本文的结果, 比如匀强电场中氢原子的 Stark 效应. 2017 年, Osherov 等学者在氢原子的能量有一些依赖于外部电场强度的确定值的情况下, 求解出了某些 Stark 问题的精确解析解[12-13], 这为检验各种近似方法的精度提供了强力的工具. 由于简并微扰论中, 不否引入正交性假设会导致能级修正也出现偏离, 所以通过与 Osherov 的结果对比, 直接检验能级精度, 即可初步验证本文的思路. 需要注意的是, 由于加上外电场微扰的氢原子能谱是连续谱, 所以本文们的结果仍然只是精确能级的渐进展开. 对于修正波函数 $\varPsi_n(x)$ 的检验, 由于波函数不是直接可观测量, 可以在局域上检验概率密度的正交与非正交修正的差异 $|\|\varPsi_n(x)\|^2 - \|\varPhi_n(x)\|^2|$, 或者在全局上检验

$$\int_V \|\varPsi_n(x) - \varPhi_n(x)\|^2 \, \mathrm{d}^3x = \sum_{m,k,l} (a_m^{(k)} - c_m^{(k)})(a_m^{(l)*} - c_m^{(l)*}), \tag{38}$$

其中, $\varPsi_n(x)$ 是非正交情况下的波函数, $\varPhi_n(x)$ 是正交性假设下的波函数.

对 $a_n^{(k)}$ 的满足式 (7) 的指定方法的探讨也是一个值得考虑的课题. 式 (7) 只约束了 $a_n^{(k)}$ 的实部, 但 $a_n^{(k)}$ 的虚部却仍然会对结果造成影响, 这表明可能会有一个对虚部进行限制的条件我们尚未发现, 而这个条件或许来源于更基本的物理规律.

另一方面, 微扰论在量子场论中的应用也默认包含了“正交性假设”, 这一点可以从 Lippmann-Schwinger 方程[14]的形式中看出来, 即

$$\varPsi_\alpha^\pm = \varPhi_\alpha + (E_\alpha - H_0 \pm i\epsilon)^{-1} V \varPsi_\alpha^\pm, \tag{39}$$

其中, $\varPhi_\alpha$ 即是 H_0 的本征波函数, $\varPsi_\alpha^\pm$ 即是 H 的本征波函数, 方程直接指定了 $\varPhi_\alpha$ 的系数为 1, 而后面的项与 $\varPhi_\alpha$ 正交. 这就蕴含了正交性假设的约定. 微扰论具有自然的 Lorentz 协变性, 但本文的表述方式掩盖了这一点[14], 可以将本文的结果改写为 Lorentz 协变形式, 这样对量子场论的微扰理论有或多或少的完善作用.

[参 考 文 献]

[1] SCHRÖDINGER E. Quantisierung als eigenwertproblem [J]. Annalen der Physik, 1926, 385(13): 437-490.
[2] KATO T. Perturbation Theory for Linear Operators [M]. Berlin: Springer Science & Business Media, 2013.
[3] LIONS J L. Exact Controllability, stabilization and perturbations for distributed systems [J]. SIAM Review, 1988, 30(1): 1-68.
[4] 曾谨言. 量子力学教程 [M]. 北京: 科学出版社, 2014.
[5] 曾谨言. 量子力学(卷 I) [M]. 北京: 科学出版社, 2013.
[6] 钱伯初. 量子力学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2006.

(下转第 115 页)

[17] CALLAN C G, GROSS D J. High-energy electroproduction and the constitution of the electric current [J]. Physical Review Letters, 1969, 22(4): 156-159.
[18] FISHBANE P M, SULLIVAN J D. Bjorken scaling and structure-function relations in perturbation theory [J]. Physical Review D, 1972, 6(2): 645-654.
[19] FISHBANE P M, SULLIVAN J D. Inelastic e+e- annihilation in perturbation theory [J]. Physical Review D, 1972, 6(12): 3568-3587.
[20] EYLON Y, ZARMI Y. On the hadron-parton reciprocity relation [J]. Nuclear Physics B, 1974, 83(3): 475-492.
[21] JAFFE R L, MEYER H, PILLER G. Spin, twist and hadron structure in deep inelastic processes [J]. Lecture Notes in Physics, 1997, 496: 178-249.
[22] FIELD R D, FEYNMAN R P. Quark elashc scattering as a source of high-transverse-momentum mesons* [J]. Physical Review D, 1977, 15(9): 2590-2616.
[23] BARATE R, BUSKULIC D, DECAMP D, et al. Studies of Quantum chromodynamics with the ALEPH detector [J]. Physics Reports, 1998, 294(1/3): 1-165.
[24] ABE K, ABE K, ABE T,et al. Production of π^+, K^+, K^0, K^{*0}, ϕ, p and Λ^0 in hadronic Z^0 decays [J]. Physical Review D, 1999, 59: 052001.
[25] BRAUNSCHWEIG W, GERHARDS R, KIRSCHFINK F J, et al. Pion, kaon and proton cross sections in e^+e^- annihilation at 34 GeV and 44 GeV c.m. energy [J]. Zeitschrift Für Physik C Particles & Fields, 1989, 42(2): 189-197.
[26] AIHARA H, ALSTON-GARNJOST M, BADKE D H. et al. Charged hadron production in e^+e^- annihilation at 29 GeV [J]. Physical Review Letters, 1984, 52(8): 577-580.
[27] AIHARA H, ALSTON-GARNJOST M, AVERY R E.et al. Charged-hadron inclusive cross sections and fractions in e^+e^- annihilation at $\sqrt{s} = 29$ GeV [J]. Physical Review Letters, 1988, 61(11): 1263-1266.
[28] BERTONE V, CARRAZZA S, HARTLAND N P, et al. A determination of the fragmentation functions of pions, kaons, and protons with faithful uncertainties [J]. European Physical Journal C, 2017, 77(8): 516-566.

(责任编辑: 李　艺)

(上接第 105 页)

[参　考　文　献]

[7] SAKURAI J J, COMMINS E D. Modern Quantum Mechanics [M]. New York: Addison-Wesley Publishing Company, Inc, 1985.
[8] COHEN-TANNOUDJI C, DIU B, LALOE F. Quantum Mechanics(vol.2) [M]. Hoboken: John Wiley & Sons Inc, 1991.
[9] 梁灿彬, 周彬. 微分几何入门与广义相对论(下册) [M]. 北京: 科学出版社, 2006.
[10] GRIFFITHS D J. Introduction to Quantum Mechanics [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2016. 224-225.
[11] 汤川秀树. 量子力学 I [M]. 北京: 科学出版社, 1991.
[12] OSHEROV V I, USHAKOV V G. Stark problem in terms of the Stokes multipliers for the triconfluent Heun equation [J]. Physical Review A, 2013, 88(5): 053414.
[13] OSHEROV V I, USHAKOV V G. Analytical solutions of the Schrödinger equation for a hydrogen atom in a uniform electric field [J]. Physical Review A, 2017, 95(2): 023419.
[14] WEINBERG S. The Quantum Theory of Fields (vol.1) [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.

(责任编辑: 李　艺)