沿一条确定的轨迹积分求解 N 维基态量子波函数的新方法*

R.弗里德伯格[1]　李政道[1,2,3]　赵维勤[2,4,1)]

（1 哥伦比亚大学物理系　美国　纽约　NY 10027）

（2 中国高等科学技术中心　北京　100080）

（3 RIKEN BNL 研究中心　美国布鲁克海文国家实验室　NY 11943）

（4 中国科学院高能物理研究所　北京　100039）

摘　要　介绍了一个沿着一条确定的轨迹积分求解 N 维基态量子波函数的新方法.通过对哈密顿量的位势引入标度因子 g^2，将波函数和能量按 $1/g$ 展开，并应用求解经典的 Hamilton－Jacobi 方程的方法，找到一条确定的轨迹，使薛定谔方程从二阶偏微分方程化为一系列沿这条轨迹的一阶常微分方程.基态波函数可以表示为沿这条确定轨迹的一系列积分，而能量则可以用位势极小值处的一系列微分表示.在此基础上，导得一个全新的微扰展开系列和相应的 N 维量子波函数的格林函数.作为例子，将此方法应用于库仑吸引位和斯塔克（Stark）效应.

关键词　轨迹积分，量子波函数，格林函数

A NEW METHOD TO DERIVE LOW-LYING N-DIMENSIONAL QUANTUM WAVE FUNCTIONS BY QUADRATURES ALONG A SINGLE TRAJECTORY

R. Friedberg[1]　T. D. Lee[1,2,3]　W. Q. Zhao[2,4]

（1 *Physics Department*，*Columbia University*，*New York*，*NY*　10027，*USA*）

（2 *China Center of Advanced Science and Technology*（*CCAST*），*Beijing*　100080，*China*）

（3 *RIKEN BNL Research Center*（*RBRC*），*BNL*，*Upton*，*NY*　11943，*USA*）

（4 *Institute of High Energy Physics*，*Chinese Academy of Sciences*，*Beijing*　100039，*China*）

Abstract　A new method to solve N-dimensional ground state quantum wave functions is developed based on quadratures along a single trajectory. By introducing a scaling factor g^2 in the potential，expanding the wave function and energy in terms of $1/g$，and employing the method of solving the classical Hamilton-Jacobi equation，the second order partial differential Schrödinger equation is cast into a series of first order ordinary differential equations. The ground state wave function can be expressed as a series of integrations along the trajectory and the energy as a series of differentials at the minimum of the potential. A new perturbation expansion is obtained based on this method. The corresponding N-dimensional Green function is derived. As an example，this method is applied to an attractive Coulomb potential and the Stark effect.

Key words　trajectory quadratures，quantum wave function，Green function

自 1900 年普朗克提出量子假设以后，1925 年量子力学确立，奠定了 20 世纪物理学发展的基础.20 世纪探索物质结构的基本方法是“简化”（reductionism），不断寻找‘更小的’构成物质的基本单元.人们发现了 12 种最基本的粒子：6 种夸克和 6 种轻子.然而，物理学至今仍然存在一些未解之谜.比如，实验上从未观测到独立存在的夸克和在夸克间传递相互作用的胶子；尽管相互作用理论都是基于某种对称性建立的，这些对称性在实验上却都不严格守恒.这些现象都与真空可能存在的复杂结构密切相关.

21 世纪，人们将运用“统一”（holism）的方法建立微观体系（基本粒子）与宏观世界（物理真空）间的联系，试图揭开这些物理学中的未解之谜.希望本工作所发展的求解 N 维基态量子波函数的新方法会有助于建立研究真空性质的一种可能的理论工具.

---

* 2000－01－11 收到

1）报告人

本工作发展了一种新的方法，用沿着一条确定轨迹的积分求解 N 维薛定谔方程的基态量子波函数. 首先对哈密顿量的位势引入标度因子 g^2，使 $V(q)=g^2v(q)$. 将波函数表示为 $\Phi=\mathrm{e}^{-gS}$，对因子 gS 及能量 E 按 $1/g$ 展开，使方程从二阶偏微分方程化为一系列的一阶偏微分方程. 然后，用求解经典的 Hamilton-Jacobi 方程的方法找到一条确定的轨迹，将得到的一阶偏微分方程系列化为一系列沿这条轨迹的一阶常微分方程. 基态波函数可以表示为沿这条确定轨迹的一系列积分，而能量则可以用位势极小值处的一系列微分表示. 基于这一方法，还导得了一个全新的微扰展开系列及相应的格林函数，此方法已应用于双阱位，Coulomb 位等具体例子.

本文第二节介绍这一新方法；第三节引入新的微扰系列和相应的格林函数. 第四节举例说明此方法对库仑位的应用.

1 求解 N 维基态量子波函数的新方法

这一新的方法沿一条确定的轨迹求解 N 维薛定谔方程的基态量子波函数. 令 $\Phi(q)$ 为薛定谔方程的基态，即

$$H\Phi(q)=E\Phi(q). \tag{1.1}$$

式中 $q=(q_1,q_2,\cdots,q_N)$ 为粒子的 N 维坐标，

$$H=-\frac{1}{2}\nabla^2+V(q) \tag{1.2}$$

是单位质量粒子的哈密顿量，

$$\nabla^2=\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial q_i^2} \tag{1.3}$$

是 N 维拉普拉斯算子. 设 $V(q)$ 有下限，可取

$$V(q)\geqslant 0. \tag{1.4}$$

下面介绍这一方法的如下 3 个基本步骤：

(1) 引入标度因子 g^2，使

$$V(q)=g^2v(q). \tag{1.5}$$

将波函数表示为

$$\Phi(q)=\mathrm{e}^{-gS(q)}, \tag{1.6}$$

并对 $gS(q)$ 和能量 E 引入展开

$$gS(q)=gS_0(q)+S_1(q)+g^{-1}S_2(q)+g^{-2}S_3(q)+\cdots, \tag{1.7}$$

$$E=gE_0+E_1+g^{-1}E_2+g^{-2}E_3+\cdots. \tag{1.8}$$

将 (1.6)—(1.8) 式代入薛定谔方程 (1.1) 式，令 g^{-n} 的系数相等，得到如下方程系列：

$$\begin{aligned}&(\nabla S_0)^2=2v,\\&\nabla S_0\cdot\nabla S_1=(1/2)\nabla^2S_0-E_0,\\&\nabla S_0\cdot\nabla S_2=(1/2)[\nabla^2S_1-(\nabla S_1)^2]-E_1,\\&\nabla S_0\cdot\nabla S_3=(1/2)[\nabla^2S_2-2(\nabla S_1)\cdot(\nabla S_2)]-E_2,\\&\cdots\end{aligned} \tag{1.9}$$

其中 ∇ 是 N 维梯度矢量，其分量为 $\nabla_i=\partial/\partial q_i$，$i=1,2,\cdots,N$.

(2) 求解 (1.9) 式中的第一个方程，即 g^2 的系数决定的 S_0 的方程

$$(\nabla S_0)^2=2v.$$

它等价于以 $-v$ 为位势，$e=0^+$ 为能量的经典 Hamilton-Jacobi 方程：

$$\frac{1}{2}(\nabla S_0)^2-v(q)=0^+. \tag{1.10}$$

它的解可表示为如下 Hamilton 作用量的极小值：

$$S_0(q,e)=\int_0^T\left[\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\dot{q}_i(t)^2-(-v(q(t)))\right]\mathrm{d}t+Te, \tag{1.11}$$

其中

$$T=(\partial S_0/\partial e)_q \tag{1.12}$$

是轨迹从 $q=0$ 到 q 的时间间隔. 由此得到 (1.9) 式中第 1 式的解

$$S_0(q)=\int_0^T\left[\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\dot{q}_i^2-(-v(q))\right]\mathrm{d}t, \tag{1.13}$$

其中的积分沿轨迹 $q(t)$ 完成，它满足如下运动方程和能量守恒条件：

$$\ddot{q}(t)=-(-\nabla v), \tag{1.14}$$

$$(1/2)\dot{q}(t)^2-v(q(t))=0^+. \tag{1.15}$$

(1.13)—(1.15) 式决定了一条经典轨迹 S_0.

(3) 为求解 (1.9) 式中的其他方程，在 $S_0(q)$ 为常数的面上引入 $N-1$ 个角度变量

$$\alpha=(\alpha_1(q),\alpha_2(q),\cdots,\alpha_{N-1}(q)), \tag{1.16}$$

满足

$$\nabla\alpha_j\cdot\nabla S_0=0,\quad j=1,2,\cdots,N-1. \tag{1.17}$$

每一组 α 确定一条经典轨迹. 引入坐标变换

$$(q_1,q_2,q_3,\cdots,q_N)\to(S,\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_{N-1}). \tag{1.18}$$

将 $S_1(q)$ 写为

$$S_1(q)=S_1(S_0,\alpha), \tag{1.19}$$

则 (1.9) 式的第 2 个方程为

$$(\nabla S_0)^2(\partial S_1/\partial S_0)_\alpha=(1/2)\nabla^2S_0-E_0, \tag{1.20}$$

因此，

$$S_1(q)=S_1(S_0,\alpha)=\int_0^{S_0}\frac{\mathrm{d}S_0}{(\nabla S_0)^2}\left(\frac{1}{2}\nabla^2S_0-E_0\right). \tag{1.21}$$

为保证 $S_1(q)$ 在 $q=0$ 处解析,得到

$$E_0 = \left(\frac{1}{2}\right)(\nabla^2 S_0)_{\text{at } q=0}. \tag{1.22}$$

类似地,由(1.9)式的其余方程得到

$$E_1 = \left(\frac{1}{2}\right)[\nabla^2 S_1 - (\nabla S_1)^2]_{\text{at } q=0}, \tag{1.23}$$

$$S_2(q) = S_2(S_0,\alpha) = \int_0^{S_0} \frac{\mathrm{d}S_0}{(\nabla S_0)^2} \cdot \left\{\frac{1}{2}[\nabla^2 S_1 - (\nabla S_1)^2] - E_1\right\}, \tag{1.24}$$

$$E_2 = \left(\frac{1}{2}\right)[\nabla^2 S_2 - 2(\nabla S_1)\cdot(\nabla S_2)]_{\text{at } q=0}, \tag{1.25}$$

$$S_3(q) = S_3(S_0,\alpha) = \int_0^{S_0} \frac{\mathrm{d}S_0}{(\nabla S_0)^2}\left\{\frac{1}{2}[\nabla^2 S_2 - 2(\nabla S_1)\cdot(\nabla S_2)] - E_2\right\}, \tag{1.26}$$

$$\cdots$$

以上表达式满足如下归一化条件:当 $q=0$ 时,

$$S(0)=0, \quad \Phi(0)=1. \tag{1.27}$$

下面将这个方法用于 N 维各向同性谐振子这一最简单的例子. N 维各向同性谐振子位为

$$V(q) = (g^2/2)(q_1^2 + q_2^2 + \cdots + q_N^2). \tag{1.28}$$

由(1.9)式可直接得到如下结果:

$$gS_0(q) = (g/2)(q_1^2 + q_2^2 + \cdots + q_N^2), \tag{1.29}$$

而由(1.22)式导得 $\quad E_0 = N/2,$ (1.30)

其他各级方程的结果为 $E_1 = E_2 = \cdots = 0$, $S_1 = S_2 = \cdots = 0$. 这正是 N 维各向同性谐振子的严格解:

$$\Phi(q) = \exp[-(g/2)(q_1^2 + q_2^2 + \cdots + q_N^2)], \tag{1.31}$$

$$E = gN/2. \tag{1.32}$$

2 新的微扰展开系列和格林函数

在前节的基础上,这一节介绍一种全新的微扰展开系列,并引入相应的格林函数. 设无微扰的哈密顿量为

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(q), \tag{2.1}$$

其位势为 $V(q)\geqslant 0$. 包含微扰位 εU 的哈密顿量为

$$\mathscr{H} = H + \varepsilon U(q), \tag{2.2}$$

并且其基态波函数 $\Psi(q) = \mathrm{e}^{-gS(q)}$ 满足

$$\mathscr{H}\Psi(q) = [H + \varepsilon U(q)]\Psi(q) = E\Psi(q). \tag{2.3}$$

假定非微扰哈密顿量 H 的基态波函数 $\Phi(q) = \mathrm{e}^{-gS_0(q)}$ 为已知,它便确定了一条轨迹 S_0. 用上节介绍的新方法,沿这条确定的轨迹积分,可将含微扰的基态波函数 $\Psi(q)$ 用 $1/g$ 和 ε 的双重微扰展开系列表示. 这条轨迹 S_0 从非微扰基态波函数 $\Phi(q)$ 的极大点,即 S_0 的极小点出发,到所求波函数的位置 q,它垂直于 S_0 为常数的面.

对于含微扰的位,引入标度因子 g^2,使

$$V(q) = g^2 v(q). \tag{2.4}$$

与上一节类似,将 E 和 S 按 $1/g$ 展开,可得如下系列方程:

$$\begin{aligned}
(\nabla S_0)^2 &= 2v \\
\nabla S_0 \cdot \nabla S_1 &= (1/2)\nabla S_0 - E_0 \\
\nabla S_0 \cdot \nabla S_2 &= (1/2)[\nabla^2 S_1 - (\nabla S_1)^2] - E_1 + \varepsilon U \\
\nabla S_0 \cdot \nabla S_3 &= (1/2)[\nabla^2 S_2 - 2(\nabla S_1)\cdot(\nabla S_2)] - E_2 \\
&\cdots
\end{aligned} \tag{2.5}$$

这时,对应于第一个方程,非微扰基态波函数的轨迹 S_0 已知,而微扰项 εU 则进入 g^0 - 级方程,即 S_2 的方程. 求解这一方程系列时,仍可以按前节的方法进行坐标变换,即

$$(q_1, q_2, q_3, \cdots, q_N) \to (S, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_{N-1}),$$

其中 α_i 满足

$$\nabla\alpha_j \cdot \nabla S_0 = 0, \quad j = 1,2,\cdots,N-1.$$

由此,得到一系列的沿轨迹 S_0 的一阶常微分方程,并用与前节类似的积分逐级求解. 用这一新方法求解基态微扰波函数时,所有步骤都用沿一条确定轨迹的积分完成. 无需求解非微扰激发态波函数,也不必计算复杂的交叉矩阵元.

下面,引入与新的微扰展开系列相应的格林函数. 将非微扰基态波函数简单表示为 e^{-gS},并设非微扰的方程和波函数为已知:

$$H\mathrm{e}^{-gS} = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + g^2 v\right]\mathrm{e}^{-gS} = E\mathrm{e}^{-gS}. \tag{2.6}$$

引入微扰项 εU 后,波函数表示为

$$\Psi(q) = \mathrm{e}^{-gS(q)-\tau(q)}, \tag{2.7}$$

满足方程:

$$(H + \varepsilon U)\mathrm{e}^{-gS(q)-\tau(q)} = (E + \varepsilon\Delta)\mathrm{e}^{-gS(q)-\tau(q)}. \tag{2.8}$$

由于

$$\nabla^2\mathrm{e}^{-gS-\tau} = (\nabla^2\mathrm{e}^{-gS})\mathrm{e}^{-\tau} + \mathrm{e}^{-gS}(\nabla^2\mathrm{e}^{-\tau}) + 2\nabla\mathrm{e}^{-gS}\,\nabla\mathrm{e}^{-\tau}, \tag{2.9}$$

$$\nabla\mathrm{e}^{-gS} = -g\nabla S\mathrm{e}^{-gS}, \tag{2.10}$$

则微扰波函数 $\mathrm{e}^{-\tau}$ 满足方程:

$$[g(\nabla S)\cdot\nabla-\frac{1}{2}\nabla^2]\mathrm{e}^{-\tau(q)}=\varepsilon(-U+\Delta)\mathrm{e}^{-\tau(q)}.\tag{2.11}$$

为求解微扰波函数 $\mathrm{e}^{-\tau}$,引入类似的坐标变换

$$(q_1,q_2,q_3,\cdots,q_N)\to(S,\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_{N-1}),$$

满足条件

$$\nabla\alpha_j\cdot\nabla S_0=0,\quad j=1,2,\cdots,N-1.$$

为了引入格林函数,首先定义一个矩阵 C:

$$C=g^{-1}\theta(\nabla S)^{-2},\tag{2.12}$$

其中的 θ 函数为

$$(S|\theta|\bar{S})=\begin{cases}1 & (0\leqslant\bar{S}<S)\\ 0 & (0\leqslant S<\bar{S}).\end{cases}$$

C 矩阵的矩阵元为

$$(S|C|\bar{S})=g^{-1}(S|\theta|\bar{S})(\nabla\bar{S})^{-2}.$$

由于 $\dfrac{\partial\theta(S-\bar{S})}{\partial S}=\delta(S-\bar{S})$,可得

$$\partial C/\partial S=g^{-1}(\nabla S)^{-2}.\tag{2.13}$$

利用$\nabla S\cdot\nabla\alpha_i=0$,

$$\nabla S\cdot\nabla=(\nabla S)^2\,\partial/\partial S,\tag{2.14}$$

由此可证明

$$g\nabla S\cdot\nabla C=1.\tag{2.15}$$

定义 $T=-\frac{1}{2}\nabla^2$,由于 $g\nabla S\cdot\nabla C=1$,则由(2.11)式可得到

$$(g\nabla S\cdot\nabla)(1+CT)(\mathrm{e}^{-\tau}-1)=(-\varepsilon U+\Delta)\mathrm{e}^{-\tau}.\tag{2.16}$$

可以证明,微扰波函数

$$\mathrm{e}^{-\tau}=1+(1+CT)^{-1}C\varepsilon(-U+\Delta)\mathrm{e}^{-\tau}\tag{2.17}$$

满足方程(2.16)式.将(2.17)式代入(2.7)式,定义格林函数

$$G\equiv\mathrm{e}^{-gS}(1+CT)^{-1}C\,\mathrm{e}^{gS},\tag{2.18}$$

则有

$$\Psi=\mathrm{e}^{-gS}+G\varepsilon(-U+\Delta)\Psi.\tag{2.19}$$

由于

$$(H-E)\mathrm{e}^{-gS}=0,\tag{2.20}$$

$$(H-E)\Psi=\varepsilon(-U+\Delta)\Psi,\tag{2.21}$$

很容易导得

$$(H-E)G=(-\frac{1}{2}\nabla^2+V-E)G=1.\tag{2.22}$$

由此证明,G 是非微扰 H 量的格林函数,(2.19)式即为含微扰时的基态解用格林函数的表式.相应的微扰能量表达式为

$$\varepsilon\Delta=\frac{\int\mathrm{e}^{-gS}\varepsilon U\Psi\mathrm{d}^Nq}{\int\mathrm{e}^{-gS}\Psi\mathrm{d}^Nq}.\tag{2.23}$$

(2.17)式,(2.19)式和(2.23)式给出了从无微扰时的基态波函数出发,如何通过定义一条轨迹和相应的 C 矩阵引入格林函数 G,然后求出含微扰的基态波函数和微扰能量的一般方法.

3 库仑吸引位和斯塔克(Stark)效应

前节的讨论以原点附近类似谐振子行为的位势为例.这一节,将这一新方法推广应用于在原点有奇异行为的库仑位.

令 H_c 为库仑位的哈密顿量:

$$H_c=-\frac{1}{2}\nabla^2-g^2/r,\tag{3.1}$$

其中

$$g^2=Ze^2,\tag{3.2}$$

r 是径向坐标,Ze 为核电荷,$-e$ 为电子电荷.引入一个在原点无奇点的微扰 εU,相应的哈密顿量为

$$H=H_c+\varepsilon U,\tag{3.3}$$

令 ψ_c 和 ψ 为 H_c 与 H 的基态,即

$$H_c\psi_c=E_c\psi_c,\tag{3.4}$$

$$H\psi=E\,\psi.\tag{3.5}$$

下面,用沿径向轨迹的积分求解波函数 ψ.非微扰库仑问题的解为已知:

$$\psi_c=\mathrm{e}^{-g^2r},\quad E_c=-g^4/2.\tag{3.6}$$

定义

$$\psi=\mathrm{e}^{-S}.\tag{3.7}$$

与(3.6)式相应,引入 S 和 E 的 g 展开:

$$S=g^2S_0+S_1+g^{-2}S_2+g^{-4}S_3+\cdots+g^{-(2n-2)}S_n+\cdots,\tag{3.8}$$

$$E=g^4E_0+g^2E_1+E_2+g^{-2}E_3+\cdots+g^{-(2n-4)}E_n+\cdots.\tag{3.9}$$

由于$\nabla^2\psi=[(\nabla S)^2-\nabla^2S]\psi$,

由(3.5)式导得

$$-\frac{1}{2}(\nabla S)^2+\frac{1}{2}\nabla^2S-\frac{g^2}{r}+\varepsilon U=E.\tag{3.10}$$

将(3.8)式和(3.9)式代入(3.10)式,令方程两边 g^4,g^2,g^0,…,g^{-2m},…的系数相等,则得如下方程系列:

$$(\nabla S_0)^2=-2E_0,\tag{3.11}$$

$$\nabla S_0\cdot\nabla S_1=\frac{1}{2}\nabla^2S_0-\frac{1}{r}-E_1,\tag{3.12}$$

$$\nabla S_0 \cdot \nabla S_2 = -\frac{1}{2}(\nabla S_1)^2 + \frac{1}{2}\nabla^2 S_1 + \varepsilon U - E_2, \tag{3.13}$$

$$\nabla S_0 \cdot \nabla S_3 = -\nabla S_1 \cdot \nabla S_2 + \frac{1}{2}\nabla^2 S_2 - E_3, \tag{3.14}$$

$$\cdots$$

由于 U 在 $r=0$ 处无奇点,可令

$$U(0) = 0. \tag{3.15}$$

采用与前相同的归一化条件：

$$\psi(0) = 1, \quad S(0) = 0, \tag{3.16}$$

由(3.11)式可得

$$\partial S_0/\partial r = \sqrt{-2E_0},$$

$$S_0 = \sqrt{-2E_0}\, r. \tag{3.17}$$

将上式代入 S_1 的方程,得到

$$\sqrt{-2E_0}(\partial S_1/\partial r) = \left(\sqrt{-2E_0} - 1\right)/r - E_1. \tag{3.18}$$

由于 S_1 在 $r=0$ 应有限,因此 $\sqrt{-2E_0} - 1 = 0$,即

$$E_0 = -1/2, \quad S_0 = r, \tag{3.19}$$

这就是(3.6)式的结果.由(3.18)式可得到

$$\partial S_1/\partial r = -E_1,$$

$$S_1 = -E_1 r. \tag{3.20}$$

为进一步确定 E_1,需要解 S_2 的方程.这与微扰项的具体形式有关.下面以斯塔克效应为例.引入沿 z 轴的外电场,微扰位势为

$$\varepsilon U = \varepsilon r \cos a, \tag{3.21}$$

其中 a 为极角,

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \quad z = r\cos a. \tag{3.22}$$

由于

$$\nabla^2 r = 2/r, \tag{3.23}$$

S_2 的方程为

$$\partial S_2/\partial r = -E_1^2/2 - E_1/r + \varepsilon r\cos a - E_2. \tag{3.24}$$

S_2 在 $r=0$ 有限的条件使 $E_1=0$,因此 $S_1=0$,

$$S_2 = \frac{1}{2}\varepsilon r^2 \cos a - E_2 r, \tag{3.25}$$

并且

$$\nabla^2 S_2 = 2\varepsilon\cos a - (2/r)E_2. \tag{3.26}$$

由此可得 S_3 的方程

$$\frac{\partial S_3}{\partial r} = \varepsilon\cos a - (1/r)E_2 - E_3. \tag{3.27}$$

S_3 在 $r=0$ 有限的条件使 $E_2=0$,因此

$$S_3 = \varepsilon z - E_3 r, \tag{3.28}$$

并且

$$\nabla^2 S_3 = -2E_3/r. \tag{3.29}$$

代入 S_4 的方程

$$\frac{\partial S_4}{\partial r} = -\frac{1}{2}(\nabla S_2)^2 + \frac{1}{2}\nabla^2 S_3 - E_4,$$

由 S_4 在 $r=0$ 有限的条件,得

$$E_3 = 0,$$

因此

$$S_3 = \varepsilon z. \tag{3.30}$$

为保证 S_5 在 $r=0$ 有限,得到

$$E_4 = 0, \tag{3.31}$$

因此

$$S_4 = -\frac{1}{24}\varepsilon^2 r^3(1+3\cos^2 a). \tag{3.32}$$

类似地,可以得到

$$E_5 = 0, \quad S_5 = -\frac{7}{16}\varepsilon^2 r^2(1+\cos^2 a), \tag{3.33}$$

$$E_6 = -\frac{9}{4}\varepsilon^2, \quad S_6 = \frac{1}{16}\varepsilon^3 r^4 \cos a \cdot (1+\cos^2 a), \tag{3.34}$$

$$E_7 = 0, \quad S_7 = \frac{13}{48}\varepsilon^3 r^3 \cos a(3+\cos^2 a), \tag{3.35}$$

$$E_8 = 0, \quad S_8 = \frac{53}{16}\varepsilon^3 r^2\cos a - \frac{1}{128}\varepsilon^4 r^5 \cdot (1+10\cos^2 a + 5\cos^4 a), \tag{3.36}$$

$$E_9 = 0, \quad S_9 = \frac{53}{8}\varepsilon^3 r\cos a - \frac{99}{512}\varepsilon^4 r^4 \cdot (1+6\cos^2 a + \cos^4 a), \tag{3.37}$$

$$E_{10} = 0, \quad S_{10} = -\frac{761}{384}\varepsilon^4 r^3(1+3\cos^2 a) + O(\varepsilon^5), \tag{3.38}$$

$$E_{11} = 0, \quad S_{11} = -\frac{3131}{256}\varepsilon^4 r^2(1+\cos^2 a) + O(\varepsilon^5), \tag{3.39}$$

$$E_{12} = -\frac{3555}{64}\varepsilon^4, \tag{3.40}$$

$$\cdots$$

综合以上结果,对于

$$V = -g^2/r + \varepsilon r\cos a,$$

波函数 e^{-S}和能量用 ε 展开的表达式为

$$S = g^2 r + \frac{\varepsilon r}{g^4}\cos a\left(1+\frac{1}{2}g^2 r\right) - \frac{\varepsilon^2 r^2}{g^8}\left[\frac{7}{16}(1+\cos^2 a) + \frac{1}{24}g^2 r(1+3\cos^2 a)\right] + \frac{\varepsilon^3 r}{g^{16}}\cos a \cdot \left[\frac{53}{8}\left(1+\frac{1}{2}g^2 r\right) + \frac{13}{48}(g^2 r)^2(3+\cos^2 a) + \right.$$

$$\frac{1}{16}(g^2 r)^3(1+\cos^2 \alpha)\Big] + O(\varepsilon^4) \qquad (3.41)$$

$$E = -\frac{1}{2}g^4 - \frac{9}{4}\frac{\varepsilon^2}{g^8} - \frac{3555}{64}\frac{\varepsilon^4}{g^{20}} + O(\varepsilon^6) \quad (3.42)$$

用这个新方法,波函数和能量可以求解到 ε 展开的任意有限级.

4 小结

如上所述,本工作发展了一个全新的求解 N 维薛定谔方程基态量子波函数的方法.这个方法将基态波函数表示为 $\Phi = e^{-S}$.首先在位势中引入 g^2 因子,将 S 和 E 按 $1/g$ 展开.使薛定谔方程由一个二阶偏微分方程化为一阶偏微分方程系列.然后将 $1/g$ 展开的第一级方程用相应的经典 Hamilton-Jacobi 方程求解,得到一条确定的经典轨迹 S_0.再通过坐标变换 $q \to (S_0, \alpha)$,将一阶偏微分方程系列化为一阶常微分方程的系列.该系列常微分方程的解都可表示为沿确定的轨迹 S_0 的积分.而基态能量则相应于位能极小处的一系列微分.

本工作还导得了一个全新的微扰展开系列,并定义了基于这一新方法的相应的格林函数.用这一新的微扰系列及其格林函数求解基态微扰波函数时,所有步骤都用沿一条确定轨迹的积分完成,无需求解非微扰激发态波函数,也不必计算复杂的交叉矩阵元.

该方法已经应用于二维可分位、双阱位、带微扰的谐振子位和库仑位等,所得结果与传统微扰论完全相同.今后,将进一步发展此方法,应用于场论问题,特别希望能将此方法应用于求解 QCD 问题.

参 考 文 献

[1] Friedberg R, Lee T D, Zhao W Q. IL Nuovo Cimento, 1999, A112:1195

[2] Friedberg R, Lee T D, Zhao W Q. Ann. Phys., 2000, 286:1