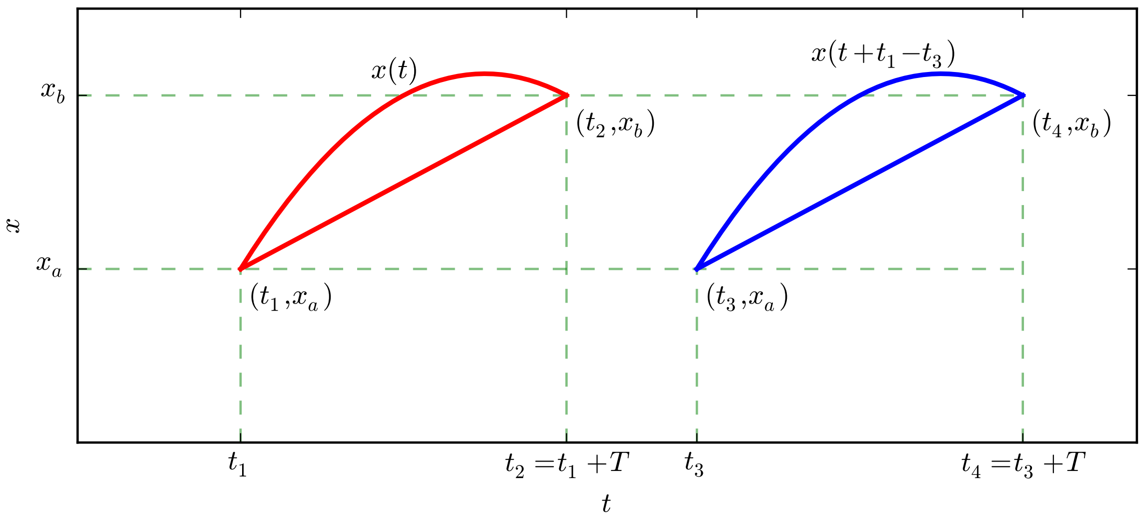


《量子力学与路径积分》习题解答

作者： 苏剑林

版本： V0.4

网址： http://spaces.ac.cn

在本习题解答的编写过程中，部分题目参考了台湾版的《量子力学与路径积分》习题解答，在此表示衷心感谢。

路径积分习题解答 V0.4

苏剑林

科学空间：http://spaces.ac.cn

2016 年 1 月 9 日

目录

1 第一章 量子力学的基本概念

本章并无习题。

2 第二章 量子力学的运动规律

2.1 2-1 经典作用量

2.1.1 问题 2-1

一个自由粒子，其 $L = m\dot{x}^2/2$。证明自由粒子的经典运动所对应的作用量 S_{cl} 为

$$S_{cl} = \frac{m}{2}\frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} \tag{2-8}$$

参考答案：

作用量 $\int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t)dt$ 是关于 $x \equiv x(t)$ 的一个泛函，而所谓经典作用量，就是找出粒子的经典路径 x_{cl}，然后再代入作用量的表达式中去。

对于自由粒子，将 L 代入欧拉-拉格朗日方程 (即 (2-7) 式) 得到 $m\ddot{x} = 0$，从而经典运动路径为 $x_{cl}(t) = c_1 t + c_2$，c_1, c_2 是待定常数，常数由边界条件 $x(t_a) = x_a, x(t_b) = x_b$ 来确定。最终结果是

$$x_{cl}(t) = \left(\frac{x_b - x_a}{t_b - t_a}\right)t + \frac{t_b x_a - t_a x_b}{t_b - t_a}$$

所以

$$S_{cl} = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}m\dot{x}_{cl}^2(t)dt = \frac{m}{2}\frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}$$

2.1.2 问题 2-2

一个谐振子，其 $L = (m/2)(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$。令 $T = t_b - t_a$，证明其经典作用量为

$$S_{c1} = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left[(x_a^2 + x_b^2)\cos\omega T - 2x_a x_b\right] \tag{2-9}$$

参考答案：

本问题的计算思路跟问题 2-1 是一样的，只不过计算上更加复杂。为了不至于让符号太多，我们设 $m = \omega = 1$，随后我们可以通过检查量纲来恢复这两个变量。此时 $L = (\dot{x}^2 - x^2)/2$，变分得到经典运动方程 $\ddot{x} + x = 0$，其中通解包含两个待定常数，同样由边界条件 $x(t_a) = x_a, x(t_b) = x_b$ 来确定。

已经知道对于任意常数 c，$\sin(t + c)$ 都是 $\ddot{x} + x = 0$ 的解，因此考虑到边界条件，我们使用如下格式的通解

$$x_{cl}(t) = c_1 \sin(t - t_a) + c_2 \sin(t - t_b)$$

该通解在边界点时只有一个常数，因此可以方便地确定两个常数：

$$c_1 = \frac{x_b}{\sin(t_b - t_a)}$$
$$c_2 = \frac{x_a}{\sin(t_a - t_b)}$$

为了算 S_{c1}，我们可以使用分部积分法：

$$\begin{aligned} S_{c1} &= \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}(\dot{x}_{cl}^2 - x_{cl}^2)dt \\ &= \frac{1}{2} x_{cl}\dot{x}_{cl}\Big|_{t_a}^{t_b} - \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} (\ddot{x}_{cl} + x_{cl})\, dt \\ &= \frac{1}{2} x_{cl}\dot{x}_{cl}\Big|_{t_a}^{t_b} \\ &= \frac{1}{2} x_b \; \dot{x}_{cl}|_{t_b} - \frac{1}{2} x_a \; \dot{x}_{cl}|_{t_a} \end{aligned}$$

其中由于经典运动方程 $\ddot{x}_{cl} + x_{cl} = 0$，所以 $\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} (\ddot{x}_{cl} + x_{cl})\, dt = 0$。这样一来我们就免除了再次进行积分运算。将 $x_{cl}(t)$ 的表达式代入上式，得到

$$S_{c1} = \frac{1}{2\sin T}\left[(x_a^2 + x_b^2)\cos T - 2x_a x_b\right]$$

最后我们来把 m 和 ω 恢复，这只需要检查量纲。首先留意 sin 和 cos 部分，三角函数的自变量必须是无量纲的，而目前是时间 T，为了将其变成无量纲的，只需要乘上角速度 ω，因为角速度的量纲是“时间$^{-1}$”。其次，L 是具有能量量纲的，因此作用量 S 量纲是能量量纲乘上时间量纲，也就是“质量 × 长度^2/时间”。方括号只是长度的平方，因此，需要在外边乘上 $m\omega$（这是一个量纲为“质量/时间”的量），所以，得到

$$S_{c1} = \frac{m\omega}{2\sin \omega T}\left[(x_a^2 + x_b^2)\cos \omega T - 2x_a x_b\right]$$

2.1.3　问题 2-3

求出常力 f 作用下的一个粒子的 S_{cl}，其拉氏量为 $L = m\dot{x}^2/2 + fx$。

参考答案：

同样，我们设 $m = f = 1$，最后再来恢复它，我们应当熟悉这种方法，它能给我们带来方便。此时，$L = \dot{x}^2/2 + x$，变分作用量，得到经典运动方程 $\ddot{x} = 1$。积分之，可以得到通解

$$x_{cl}(t) = \frac{1}{2}t^2 + c_1 t + c_2$$

这启示我们，可以设 $x_{cl} = y_{cl} + \frac{1}{2}t^2$，或许可以将问题转化为自由粒子的情况。事实正是如此，我们有

$$\begin{aligned} S_{c1} &= \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{1}{2}\dot{x}^2 + x\right) dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{1}{2}\left(\dot{y}_{cl} + t\right)^2 + \left(y_{cl} + \frac{1}{2}t^2\right)\right] dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{1}{2}\dot{y}_{cl}^2 + t^2 + \underbrace{(y_{cl} + t\dot{y}_{cl})}_{\frac{d}{dt}(ty_{cl})}\right] dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}\dot{y}_{cl}^2 dt + \frac{1}{3}t^3\Big|_{t_a}^{t_b} + ty_{cl}|_{t_a}^{t_b} \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2}\dot{y}_{cl}^2 dt + \frac{1}{3}(t_b^3 - t_a^3) + (t_b y_b - t_a y_a) \end{aligned}$$

根据我们的设定，$y_a = x_a - \frac{1}{2}t_a^2$, $y_b = x_b - \frac{1}{2}t_b^2$。上式第一项正是自由粒子的作用量，根据问题 2-1，它等于

$$\frac{1}{2}\frac{(y_b - y_a)^2}{t_b - t_a} = \frac{1}{2}\frac{[(x_b - x_a) - \frac{1}{2}(t_b^2 - t_a^2)]^2}{t_b - t_a}$$

所以最终结果是

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \frac{1}{2}\frac{[(x_b - x_a) - \frac{1}{2}(t_b^2 - t_a^2)]^2}{t_b - t_a} + \frac{1}{3}(t_b^3 - t_a^3) + \left[t_b\left(x_b - \frac{1}{2}t_b^2\right) - t_a\left(x_a - \frac{1}{2}t_a^2\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\frac{[(x_b - x_a) - \frac{1}{6}(t_b^2 - t_a^2)]^2}{t_b - t_a} - \frac{1}{3}(t_b^3 - t_a^3) + (t_b x_b - t_a x_a) \\ &= \frac{(x_b - x_a)^2}{2T} + \frac{T(x_a + x_b)}{2} - \frac{T^3}{24} \end{aligned}$$

其中 $T = t_b - t_a$，我们以后经常会使用这个代换。恢复 m, f 后的结果为

$$S_{cl} = \frac{m(x_b - x_a)^2}{2T} + \frac{fT(x_a + x_b)}{2} - \frac{f^2T^3}{24m}$$

2.1.4 问题 2-4

按照经典力学，动量定义为

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \tag{2-10}$$

证明端点的动量为

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)_{x=x_b} = \frac{\partial S_{cl}}{\partial x_b} \tag{2-11}$$

以及

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)_{x=x_a} = -\frac{\partial S_{cl}}{\partial x_a}$$

参考答案：

这个问题相当于把 x_b 换成随时变化的 x，也就是说，我们考虑

$$S_{cl}(x) = \int_{t_a}^{t_b} L(x_{cl}, \dot{x}_{cl}, t)dt, \quad x(t_a) = x_a, x(t_b) = x$$

对 x 求导：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}S_{cl}(x) &= \int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{\partial L}{\partial x_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\frac{\partial \dot{x}_{cl}}{\partial x}\right)dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b}\frac{\partial L}{\partial x_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial x}dt + \int_{t_a}^{t_b}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}d\left(\frac{\partial x_{cl}}{\partial x}\right) \quad \text{(接着对后一项用分部积分)} \\ &= \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial x}\right|_{t_a}^{t_b} + \int_{t_a}^{t_b}\underbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial x_{cl}} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\right)}_{\text{请回忆“欧拉-拉格朗日方程”}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial x}dt \\ &= \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial x}\right|_{t_a}^{t_b} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\frac{\partial (x_{cl}|_{t_a}^{t_b})}{\partial x} \quad \text{(这一步是因为 } t_a, t_b, x_a, x \text{ 之间是相互独立的)} \\ &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\frac{\partial (x - x_a)}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}} \end{aligned}$$

从而

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)_{x=x_b}=\frac{\partial S_{cl}}{\partial x_b}$$

类似可证后一式子。

2.1.5　问题 2-5

按经典力学，能量定义为

$$E=\dot{x}p-L \tag{2-12}$$

证明端点 b 能量的表达式为

$$\left(\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}-L\right)\bigg|_{x=x_b}=-\frac{\partial S_{cl}}{\partial t_b} \tag{2-13}$$

以及相应地在端点 a 的能量是 $\frac{\partial S_{cl}}{\partial t_a}$。

参考答案：

与问题2-4 类似，考虑 t_b 为任意变化的 τ 时，$S_{cl}(\tau)$ 的导数。

$$S_{cl}(\tau)=\int_{t_a}^{\tau}L(x_{cl},\dot{x}_{cl},t)dt,\quad x(t_a)=x_a,x(\tau)=x_b$$

所以（下面的 L 表示 $L(x_{cl},\dot{x}_{cl},t)|_{t=\tau}$）

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\tau}S_{cl}(\tau)&=L+\int_{t_a}^{\tau}\frac{\partial L}{\partial\tau}dt\quad(\text{注意到 } L \text{ 也是 } \tau \text{ 的函数，因此多一偏导数项})\\
&=L+\int_{t_a}^{\tau}\left(\frac{\partial L}{\partial x_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial\tau}+\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\frac{\partial\dot{x}_{cl}}{\partial\tau}\right)dt\quad(\text{接着对后一项用分部积分})\\
&=L+\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial\tau}\bigg|_{t_a}^{\tau}+\int_{t_a}^{\tau}\left(\frac{\partial L}{\partial x_{cl}}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\right)\frac{\partial x_{cl}}{\partial\tau}dt\\
&=L+\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial\tau}\bigg|_{t_a}^{\tau}\\
&=L+\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial\tau}\bigg|_{t=\tau}-\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\bigg|_{t=t_a}\frac{\partial(x_{cl}|_{t=t_a})}{\partial\tau}\\
&=L+\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial\tau}\bigg|_{t=\tau}-\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\bigg|_{t=t_a}\frac{\partial x_a}{\partial\tau}\\
&=L+\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial\tau}\bigg|_{t=\tau}
\end{aligned}$$

上面的最后几步中，因为 t_a 与 τ 无关，所以可以直接交换“取 $t=t_a$”与“对 τ 求导”的顺序，但是不能直接交换“取 $t=\tau$”与“对 τ 求导”的顺序。对于任意 $f(t,\tau)$，我们有

$$\frac{df(\tau,\tau)}{d\tau}=\frac{\partial f(t,\tau)}{\partial t}\bigg|_{t=\tau}+\frac{\partial f(t,\tau)}{\partial\tau}\bigg|_{t=\tau}$$

从而

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau}\right|_{t=\tau}+\left.\frac{\partial x_{cl}}{\partial t}\right|_{t=\tau} &= \frac{d}{d\tau}(x_{cl}|_{t=\tau}) \\ &= \frac{d}{d\tau}x_{cl}(\tau) \\ &= \frac{d}{d\tau}(x_b) \\ &= 0\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \tau}S_{cl}(\tau) &= L+\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial \tau}\right|_{t=\tau} \\ &= L-\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\frac{\partial x_{cl}}{\partial t}\right|_{t=\tau} \\ &= L-\dot{x}_{cl}\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\right|_{t=\tau}\end{aligned}$$

至此，$(2-13)$ 式得证。

2.2 2-2 量子力学的几率幅

2.2.1 问题 2-6

规定路径积分的泛函种类可惊人地变化。到目前为止，我们已经考虑了一些泛函，如式 $(2-15)$。这里我们要考虑另一个完全不同的类型。(待完善)

3 第三章 用一些特例阐述概念

3.1 3-1 自由粒子

3.1.1 问题 3-1

一粒子由 a 点到达 b 点的几率，按定义应该正比于传播子 $K(b,a)$ 的平方的绝对值的平方。对于自由粒子传播子式 $(3-3)$，这就是

$$P(b)dx = \frac{m}{2\pi\hbar(t_b - t_a)}dx \tag{3-6}$$

显然，这是相对几率，因为对 x 的全部区域的积分发散。这种特别的归一化意味着什么？证明，这相应于粒子在 a 点开始运动时的动量为任何值的可能性一样大的经典图像。证明粒子动量在 dp 区间先赢的相对几率是 $dp/2\pi\hbar$。

参考答案：

根据问题 2-1 和问题 2-4，自由粒子的经典动量为

$$p = \frac{\partial S_{cl}}{\partial x} = \frac{m}{2}\frac{x - x_a}{t_b - t_a} \quad (\text{这里 } x = x_b)$$

所以

$$\frac{dp}{2\pi\hbar} = \frac{m}{2\pi\hbar(t_b - t_a)}dx = P(b)dx$$

可见粒子在区间 dp 的相对几率正比于 $1/2\pi\hbar$，这是一个常数，因此这相应于粒子在 a 点开始运动时的动量为任何值的可能性一样大的经典图像，这意味着自由粒子的动量和位置都是非常不确定的。

3.1.2 问题 3-2

用代入法证明，只要 t_b 大于 t_a，自由粒子传播子 $K(b,a)$ 满足微分方程

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial K(b,a)}{\partial t_b} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 K(b,a)}{\partial x_b^2} \tag{3-18}$$

参考答案：

只需要依次写出：

$$
\begin{aligned}
K(b,a) &= \left[\frac{2\pi i(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2} \exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\\
\frac{\partial K(b,a)}{\partial t_b} &= \frac{\pi i}{m}\left[\frac{2\pi i(t_b-t_a)}{m}\right]^{-3/2} \exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\\
&\quad -\left[\frac{2\pi i(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2} \frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)^2}\exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\\
&= \left[\frac{2\pi i(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2} \frac{1}{2(t_b-t_a)}\exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\\
&\quad -\left[\frac{2\pi i(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2} \frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)^2}\exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\\
\frac{\partial K(b,a)}{\partial x_b} &= \left[\frac{2\pi i(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2} \frac{im(x_b-x_a)}{\hbar(t_b-t_a)}\exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\\
\frac{\partial^2 K(b,a)}{\partial x_b^2} &= \left[\frac{2\pi i(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2} \frac{im}{\hbar(t_b-t_a)}\exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\\
&\quad -\left[\frac{2\pi i(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2} \frac{m^2(x_b-x_a)^2}{\hbar^2(t_b-t_a)^2}\exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}
\end{aligned}
$$

可见，除了一个常数因子外，$\frac{\partial K(b,a)}{\partial t_b}$ 与 $\frac{\partial^2 K(b,a)}{\partial x_b^2}$ 是对应相等的，所以不难证明式 $(3-18)$

3.2 3-2 通过狭缝的衍射

3.2.1 问题 3-3

将式 $(3-20)$ 中的几率幅平方，再对 x 积分，证明：通过原狭缝的几率是

$$
P(\text{通过}) = \frac{m}{2\pi\hbar T}2b \tag{3-35}
$$

参考答案：

首先写出 $(3-20)$ 式

$$
\begin{aligned}
\psi(x) = \int_{-b}^{b} &\left(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im(x-y)^2}{2\hbar\tau}\right]\\
&\times\left(\frac{2\pi i\hbar T}{m}\right)^{-1/2} \exp\left[\frac{im(x_0+y)^2}{2\hbar T}\right]dy
\end{aligned} \tag{3-20}
$$

然后有

$$
\begin{aligned}
|\psi(x)|^2 =&\psi^*(x)\psi(x)\\
=&\left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau}\right)\left(\frac{m}{2\pi\hbar T}\right)\\
&\times\int_{-b}^{b}\exp\left[\frac{im(x-y)^2}{2\hbar\tau}\right]\exp\left[\frac{im(x_0+y)^2}{2\hbar T}\right]dy\\
&\times\int_{-b}^{b}\exp\left[-\frac{im(x-z)^2}{2\hbar\tau}\right]\exp\left[-\frac{im(x_0+z)^2}{2\hbar T}\right]dz
\end{aligned}
$$

为求 $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2dx$，先对 x 积分：

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{im(x-y)^2}{2\hbar\tau}-\frac{im(x-z)^2}{2\hbar\tau}\right]dx\\
=&\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{im(z-y)x}{\hbar\tau}+\frac{im\left(y^2-z^2\right)}{2\hbar\tau}\right]dx\\
=&2\pi\delta\left(\frac{m(z-y)}{\hbar\tau}\right)\exp\left[\frac{im\left(y^2-z^2\right)}{2\hbar\tau}\right]\quad\left(\text{我们有}\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega x}d\omega\right)
\end{aligned}
$$

所以

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2dx\\
=&\frac{m^2}{4\pi^2\hbar^2\tau T}\int_{-b}^{b}\int_{-b}^{b}2\pi\delta\left(\frac{m(z-y)}{\hbar\tau}\right)\exp\left[\frac{im\left(y^2-z^2\right)}{2\hbar\tau}\right]\\
&\times\exp\left[\frac{im(x_0+y)^2}{2\hbar T}\right]\exp\left[-\frac{im(x_0+z)^2}{2\hbar T}\right]dydz\\
=&\frac{m^2}{2\pi\hbar^2\tau T}\int_{-b}^{b}\int_{-b}^{b}\delta\left(\frac{m(z-y)}{\hbar\tau}\right)\exp\left[\frac{im\left(y^2-z^2\right)}{2\hbar\tau}\right]\\
&\times\exp\left[\frac{im(y-z)x_0}{\hbar T}+\frac{im\left(z^2-y^2\right)}{2\hbar T}\right]dydz
\end{aligned}
$$

记积分区域为 D，D 包含原点。作坐标变换：

$$
\begin{cases}
u=y-z\\
v=y+z
\end{cases}
$$

其雅可比行列式为 $\frac{1}{2}$，上述积分变为

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2dx\\
=&\frac{m^2}{2\pi\hbar^2\tau T}\iint_D\delta\left(-\frac{mu}{\hbar\tau}\right)\exp\left[\frac{imuv}{2\hbar\tau}+\frac{imux_0}{\hbar T}-\frac{imuv}{2\hbar T}\right]\frac{1}{2}dudv\\
=&\frac{m}{4\pi\hbar T}\iint_D\delta\left(u\right)\exp\left[\frac{imuv}{2\hbar\tau}+\frac{imux_0}{\hbar T}-\frac{imuv}{2\hbar T}\right]dudv\\
=&\frac{m}{4\pi\hbar T}\int_{-2b}^{2b}dv\quad\text{（由于 }\delta(u)\text{ 的存在，只取 }u=0\text{ 这一区域，即一条直线。）}\\
=&\frac{m}{4\pi\hbar T}4b=\frac{m}{2\pi\hbar T}2b
\end{aligned}
$$

3.3 3-4 波函数

3.3.1 问题 3-4

假若一个自由粒子在 $t=0$ 时有确定的动量（即波函数为 $Ce^{ipx/\hbar}$）。借助于式 $(3-3)$ 和 $(3-42)$ 证明：在以后的某时刻，这个粒子仍有同一固定的动量（即波函数通过 $Ce^{ipx/\hbar}$ 与 x 相关），并且随时间的变化正比于 $e^{-i(p^2/2m\hbar)t}$。这意味着粒子有确定的能量 $p^2/2m$。

参考答案：

根据 $(3-3)$ 式，有

$$K(x,t;y,0)=\left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-1/2}\exp\frac{im(x-y)^2}{2\hbar t}$$

根据 $(3-42)$ 式，有

$$\begin{aligned}\psi(x,t)=&C\left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\frac{im(x-y)^2}{2\hbar t}\cdot\exp(ipy/\hbar)dy\\=&C\left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\frac{im}{2\hbar t}\left[x^2+y^2+2(pt/m-x)y\right]dy\\=&C\left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\frac{im}{2\hbar t}\left[\left(2ptx/m-p^2t^2/m^2\right)+\left(y+pt/m-x\right)^2\right]dy\\=&C\left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-1/2}\exp\frac{im}{2\hbar t}\left(2ptx/m-p^2t^2/m^2\right)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\frac{im}{2\hbar t}\left(y+pt/m-x\right)^2dy\\=&C\exp\frac{im}{2\hbar t}\left(2ptx/m-p^2t^2/m^2\right)\\=&Ce^{ipx/\hbar}e^{-i(p^2/2m\hbar)t}\end{aligned}$$

3.3.2 问题 3-5

应用问题3-2 的结果和式 $(3-42)$ 证明：波函数满足方程：

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\tag{3-42}$$

这是自由粒子的薛定谔方程。

参考答案：

根据问题3-2，我们有

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial K}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 K}{\partial x^2}$$

其中 $K=K(x,t;y,t_0)$，任意给定初始的波函数 $\psi(y,t_0)$，我们有

$$-\int\frac{\hbar}{i}\frac{\partial K}{\partial t}\psi(y,t_0)dy=-\int\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 K}{\partial x^2}\psi(y,t_0)dy$$

由于求偏导数的变量和求积分的变量无关，因此求积分和求偏导数的次序可以交换：

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\int K\psi(y,t_0)dy}{\partial t}=-\int\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\int K\psi(y,t_0)dy}{\partial x^2}$$

根据 $(3-42)$ 式，积分部分正好是任意时刻的波函数 $\psi(x,t)$，所以

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

3.4 3-5 高斯型积分

3.4.1 问题 3-6

由于自由粒子拉氏量是二次型的，证明 (问题2-1)

$$K(b,a)=F(t_b,t_a)\exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\tag{3-52}$$

并且论述证明 F 只可能与时间的差值有关，即 $F(t_b,t_a)=F(t_b-t_a)$。

参考答案：

由于自由粒子拉氏量是二次型的，所以可以用 $(3-51)$ 式来求传播子，也就是：

$$K(b,a)=F(t_b,t_a)\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{cl}[b,a]\right) \tag{3-51}$$

根据问题2-1，自由粒子的经典作用量 $S_{cl}[b,a]$ 为

$$S_{cl}[b,a]=\frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{t_b-t_a}$$

代入即得 $(3-52)$。下面来论述 $F(t_b,t_a)=F(t_b-t_a)$。

事实上，可以论证更一般的结论：

对于拉氏量中不显含有 t 的情形，其传播子 $K(b,a)$ 均只可能与时间的差值有关，即 $K(b,a)=K(x_b,t_b;x_a,t_a)=K(x_b,x_a,t_b-t_a)$。换句话说，我们不可能知道做实验的绝对时间！

为此，我们考虑如下两个系统：

$$S_{\text{系统 }1}=\int_{t_1}^{t_2}L(x,\dot{x})dt \quad \text{和} \quad S_{\text{系统 }2}=\int_{t_3}^{t_4}L(x,\dot{x})dt$$

两个系统的 L 是一样的，并且都不显含 t，区别在于系统 1 的端点为 (t_1,x_a) 和 (t_2,x_b)，系统 2 的端点为 (t_3,x_a) 和 (t_4,x_b)，t_1 与 t_3、t_2 与 t_4 不一定相等，但是保持 $t_4-t_3=t_2-t_1=T$。不管是量子力学还是经典力学，系统的所有性质由所给出的作用量 S 确定，换言之，$S_{\text{系统 }1}$ 和 $S_{\text{系统 }2}$ 包含了这两个系统自身所有的经典力学性质和量子力学性质。现在就来考虑两个系统对应的路径积分。

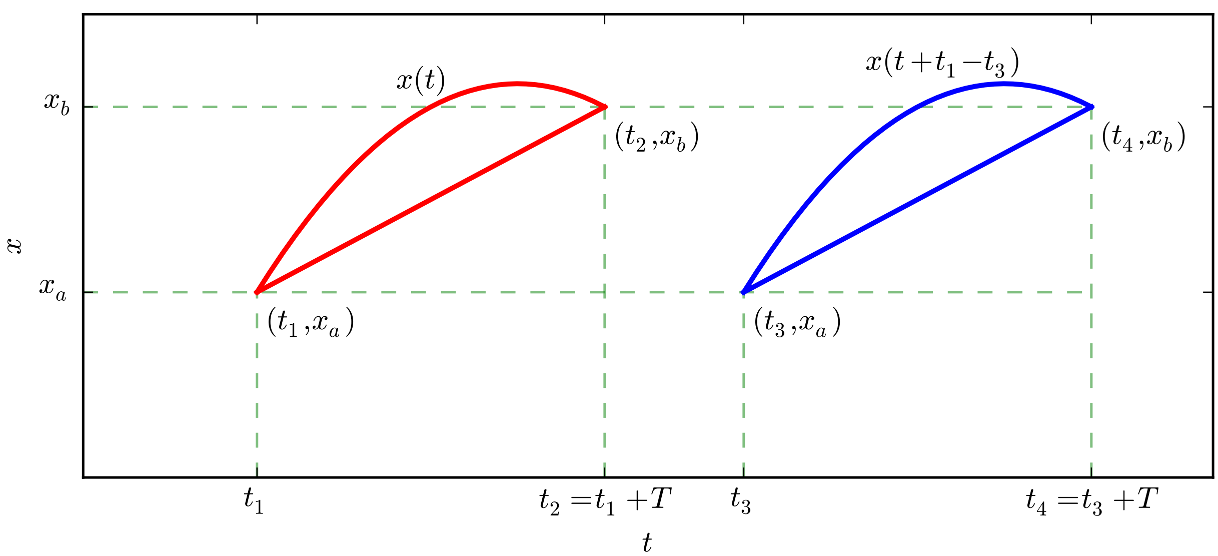


图 1: 考虑两个不同的但类似的系统

路径积分是要把两时空点之间所有的路径按 $e^{iS/\hbar}$ 叠加起来，从图 1 可以看出，系统 1 的每条路径（如 $x(t)$）都与系统 2 的某条路径（如 $x(t+t_1-t_3)$）一一对应，它们仅仅相差一个平移。而对于系统 1 的 $x(t)$ 和系统 $2x(t+t_1-t_3)$，考虑它们的作用量：

$$S[x(t)]=\int_{t_1}^{t_2}L(x(t),\dot{x}(t))dt \quad \text{和} \quad S[x(t+t_1-t_3)]=\int_{t_3}^{t_4}L(x(t+t_1-t_3),\dot{x}(t+t_1-t_3))dt$$

可以设 $L(x(t),\dot{x}(t))$ 的原函数为 $F(t)$[1]，因此

$$\begin{aligned}S[x(t)] =&F(t)|_{t_1}^{t_2} = F(t_2) - F(t_1)\\ S[x(t+t_1-t_3)] =&F(t+t_1-t_3)|_{t_1}^{t_2}\\ =&F(t_4+t_1-t_3) - F(t_3+t_1-t_3)\\ =&F(t_2) - F(t_1) = S[x(t)]\end{aligned}$$

因此，系统 1 的每条路径（如 $x(t)$）都与系统 2 的某条路径（如 $x(t+t_1-t_3)$）一一对应，并且路径的作用量相同（这意味着两条路径对各自传播子的贡献是相同的）——结论就是：两个系统的传播子是一样的！我们无法区分它们！由于 t_1, t_3 是任意的，所以传播子不可能跟它们有关，唯一固定的时间变量是时间差 T，因此，传播子只可能是 T 的函数。

上述仅仅是论证，不能算是证明，但是写出严格的数学证明是不必要的。因为这里的路径积分的定义，本身都是不严格的，我们只是凭借着已知的数学基础和物理直觉来得到这些结论。

回到原题，自由粒子的拉氏量不显含 t，因此它的传播子 $K(b,a) = F(t_b,t_a)\exp\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}$ 只能是时间差 t_b-t_a 的函数，因此 $F(t_b,t_a)$ 只能是时间差 t_b-t_a 的函数。

3.4.2 问题 3-7

关于 F 的进一步的信息可以由式 $(2-31)$ 表示的性质获得。首先注意，问题3-6 的结果意味着 $F(t_b-t_a)$ 可以写成 $F(t)$，其中 t 是时间间隔 t_b-t_a。通过在式 $(3-52)$ 中应用这种形式的 F，再代入式 $(2-31)$，用 $F(t)$ 和 $F(s)$ 表示 $F(t+s)$，其中 $t=t_b-t_c, s=t_c-t_a$。证明，若将 F 写为

$$F(t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}f(t) \tag{3-53}$$

则新函数 $f(t)$ 必然满足

$$f(t+s) = f(t)f(s) \tag{3-54}$$

这意味着，$f(t)$ 必定具有下述形式：

$$f(t) = \exp(at) \tag{3-55}$$

其中 a 可以是复数，即 $a=\alpha+i\beta$。由我们至此所建立的原则出发，很难得到关于函数 $f(t)$ 的进一步的信息。然而，按式 $(2-21)$ 中的定义而特殊选定的归一化常数 A 意味着，近似到 ϵ 的第一阶有 $f(\epsilon)=1$。这相应于在式 $(3-55)$ 中令 a 等于零。$F(t)$ 的结果与式 $(3-3)$ 一致。

参考答案：

对于自由粒子的传播子，由问题3-5 我们已经确定了它与 x_a, x_b 有关的部分，剩下一个只与 t_b-t_a 相关的因此，因此，将它代进 $(2-31)$ 中，可以先完成对 x_c 的积分，换言之（为了减少变量个数，我

[1] 不管我们能不能把它求出来，但是理论上它是存在的。相应地，$L(x(t+t_1-t_3),\dot{x}(t+t_1-t_3))$ 的原函数就是 $F(t+t_1-t_3)$。

们让 $m=\hbar=1$)：

$$\begin{aligned}F(t+s)\exp\frac{i(x_b-x_a)^2}{2(t+s)}=&K(b,a)\\=&\int_{-\infty}^{+\infty}K(b,c)K(c,a)dx_c\\=&\int_{-\infty}^{+\infty}F(t)\exp\frac{i(x_b-x_c)^2}{2t}\cdot F(s)\exp\frac{i(x_c-x_a)^2}{2s}dx_c\\=&F(t)F(s)\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\frac{i(x_b-x_c)^2}{2t}\exp\frac{i(x_c-x_a)^2}{2s}dx_c\end{aligned}$$

可以直接完成上述积分，这需要把指数展开，然后配平方，过程中的系数会比较复杂，但是没有本质上的困难[2]。结果是：

$$\sqrt{-\frac{2\pi ts}{i(t+s)}}\exp\frac{i(x_b-x_a)^2}{2(t+s)}$$

因此

$$F(t+s)=F(t)F(s)\sqrt{-\frac{2\pi ts}{i(t+s)}}=F(t)F(s)\sqrt{\frac{(2\pi it)(2\pi is)}{2\pi i(t+s)}}$$

所以可以设 $F(t)=\sqrt{\frac{1}{2\pi it}}f(t)$ (恢复 $m,\hbar$ 后正好是 $(3-53)$ 式)，得到 $(3-54)$ 式

$$f(t+s)=f(s)f(t)$$

这是关于 $f(t)$ 的函数方程，指数函数是它的唯一解[3]，因此 $f(t)$ 可以一般地写成 $(3-55)$ 式

$$f(t)=\exp(at)$$

完整而正确的答案是 $a=0$，但是这里我们无法得到这一结果了。

可见，如果传播子仅仅确定到相差一个只与 t 相关的因子 $f(t)$，那么我们可以通过 $(2-31)$ 式得到关于 $f(t)$ 的一个函数方程，通过求解函数方程的方式可以进一步确定 $f(t)$ 的部分信息——一般来说是相差一个复常数因子。后面将通过更加有力的方式得到这一因子 (参考第四章)。

3.5 3-6 势场中的运动

本节的问题的主要核心是经典作用量的计算，因此，它更像节 2-1 的问题。

[2] 但是读者如果熟悉傅里叶变换，我们可以偷偷懒。设 $y=x_c-x_a$，则

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\frac{i(x_b-x_c)^2}{2t}\exp\frac{i(x_c-x_a)^2}{2s}dx_c=\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\frac{i(x_b-x_a-y)^2}{2t}\exp\frac{iy^2}{2s}dy$$

上式正好是函数 $\exp\frac{i(x_b-x_a)^2}{2t}$ 和 $\exp\frac{ix^2}{2s}$ 的卷积，根据傅里叶变换的性质，卷积的傅里叶变换等于傅里叶变换的乘积，而 $\exp\frac{i(x_b-x_a)^2}{2t}$ 和 $\exp\frac{ix^2}{2s}$ 的傅里叶变换分别为 $\sqrt{-\frac{2\pi t}{i}}\exp\frac{\omega^2 t}{2i}$ 和 $\sqrt{-\frac{2\pi s}{i}}\exp\frac{\omega^2 s}{2i}$ 因此上述积分的傅里叶变换等于

$$\sqrt{-\frac{2\pi t}{i}}\exp\frac{\omega^2 t}{2i}\sqrt{-\frac{2\pi s}{i}}\exp\frac{\omega^2 s}{2i}=2\pi i\sqrt{ts}\exp\frac{\omega^2(t+s)}{2i}$$

即，所以所求积分等于上式的逆傅里叶变换，即

$$\sqrt{-\frac{2\pi ts}{i(t+s)}}\exp\frac{i(x_b-x_a)^2}{2(t+s)}=\sqrt{-\frac{2\pi ts}{i(t+s)}}\exp\frac{i(x_b-x_a)^2}{2(t+s)}$$

[3] 从数学角度来看，这种说法欠缺准确性，只有加上连续性要求——$f(t)$ 关于 t 是连续的，才能证明指数函数是唯一解。当然，从物理角度讲，我们认为这种连续性是“显然成立”的。

3.5.1 问题 3-8

谐振子的拉格朗日量是

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{3-58}$$

证明所得的传播子是 (参看问题 2-2)

$$K = F(T)\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega T - 2x_a x_b\right]\right\} \tag{3-59}$$

式中 $T = t_b - t_a$。注意，相乘函数 $F(T)$ 的显式并没有得出来。用其他方法可以获得它，并且对于谐振子，它是 (参考节 3-11)

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2} \tag{3-60}$$

参考答案：

在问题 2-2 中我们已经求出对于谐振子 $(3-58)$ 的经典作用量为 $(2-9)$

$$S_{c1} = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega T - 2x_a x_b\right]$$

而作用量是二次型的，因此它具有精确的表达式 $(3-59)$

$$K = F(T)\exp\frac{iS_{cl}}{\hbar} = F(T)\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega T - 2x_a x_b\right]\right\}$$

至于 $F(T)$ 的进一步信息，需要利用下一节的方法才能继续求解。当然，有毅力的读者可以仿照问题 3-7，利用式 $(2-31)$ 得到关于 $F(T)$ 的函数方程。但我不是特别建议读者去做这件事情。

3.5.2 问题 3-9

找出在恒定外场 f 中运动的粒子的传播子，其拉格朗日量为

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + fx \tag{3-61}$$

结果是

$$K = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m(x_b-x_a)^2}{2T} + \frac{fT(x_a+x_b)}{2} - \frac{f^2T^3}{24m}\right]\right\} \tag{3-62}$$

其中 $T = t_b - t_a$。

参考答案：

在问题 2-3 中我们已经求出对于拉氏量 $(3-61)$ 的经典作用量为

$$S_{c1} = \frac{m(x_b-x_a)^2}{2T} + \frac{fT(x_a+x_b)}{2} - \frac{f^2T^3}{24m}$$

而作用量是二次型的，因此它具有精确的表达式

$$K = F(T)\exp\frac{iS_{cl}}{\hbar} = F(T)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m(x_b-x_a)^2}{2T} + \frac{fT(x_a+x_b)}{2} - \frac{f^2T^3}{24m}\right]\right\}$$

为了确定 $F(T)$，只需要留意到，式 $(3-50)$ 意味着

$$F(t_b,t_a) = \int_0^0 \exp\left\{\int_{ta}^{t_b}\left[a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2\right]dt\right\}\mathscr{D}y(t)$$

注意到被积函数 $a(t)\dot{y}^2+b(t)\dot{y}y+c(t)y^2$ 仅仅包含了二次幂的项，换言之，诸如 $f(t)x$ 的一次幂的项，并不影响 $F(t_b,t_a)$，因此，在问题3-9 中，$F(T)$ 等于不存在 fx 项时 (即自由粒子) 的结果，因此

$$F(T)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}$$

至此已经得到 $(3-62)$。

3.5.3 问题 3-10

在 z 方向上恒定的外磁场中运动的粒子带电荷 e，质量是 m，其拉格朗日量为

$$L=\frac{m}{2}\left(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2\right)+\frac{eB}{2c}\left(x\dot{y}-\dot{x}y\right) \tag{3-63}$$

证明：所得的传播子是

$$\begin{aligned}K=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\left(\frac{\omega T/2}{\sin(\omega T/2)}\right)\exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\left[\frac{(z_b-z_a)^2}{T}\right.\right.\\ \left.\left.+\left(\frac{\omega/2}{\tan(\omega T/2)}\right)\left[(x_b-x_a)^2+(y_b-y_a)^2\right]+\omega(x_ay_b-x_by_a)\right]\right\}\end{aligned} \tag{3-64}$$

其中 $T=t_b-t_a,\omega=eB/mc$。

参考答案：

为了简化符号，我们设 $m=eB/c=1$，那么 L 简化为

$$L=\frac{1}{2}\left(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2\right)+\frac{1}{2}\left(x\dot{y}-\dot{x}y\right)$$

我们的工作分为两步，第一步是求经典作用量，第二步求 $F(T)$。注意到 L 可以分为两部分：一部分是 x,y 相关的，另一部分是 z 的，其中 z 部分 $\frac{1}{2}\dot{z}^2$ 仅仅相当于一个自由粒子，因此可以分离出来，得到

$$K=\left(\frac{1}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}\exp\frac{i}{2\hbar}\frac{(z_b-z_a)^2}{T}\times K_{x,y}$$

其中 $K_{x,y}$ 是对应于拉氏量

$$L_{x,y}=\frac{1}{2}\left(\dot{x}^2+\dot{y}^2\right)+\frac{1}{2}\left(x\dot{y}-\dot{x}y\right)$$

的传播子。出于二次型拉氏量一贯的思路，我们先求它的经典作用量，为此，变分得到经典运动方程：

$$\begin{cases}\ddot{x}=\dot{y}\\ \ddot{y}=-\dot{x}\end{cases}$$

这是一个微分方程组，可以常规地求解它。然而利用复数的技巧我们可以更简便地求解，设 $Z=x+yi$，那么上述方程等价于

$$\ddot{Z}=-i\dot{Z}$$

可以解得

$$Z=C_1+C_2e^{-i(t-t_a-T/2)}\quad\text{(构造对于边界点对称的解。)}$$

其中常数由以下方程确定

$$\begin{cases}x_a+y_ai=Z_a=C_1+C_2e^{iT/2}\\ x_b+y_bi=Z_b=C_1+C_2e^{-iT/2}\end{cases}$$

亦即

$$\begin{cases} C_2 = \dfrac{Z_a - Z_b}{e^{iT/2} - e^{-iT/2}} = \dfrac{Z_a - Z_b}{2i\sin(T/2)} \\ C_1 = \dfrac{1}{2}[Z_a + Z_b - C_2(e^{iT/2} + e^{-iT/2})] = \dfrac{1}{2}\left[Z_a + Z_b - \dfrac{Z_a - Z_b}{i\tan(T/2)}\right] \end{cases}$$

(后面的过程告诉我们，没必要把 C_1 求出来。) 再看 $L_{x,y}$，有

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2\right) &= \frac{1}{2}\dot{Z}\dot{\bar{Z}} \\ \frac{1}{2}\left(x\dot{y} - \dot{x}y\right) &= \frac{1}{2}Re\left(-i\bar{Z}\dot{Z}\right) \\ L_{x,y} &= Re\left(\frac{1}{2}\dot{Z}\dot{\bar{Z}} - \frac{1}{2}i\bar{Z}\dot{Z}\right) \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} S_{cl} = &\int_{t_a}^{t_b} L_{x,y}dt = Re\int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{1}{2}\dot{Z}\dot{\bar{Z}} - \frac{1}{2}i\bar{Z}\dot{Z}\right)dt \\ =&\frac{1}{2}Re\left[\dot{Z}\bar{Z}\Big|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b}\left(\ddot{Z} + iZ\right)\bar{Z}dt\right] \\ =&\frac{1}{2}Re\left(\dot{Z}\bar{Z}\Big|_{t_a}^{t_b}\right) \\ =&\frac{1}{2}Re\left[\frac{Z_a - Z_b}{2\sin(T/2)}\left(-e^{-iT/2}\bar{Z}_b + e^{iT/2}\bar{Z}_a\right)\right] \\ =&\frac{1}{2}Re\left[\frac{Z_a - Z_b}{2\sin(T/2)}\left(-e^{-iT/2}\left(\bar{Z}_b - \bar{Z}_a\right) + \left(e^{iT/2} - e^{-iT/2}\right)\bar{Z}_a\right)\right] \\ =&\frac{1}{2}Re\left[-\frac{\left|Z_a - Z_b\right|^2}{2\sin(T/2)}e^{-iT/2} + i\left(Z_a\bar{Z}_a - Z_b\bar{Z}_a\right)\right] \\ =&\frac{1}{4\tan(T/2)}\left|Z_a - Z_b\right|^2 - \frac{1}{2}Re\left(iZ_b\bar{Z}_a\right) \\ =&\frac{1}{4\tan(T/2)}\left[(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2\right] + \frac{1}{2}(x_a y_b - x_b y_a) \end{aligned}$$

上述运算过程的困难之处在于仔细明辨哪些项是实数，哪些项是纯虚数，以达到化简的目的，一旦做到了这一点，就不是特别复杂了。所以

$$K_{x,y} = F(T)\exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\left[\left(\frac{1/2}{\tan(T/2)}\right)\left[(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2\right] + (x_a y_b - x_b y_a)\right]\right\}$$

接着可以代入 K 的表达式，恢复量纲，求得

$$\begin{aligned} K = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2} F(T)\exp\Bigg\{\frac{im}{2\hbar}\Bigg[&\frac{(z_b - z_a)^2}{T} \\ &+ \left(\frac{\omega/2}{\tan(\omega T/2)}\right)\left[(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2\right] + \omega(x_a y_b - x_b y_a)\Bigg]\Bigg\} \end{aligned}$$

$F(T)$ 的表达式需要利用后面的方法才能进一步求解得到。

本题也表名，在处理磁场中运动的相关问题之时，可以适当地利用复数来起到化简的效果。因为通过特殊的选定，复数乘积的实部或者虚部，都可以表示二维的叉积。

3.5.4 问题 3-11

假定问题 3-8 种的谐振子被外力 $f(t)$ 驱动，其其拉格朗日量为

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2 + f(t)x \tag{3-65}$$

证明：所得的传播子是 $(T = t_b - t_a)$

$$K = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{cl}\right)$$

其中

$$\begin{aligned} S_{cl} =& \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\Big[(x_b^2 + x_a^2)\cos\omega T - 2x_b x_a \\ &+ \frac{2x_b}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b} f(t)\sin\omega(t-t_a)dt + \frac{2x_a}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b} f(t)\sin\omega(t_b-t)dt \\ &- \frac{2}{m^2\omega^2}\int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t} f(t)f(s)\sin\omega(t_b-t)\sin\omega(s-t_a)dsdt\Big] \end{aligned} \tag{3-66}$$

最后这一结果在许多高深问题中非常重要。它在量子电动力学中有许多特殊的应用，因为电磁场可以表示为一组受迫谐振子。

参考答案：

显然，问题的难度仍然是求 S_{cl}，因为根据问题 3-9 中参考答案所讨论的，前面的因子 $F(T)$ 等于没有 $f(t)x$ 项时的 $F(T)$，也就是谐振子时的 $F(T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}}$（参考问题 3-8）。

接着求 S_{cl}。事实上，笔者觉得由 $(3-66)$ 式给出的形式不是特别优美的。下面会给出较为一般的形式。

为了简化记号，我们将令 $m = \omega = 1$。首先求解经典运动方程，变分的结果得到：

$$\ddot{x} + x = f(t)$$

这是一道二阶线性常微分方程，带有非齐次项。我们已经知道，这种方程的通解是对应的齐次方程的通解加上原方程的一个特解。因此，我们将它表示成

$$x(t) = x_c(t) + y(t)$$

其中 $x_c(t)$ 正是对应的齐次解，且 $x_c(t_a) = x_a, x_c(t_b) = x_b, y(t_a) = y(t_b) = 0$，也就是说，边界条件由 $x_c(t)$ 来拟合。代入到 L 中去，有

$$\begin{aligned} L =& \frac{1}{2}\left(\dot{x}_c + \dot{y}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(x_c + y\right)^2 + f(t)\left(x_c + y\right) \\ =& \left(\frac{1}{2}\dot{x}_c^2 - \frac{1}{2}x_c^2\right) + f(t)x_c + \left(\frac{1}{2}\dot{y}^2 - \frac{1}{2}y^2 + f(t)y\right) + \left(\dot{x}_c\dot{y} - x_c y\right) \end{aligned}$$

自然有 $S_{cl} = \int L dt$。可以逐一分析各项，首先第四项可以用分部积分：

$$\begin{aligned} \int_{t_a}^{t_b}\left(\dot{x}_c\dot{y} - x_c y\right)dt =& \dot{x}_c y\big|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b}\left(\ddot{x}_c + x_c\right)ydt \\ =& \dot{x}_c(t_b)y(t_b) - \dot{x}_c(t_a)y(t_a) = 0 \end{aligned}$$

因此这一项实际是 0。再看第一项，实际上它是自由谐振子的作用量，在问题2-2 中我们已经给出答案，这里记为 S_c

$$S_c = \frac{1}{2\sin T}\left[(x_a^2+x_b^2)\cos T - 2x_a x_b\right]$$

于是

$$S_{cl} = S_c + \int_{t_a}^{t_b} f(t)x_c dt + \int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{1}{2}\dot{y}^2 - \frac{1}{2}y^2 + f(t)y\right)dt$$

问题2-2 中，我们同样已经给出了 $x_c(t)$ 的表达式

$$x_c(t) = \frac{1}{\sin T}\left[x_b\sin(t-t_a) + x_a\sin(t-t_b)\right]$$

因此，第二项也是已知的，唯一未知的是第三项。第三项还可以分部积分化简为

$$\begin{aligned}\int_{t_a}^{t_b}\left(\frac{1}{2}\dot{y}^2 - \frac{1}{2}y^2 + f(t)y\right)dt =& \frac{1}{2}y\dot{y}\Big|_{t_a}^{t_b} - \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b}\left[\ddot{y} + y - f(t)\right]ydt + \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} f(t)ydt \\ =& \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} f(t)ydt\end{aligned}$$

因此

$$S_{cl} = S_c + \int_{t_a}^{t_b} f(t)x_c dt + \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} f(t)ydt$$

求出第三项需要知道 $\ddot{x}+x=f(t)$ 的一个特解 $y(t)$，满足 $y(t_a)=y(t_b)=0$。为了求解它，我们利用格林函数技巧。首先求解下述方程

$$\ddot{G}(t,s) + G(t,s) = \delta(t-s), G(t_a,s) = G(t_b,s) = 0$$

其中 $\delta(t)$ 是著名的狄拉克 δ 函数。求出之后，可以代入地证明：

$$y(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t,s)f(s)ds$$

就是所求的 $y(t)$，并且满足所要求的边界条件。而且一般来说，对于非齐次的线性方程，一般会存在一个格林函数 $G(t,s)$，使得非齐次的方程的解能够表示成 $\int G(t,s)f(s)ds$。求出 $G(t,s)$ 之后，作用量就可以表示成：

$$S_{cl} = S_c + \int_{t_a}^{t_b} f(t)x_c dt + \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} f(t)\int_{-\infty}^{+\infty} G(t,s)f(s)dsdt$$

请注意，我们研究的是粒子在时间区间 $[t_a,t_b]$ 内的运动，换言之，$f(t)$ 在 $t>t_b$ 或 $t<t_a$ 时是怎么样的，根本不会影响我们所研究的问题，因此，上述积分中，虽然包含了 $\int_{-\infty}^{+\infty}$，而真正对结果会有影响

仅仅是 $\int_{t_a}^{t_b}$ 部分[4]

$$S_{cl} = S_c + \int_{t_a}^{t_b} f(t)x_c dt + \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t_b} f(t)G(t,s)f(s)dsdt$$

因此问题就只剩下了求 $G(t,s)$，它已经被很多数学物理教程所求出，答案是[5]：

$$G(t,s) = \begin{cases} \dfrac{\sin(t-t_b)\sin(s-t_a)}{\sin T}, & t > s \\ \dfrac{\sin(s-t_b)\sin(t-t_a)}{\sin T}, & t < s \end{cases}$$

积分号是 $\int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t_b}$, 也就是说积分区域是有 $t = t_a, t = t_b, s = t_a, s = t_b$ 围成的方形区域, 由于 $G(t,s)$ 的分段特点，可以把它以对角线分成两块，分别对应于 $t > s$ 和 $t < s$，分别积分，如图 2 所示。

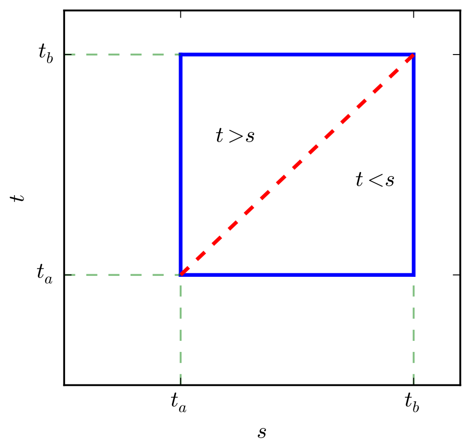


图 2: 划分积分区域

整理积分的结果是

$$\frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t_b} f(t)G(t,s)f(s)dsdt = \frac{1}{\sin T}\int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t} f(t)\sin(t-t_b)\sin(s-t_a)f(s)dsdt$$

至此，各个未知的量已经求出，最后综合以上各个步骤，并且恢复 m, ω，可以得到 $(3-66)$ 式。

[4] 我们也可以换个更数学的角度来理解它，定义一个新的力：

$$\hat{f}(t) = \begin{cases} f(t), t \in [t_a, t_b] \\ 0, \text{其他} \end{cases}$$

在我们所研究的时间区间内，我们并没有办法区别究竟所受外力是 $f(t)$ 还是 $\hat{f}(t)$，因此必然有：

$$\begin{aligned} y(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(t,s)f(s)ds \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(t,s)\hat{f}(s)ds \\ &= \int_{t_a}^{t_b} G(t,s)f(s)ds \end{aligned}$$

当然，这也意味着这样所求出来的 $y(t)$ 的有效区间仅仅是 $[t_a, t_b]$。

[5] 可以参考问题 7-8

3.5.5 问题 3-12

若一个谐振子的波函数 (在 $t=0$ 时) 是

$$\psi(x,0)=\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2\right] \tag{3-67}$$

则应用式 $(3-42)$ 和问题 3-8 的结果证明：

$$\psi(x,T)=\exp\left\{-\frac{i\omega T}{2}-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x^2-2axe^{-i\omega T}+a^2\cos(\omega T)e^{-i\omega T}\right]\right\} \tag{3-68}$$

再找出几率分布 $|\psi|^2$。

参考答案：

问题解决的思路很清晰，跟问题 3-4 类似，不外乎就是求积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(y-a)^2\right]\times\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2}\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[(x^2+y^2)\cos\omega T-2xy\right]\right\}dy$$

同样，为了减少变量，让 $m=\omega=\hbar=1$，那么积分简化为

$$\left(\frac{1}{2\pi i\sin T}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{ix^2}{2\tan T}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{1}{2}(y-a)^2+\frac{i}{2\sin T}\left(y^2\cos T-2xy\right)\right]dy$$

类似的积分我们在问题 3-7 已经做过了，为此，对虚指数部分配方，得到

$$\frac{i}{2\sin T}\left(y^2\cos T-2xy\right)=\frac{i}{2\tan T}\left(x\sec T-y\right)^2-\frac{ix^2}{\sin 2T}$$

所以积分可以转换为

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1}{2\pi i\sin T}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{ix^2}{2\tan T}-\frac{ix^2}{\sin 2T}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{1}{2}(y-a)^2+\frac{i}{2\tan T}\left(x\sec T-y\right)^2\right]dy\\=&\left(\frac{1}{2\pi i\sin T}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{i\tan T}{2}x^2\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{i}{2\tan T}\left(x\sec T-y\right)^2-\frac{1}{2}(y-a)^2\right]dy\end{aligned}$$

如果令 $s=-i,t=\tan T$，则积分完全就是问题 3-7 中的样子了，直接根据问题 3-7 就可以得到结果

$$\sqrt{\frac{2\pi\tan T}{\tan T-i}}\exp\frac{i(x\sec T-a)^2}{2(\tan T-i)}$$

所以总的结果是

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1}{2\pi i\sin T}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{i\tan T}{2}x^2\right)\sqrt{\frac{2\pi\tan T}{\tan T-i}}\exp\frac{i(x\sec T-a)^2}{2(\tan T-i)}\\=&\sqrt{\frac{1}{\cos T+i\sin T}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left[x^2-2axe^{-iT}+a^2\cos Te^{-iT}\right]\right\}\quad\text{(合并指数，分母实数化，整理)}\\=&\exp\left\{-\frac{iT}{2}-\frac{1}{2}\left[x^2-2axe^{-iT}+a^2\cos Te^{-iT}\right]\right\}\end{aligned}$$

恢复 $m,\omega,\hbar$ 后得到 $(3-68)$ 式。

要注意，$(3-67)$ 式是还没有归一化的，因而 $(3-68)$ 式也并没有归一化。对 $(3-67)$ 式归一化，也就是给 $\psi(x,0)$ 乘上因子

$$\left(\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,0)|^2dx\right)^{-1/2}=\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x-a)^2\right]dx\right)^{-1/2}=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}$$

从而完整的 $\psi(x,T)$ 为

$$\psi(x,T)=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\exp\left\{-\frac{i\omega T}{2}-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x^2-2axe^{-i\omega T}+a^2\cos(\omega T)e^{-i\omega T}\right]\right\}$$

最后，要求的几率分布为

$$|\psi(x,T)|^2=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x-a\cos\omega T)^2\right]$$

3.5.6 附：求 $F(T)$ 的方法

前面多次涉及到了求二次型拉氏量的传播子前面的因子 $F(t_b,t_a)$（被称为量子涨落因子），事实上，对于任意的二次型拉氏量 L，这个问题已经完全得到解决，答案是：

$$K(b,a)=\left(\frac{1}{2\pi i\hbar}\right)^{D/2}\sqrt{-\det\left(\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_a\partial x_b}\right)}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_{cl}\right)$$

其中 D 是空间的维数，而 $\det\left(\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_a\partial x_b}\right)$ 被称为 van Vleck-Pauli-Morette 行列式。用这个式子，可以快速计算以上几个问题的 $F(T)$。此处不打算对这个结果进行证明。证明过程可以参考《路径积分与量子物理导引：现代高等量子力学初步》，里边还有包含求涨落因子更多的技巧。

3.6 3-11 用傅里叶级数对路径积分求值

3.6.1 问题 3-13

保留所有常数，证明，这意味着，当 N 趋于无限大时，变换系数行列式 J 满足

$$J\left(\frac{\pi}{\sqrt{2}}\right)\left(\frac{2T}{\pi^2\epsilon}\right)^{(N+1)/2}\left(\prod_{n=1}^{N}\frac{1}{n}\right)\to 1\quad 当N\to\infty \tag{3-94}$$

参考答案：

4　第四章 量子力学的薛定谔描述

4.1　4-1 薛定谔方程

4.1.1　问题 4-1

证明：对于一个在三维势 $V(\boldsymbol{x},t)$ 中运动的粒子，薛定谔方程是

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi \tag{4-13}$$

这个方程是薛定谔在 1925 年发现的，并且自那以后形成了量子力学发展的中心。

参考答案：

事实上，整个证明的框架在本节已经给出，从一维到三维的推广并没有本质上的困难。对应于 $(4-3)$ 式，我们给出

$$\psi(\boldsymbol{x},t+\epsilon)=\frac{1}{B}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon L\left(\frac{\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}}{\epsilon},\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}}{2}\right)\right]\psi(\boldsymbol{y},t)d^3\boldsymbol{y}$$

这里 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3),\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,y_3)$，而 $d^3\boldsymbol{y}$ 表示三重积分 $dy_1dy_2dy_3$，积分区域是全空间。为了区别，我们这里将常数改为 B。同样地，对于

$$L=\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^2-V(\boldsymbol{x},t)$$

式 $(4-4)$ 对应于

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t+\epsilon)=&\frac{1}{B}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^2}{2\epsilon}\right]\\&\times\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\epsilon V\left(\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}}{2},t\right)\right]\psi(\boldsymbol{y},t)d^3\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

理由是一样的，作代换 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\eta}$，得到类似 $(4-5)$ 式：

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t+\epsilon)=&\frac{1}{B}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im\boldsymbol{\eta}^2}{2\hbar\epsilon}\right)\\&\times\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\epsilon V\left(\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{\eta}}{2},t\right)\right]\psi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\eta},t)d^3\boldsymbol{\eta}\end{aligned}$$

当 $|\boldsymbol{\eta}|$ 是 $\sqrt{\epsilon\hbar/m}$ 量级时，第一个指数的相位改变为一弧度的量级，因此，积分的大部分贡献来源于这个量级的 $\boldsymbol{\eta}$。对 ψ 作展开，保留 ϵ 量级的项，结果类似 $(4-6)$ 式：

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t)+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=&\frac{1}{B}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im\boldsymbol{\eta}^2}{2\hbar\epsilon}\right)\\&\times\left[1-\frac{i}{\hbar}\epsilon V(\boldsymbol{x},t)\right]\left[\psi(\boldsymbol{x},t)+(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\psi+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)^2\psi\right]d^3\boldsymbol{\eta}\end{aligned}$$

对于主项

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im\boldsymbol{\eta}^2}{2\hbar\epsilon}\right)d^3\boldsymbol{\eta}=\iiint_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{im(\eta_1^2+\eta_2^2+\eta_3^2)}{2\hbar\epsilon}\right]d\eta_1d\eta_2d\eta_3=A^3$$

这也意味着 $B=A^3$，事实上对于 D 维空间有 $B=A^D$。而对于一次项：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im\boldsymbol{\eta}^2}{2\hbar\epsilon}\right)(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\psi d^3\boldsymbol{\eta}=0\quad\text{[对各分量展开分别积分即可，用到 (4-9)]}$$

接着是二次项：

$$(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)^2=\eta_1^2\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\eta_2^2\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\eta_3^2\frac{\partial^2}{\partial x_3^2}+2\eta_1\eta_2\frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_2}+2\eta_2\eta_3\frac{\partial^2}{\partial x_2\partial x_3}+2\eta_3\eta_1\frac{\partial^2}{\partial x_3\partial x_1}$$

可以证明：

$$\iint_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{im(\eta_1^2+\eta_2^2+\eta_3^2)}{2\hbar\epsilon}\right]\eta_i\eta_j d\eta_i d\eta_j=0\quad(i,j=1,2,3,\ i\neq j)$$

所以

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im\boldsymbol{\eta}^2}{2\hbar\epsilon}\right)(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)^2\psi d^3\boldsymbol{\eta}\\=&\iiint_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im\boldsymbol{\eta}^2}{2\hbar\epsilon}\right)\left(\eta_1^2\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\eta_2^2\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\eta_3^2\frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right)\psi d\eta_1 d\eta_2 d\eta_3\\=&\frac{i\hbar}{m}A^3\epsilon\nabla^2\psi\end{aligned}$$

于是类似 $(4-11)$ 式，有

$$\psi+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=\psi-\frac{i}{\hbar}\epsilon V\psi+\frac{i\hbar\epsilon}{2m}\nabla^2\psi$$

约去 ψ，上式是对小 ϵ 的近似式，当 $\epsilon\to 0$ 时，上式是精确成立的，因此上式等价于微分方程

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi \tag{4-13}$$

这就是三维空间的薛定谔方程。

4.1.2 问题 4-2

一个带电粒子在电磁场中，其拉格朗日量是

$$L=\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{x}}^2+\frac{e}{c}\dot{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)-e\phi(\boldsymbol{x},t) \tag{4-17}$$

其中 $\dot{\boldsymbol{x}}$ 是速度矢量，e 是电荷，c 是光速，$\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 是矢势和标势，证明：相应的薛定谔方程是：

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi+e\phi\psi \tag{4-18}$$

于是，哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+e\phi \tag{4-19}$$

参考答案：

简单起见，我们令 $e=c=\hbar=m=1$。模仿问题 4-1，我们有类似 $(4-4)$ 式：

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t+\epsilon)=&\frac{1}{A^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{i(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^2}{2\epsilon}\right]\exp\left[i(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\cdot\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}}{2},t\right)\right]\\&\times\exp\left[-i\epsilon\phi\left(\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}}{2},t\right)\right]\psi(\boldsymbol{y},t)d^3\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

作代换 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\eta}$，有

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t+\epsilon)=&\frac{1}{A^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\eta}^2}{2\epsilon}\right)\exp\left[i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{\eta}}{2},t\right)\right]\\&\times\exp\left[-i\epsilon\phi\left(\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{\eta}}{2},t\right)\right]\psi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\eta},t)d^3\boldsymbol{\eta}\end{aligned}$$

展开至 ϵ 的一阶项，这意味着对于 $\boldsymbol{\eta}$ 是展开至 $|\boldsymbol{\eta}|^2$，首先指出

$$\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{\eta}}{2},t\right)=\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A})$$

完整的展开式是

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t)+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=&\frac{1}{A^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\eta}^2}{2\epsilon}\right)\exp\left[i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A}+\frac{1}{2}i(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A})\right]\\&\times\left[1-i\epsilon\phi\left(\boldsymbol{x},t\right)\right]\left[\psi+(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\psi+\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)^2\psi\psi\right]d^3\boldsymbol{\eta}\end{aligned}$$

这里的展开还没完全充分，其中 $\exp\left[\frac{1}{2}i(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A})\right]$ 还可以展开为

$$1+\frac{1}{2}i(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A})$$

现在，紧接着的一个疑问就是：究竟哪些项该展开，那些项不该展开？为什么 $\exp\left(i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A}\right)$ 不一起展开为 $1-i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A}$？这里读者要明确的是，展开的是 ϵ 的一阶项，也就是 $|\boldsymbol{\eta}|^2$ 的二阶项，只有这个量级的才能用于近似展开，而前面的 $\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\eta}^2}{2\epsilon}\right)$ 和 $\exp\left(i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A}\right)$ 项都不在这个量级中。

那么，完整的展开式应该是：

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t)+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=&\frac{1}{A^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\eta}^2}{2\epsilon}\right)\exp\left(i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A}\right)\\&\times\left[1+(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)+\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)^2+\frac{1}{2}i(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{A})-i\epsilon\phi\left(\boldsymbol{x},t\right)\right]\psi d^3\boldsymbol{\eta}\end{aligned}$$

使用配方法，即设 $\boldsymbol{\eta}=\boldsymbol{\xi}-\epsilon\boldsymbol{A}$，保留一阶项得

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},t)+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{A^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\xi}^2}{2\epsilon}\right)\times&\left[1+\boldsymbol{\xi}\cdot\nabla-\epsilon\boldsymbol{A}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\xi}\cdot\nabla\right)^2\right.\\&\left.+\frac{1}{2}i\epsilon\boldsymbol{A}^2+\frac{1}{2}i(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\nabla})(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{A})-i\epsilon\phi\left(\boldsymbol{x},t\right)\right]\psi d^3\boldsymbol{\xi}\end{aligned}$$

用类似问题 4-1 所涉及的积分，可以逐步完成，结果是

$$\psi+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=\psi-\epsilon\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi+\frac{1}{2}i\epsilon\nabla^2\psi+\frac{1}{2}i\epsilon\boldsymbol{A}^2\psi-\frac{1}{2}\epsilon(\nabla\cdot A)\psi-i\epsilon\phi\psi$$

约去 ψ，上式是对小 ϵ 的近似式，当 $\epsilon\to 0$ 时，上式是精确成立的，因此上式等价于微分方程

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{1}{2}\nabla^2\psi-i\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi-\frac{1}{2}i(\nabla\cdot A)\psi-\frac{1}{2}\boldsymbol{A}^2\psi+\phi\psi$$

注意到

$$2\boldsymbol{A}\cdot\nabla+\nabla\cdot\boldsymbol{A}=\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\nabla$$

因此，上述方程可以更加紧凑地写成

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{1}{2}\left(\nabla-i\boldsymbol{A}\right)\left(\nabla-i\boldsymbol{A}\right)\psi+\phi\psi$$

恢复量纲后可以写成 $(4-18)$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi+e\phi\psi \tag{4-18}$$

4.1.3 问题 4-3

将 ψ 中的每个 i 都换成 $-i$，就得到其复共轭函数 ψ^*，证明：ψ^* 满足

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = (H\psi)^* \tag{4-20}$$

参考答案：

其实这道题目很简单，复数具有性质 $(z_1z_2)^* = z_1^*z_2^*$。因此，对薛定谔方程 $-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$ 逐项取共轭就得到 $(4-20)$ 式。

4.1.4 问题 4-4

证明

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}x = x\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\frac{\partial}{\partial x} \tag{4-22}$$

因此，对于式 $(4-15)$ 中的 H 有

$$Hx - xH = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} \tag{4-23}$$

参考答案：

这种题目只需要把它作用于任意函数 f：

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(xf) =& \frac{\partial}{\partial x}\left(f + x\frac{\partial}{\partial x}f\right)\\ =&\frac{\partial}{\partial x}f + \left(\frac{\partial}{\partial x}f + x\frac{\partial^2}{\partial x^2}f\right)\\ =&2\frac{\partial}{\partial x}f + x\frac{\partial^2}{\partial x^2}f\end{aligned}$$

那么，对于式 $(4-15)$ 的 H

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \tag{4-15}$$

有

$$\begin{aligned}Hx - xH =& \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}x + Vx\right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}x\frac{\partial^2}{\partial x^2} + xV\right)\\ =& -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}x - x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\\ =& -\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\end{aligned}$$

4.1.5 问题 4-5

使用关系

$$K(b,a) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(b,c)K(c,a)dx_c \tag{4-26}$$

以及 $t_c - t_a = \epsilon$ 是一无限小量，证明：若 t_b 大于 t_a，则传播子 K 满足

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_a}K(b,a) = H_a^*K(b,a) \tag{4-27}$$

参考答案：

首先对比式 $(4-27)$ 与问题4-3 的式 $(4-20)$，发现两者的方程式一样的。因此可以猜测，证明本题的关键是找出哪里出现了“共轭”。

根据式 $(4-26)$，我们有

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\int_{-\infty}^{+\infty}K(x_b,t_b;x_c,t_c)K(x_c,t_c;x_a,t_a)dx_c$$

令 $t_c-t_a=\epsilon$ 是一个无穷小量,那么传播子 $K(x_c,t_c;x_a,t_a)$ 可以近似地正比于 $\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon L\left(\frac{x_c-x_a}{\epsilon},\frac{x_c+x_a}{2}\right)\right]$，因此，上式近似为

$$K(x_b,t_b;x_a,t_c-\epsilon)=\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{+\infty}K(x_b,t_b;x_c,t_c)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\epsilon L\left(\frac{x_c-x_a}{\epsilon},\frac{x_c+x_a}{2}\right)\right]dx_c$$

设 $\varepsilon=-\epsilon$，那么

$$K(x_b,t_b;x_a,t_c+\varepsilon)=\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{+\infty}K(x_b,t_b;x_c,t_c)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varepsilon L\left(\frac{x_c-x_a}{\varepsilon},\frac{x_c+x_a}{2}\right)\right]dx_c$$

对比上式与式 $(4-3)$，就会发现，除了将 i 替换 $-i$ 之外，两者的形式是一样的，因此，$\psi(x,t)$ 与 $K(x_b,t_b;x_a,t_c)$ 必然满足同样的方程 (即薛定谔方程，其中 x 对应 x_a，t 对应 t_c，ϵ 对应于 ε)，唯一的区别就是将 i 换成 $-i$，用数学的语言，也就是取了共轭[6]。因此必然有

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_c}K(x_b,t_b;x_a,t_c)=H_a^*K(x_b,t_b;x_a,t_c)$$

将 t_c 换成 t_a，结果依然成立，因此可以简写成

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_a}K(b,a)=H_a^*K(b,a)$$

4.1.6 问题 4-6

证明：当 $t_b\to t_a+0$ 时,

$$K(b,a)\to\delta(x_b-x_a)$$

参考答案：

利用 $(4-2)$ 式：

$$\psi(x_b,t_b)=\int_{-\infty}^{+\infty}K(x_b,t_b;x_a,t_a)\psi(x_a,t_a)dx_a \tag{4-2}$$

让 $t_b\to t_a+0$，即

$$\psi(x_b,t_a+0)=\int_{-\infty}^{+\infty}K(x_b,t_a+0;x_a,t_a)\psi(x_a,t_a)dx_a$$

左端可以直接取极限得到 $\psi(x_b,t_a)$：

$$\psi(x_b,t_a)=\int_{-\infty}^{+\infty}K(x_b,t_a+0;x_a,t_a)\psi(x_a,t_a)dx_a$$

于是，积分的过程相当于将 $\psi(x_a,t_a)$ 中的 x_a 换成 x_b，这跟 $\delta(x_b-x_a)$ 的作用是一样的，因此

$$K(x_b,t_a+0;x_a,t_a)\to\delta(x_b-x_a)$$

[6] i 与 $-i$ 都是 -1 的平方根，它们具有一样的性质，把任意含有 i 的等式中的 i 统一换成 $-i$，等式依然成立。

4.1.7 问题 4-7

证明：

$$\int K^*(b,a)K(b,c)dx_b = K^*(c,a)$$

参考答案：

首先，用 $K(a,c)$ 乘以式 $(4-37)$ 再对 x_c 积分：

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty} K(x_a,t_a;c)\int_{-\infty}^{+\infty} K^*(b;x'_a,t_a)K(b;x_a,t_a)dx_b dx_a\\ =&\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x'_a-x_a)K(x_a,t_a;c)dx_a = K(x'_a,t_a;c)\end{aligned}$$

交换对 x_b 和对 x_a 积分的顺序，有

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty} K(x_a,t_a;c)\int_{-\infty}^{+\infty} K^*(b;x'_a,t_a)K(b;x_a,t_a)dx_b dx_a\\ =&\int_{-\infty}^{+\infty} K^*(b;x'_a,t_a)\int_{-\infty}^{+\infty} K(x_a,t_a;c)K(b;x_a,t_a)dx_a dx_b\\ =&\int_{-\infty}^{+\infty} K^*(b;x'_a,t_a)K(b,c)dx_b\end{aligned}$$

即

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K^*(b;x'_a,t_a)K(b,c)dx_b = K(x'_a,t_a;c)$$

将 x'_a 换成 x_a，即得

$$\int K^*(b,a)K(b,c)dx_b = K(c,a)$$

此式即等价于 $(4-38)$。对上式取共轭，得到所证式子。

4.2 4-2 与时间无关的哈密顿量

4.2.1 问题 4-8

由 H 是厄米的这一事实证明，E 是实数。[在式 $(4-30)$ 中选 $f=g=\phi$。]

参考答案：

由式 $(4-42)$

$$H\phi = E\phi \tag{4-42}$$

在两边同时乘以 ϕ^*，并对 x 进行全空间积分：

$$E\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\phi dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^* H\phi dx$$

假定 ϕ 已经归一化了，那么 $\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\phi dx = 1$，而 H 是厄米的，根据 $(4-30)$ 式：

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^* H\phi dx = \int_{-\infty}^{+\infty}(H\phi)^*\phi dx$$

这意味着 $E^* = E$，所以 E 是一个实数。

4.2.2 问题 4-9

由 H 是厄米的这一事实证明，式 $(4-46)$ 成立。[在式 $(4-30)$ 中选 $f=\phi_2, g=\phi_1$。]

参考答案：

$$\begin{aligned}
E_2\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_1^*\phi_2 dx =&\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_1^* H\phi_2 dx\\
=&\int_{-\infty}^{+\infty}(H\phi_1)^*\phi_2 dx\\
=&E_1\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_1^*\phi_2 dx
\end{aligned}$$

也就是

$$(E_1-E_2)\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_1^*\phi_2 dx=0$$

其中 $E_1\neq E_2$，所以

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_1^*\phi_2 dx=0$$

4.2.3 问题 4-10

证明式 $(4-59)$ 中定义的 $K(b,a)$ 满足薛定谔方程。

参考答案：

当 $t_b<t_a$ 时，$K(b,a)\equiv 0$ 显然满足；当 $t_b>t_a$ 时：

$$\begin{aligned}
H_bK(b,a)=&H_b\left(\sum_{n=1}^{\infty}\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)e^{-(i/\hbar)E_n(t_b-t_a)}\right)\\
=&\sum_{n=1}^{\infty}\left(H_b\phi_n(x_b)\right)\phi_n^*(x_a)e^{-(i/\hbar)E_n(t_b-t_a)}\\
=&\sum_{n=1}^{\infty}E_n\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)e^{-(i/\hbar)E_n(t_b-t_a)}\\
=&-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}\sum_{n=1}^{\infty}\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)e^{-(i/\hbar)E_n(t_b-t_a)}\\
=&-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}K(b,a)
\end{aligned}$$

此即薛定谔方程 $(4-25)$。但是仅仅 $(4-25)$ 式不能说明它是一个传播子，仅仅说明它是一个波函数。为了证明它是传播子，还需要类似地验证式 $(4-27)$ 或 $(4-29)$。

4.2.4 问题 4-11

对于三维自由粒子，证明：解

$$\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right) \tag{4-60}$$

具有能量 $E_{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{p}^2/2m$。把矢量 $\boldsymbol{p}$ 看作下标 n 并注意到正交性。即只要 $\boldsymbol{p}\neq\boldsymbol{p}'$，便有

$$\int\phi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{x})\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}=0,\quad 即使E_{\boldsymbol{p}}=E_{\boldsymbol{p}'} \tag{4-61}$$

因此，自由粒子的传播子必然是

$$K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_a,t_a)=\sum_{\boldsymbol{p}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_a)-\frac{i\boldsymbol{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)\right] \tag{4-62}$$

因为 $\boldsymbol{p}$ 是分布在一个连续的区域中的，所以遍及"记号"$\boldsymbol{p}$ 的求和实际上等价于遍及 $\boldsymbol{p}$ 的所有值的积分，即

$$\sum_{\boldsymbol{p}}(\quad)=\int(\quad)\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tag{4-63}$$

这样，我们找到了由下式给出的自由粒子传播子：

$$K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_a,t_a)=\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_a)-\frac{i\boldsymbol{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)\right]\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tag{4-64}$$

参考答案：

从 $(4-60)$ 出发，根据 $H\phi=E\phi$ 以及自由粒子 $H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$，可以算得

$$\begin{aligned}H\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{\hbar^2}\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)\\&=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})\end{aligned}$$

所以 $E_{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{p}^2/2m$。至于正交性，那是因为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}=\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}\right]d^3\boldsymbol{x}=0$$

最后一步积分是因为狄拉克函数 $\delta(\boldsymbol{p})$ 的积分表达式：

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})\,d^3\boldsymbol{x}=\delta(\boldsymbol{p})$$

最后根据式 (4—59)，就可以写出

$$\begin{aligned}K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_a,t_a)=&\sum_{\boldsymbol{p}}\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}_b)\phi^*_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}_a)e^{-(i/\hbar)E_{\boldsymbol{p}}(t_b-t_a)}\\=&\sum_{\boldsymbol{p}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_a)-\frac{i\boldsymbol{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)\right]\end{aligned}$$

严格来说，此式仅仅是"正比于"，而不是相等，因为还缺少归一化因子。现在，由于 $\boldsymbol{p}$ 是连续分布的，那么可以用积分代替求和，也就是 $\sum_{\boldsymbol{p}}(\quad)=\int(\quad)\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3}$，其中因子 $\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}$ 是由归一化要求事后确定的（见问题4-12）。所以结果是

$$K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_a,t_a)=\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_a)-\frac{i\boldsymbol{p}^2}{2m\hbar}(t_b-t_a)\right]\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tag{4-64}$$

4.2.5 问题 4-12

通过配平方来完成积分 $(4-64)$。证明会得到自由例子传播子的形式 [即式 $(3-3)$ 的三维形式]。

参考答案：

将 $(4-64)$ 配平方，得到

$$\begin{aligned}K_0(\boldsymbol{x}_b, t_b; \boldsymbol{x}_a, t_a) &= \int \exp\left[-\frac{i\,(t_b-t_a)}{2m\hbar}\left(\boldsymbol{p}-m\frac{\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_a}{t_b-t_a}\right)^2+\frac{im}{2\hbar}\frac{(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_a)^2}{t_b-t_a}\right]\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3}\\ &= \left[\frac{2\pi m\hbar}{i(t_b-t_a)}\right]^{3/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_a)^2}{t_b-t_a}\right]\times\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\\ &= \left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b-t_a)}\right]^{3/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_a)^2}{t_b-t_a}\right]\end{aligned}$$

5 第五章 测量与算符

5.1 5-1 动量表象

5.1.1 问题 5-1

考虑任何一个用经典近似方法来设计的测量动量的实验装置，例如磁场分析仪。用前面概括的方法分析仪器，证明会得到动量几率幅的同样结果。

参考答案：

本人并不擅长于实验，因此此问题留到以后再作补充。

5.1.2 问题 5-2

如果我们定义

$$K(x_b,E_b;x_a,E_a)=\iint \exp\left(\frac{i}{\hbar}E_bt_b\right)K(x_b,t_b;x_a,t_a)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_at_a\right)dt_adt_b \qquad (5-20)$$

用来仅变换时间变量而不变换空间变量，则请证明：对于哈密顿量 H 与时间无关的系统，有

$$K(x_b,E_b;x_a,E_a)=2\pi\hbar^2 i\delta(E_b-E_a)\sum_n\frac{\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)}{E_a-E_n+i\epsilon} \qquad (5-21)$$

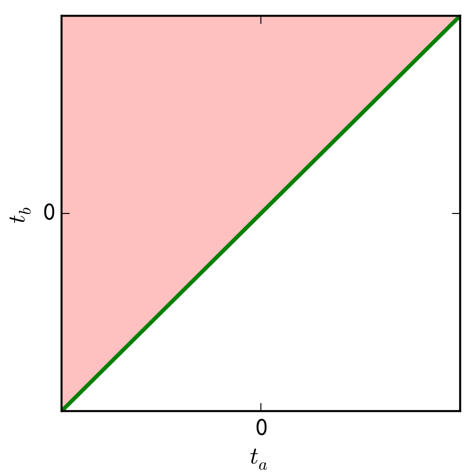
其中 ϕ_n 和 E_n 是 H 的本征函数和本征值。

参考答案：

将式 $(4-59)$ 代入上述定义中，我们有：

$$\begin{aligned}K(x_b,E_b;x_a,E_a)&=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{t_a}^{\infty}\sum_n\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_b-t_a)+\frac{i}{\hbar}E_bt_b-\frac{i}{\hbar}E_at_a\right]dt_bdt_a\\&=\sum_n\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{t_a}^{\infty}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_b-t_a)+\frac{i}{\hbar}E_bt_b-\frac{i}{\hbar}E_at_a\right]dt_bdt_a\end{aligned}$$

要注意式 $(4-59)$ 给出的 $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 在 $t_b<t_a$ 时为 0，所以上式的积分区间为 $\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{t_a}^{\infty}dt_bdt_a$。如下图所示，积分区域是直线 $t_b=t_a$ 的上半部分。



因此，求积分的较好办法是作坐标变换 $\xi=\frac{1}{2}(t_b-t_a),\eta=\frac{1}{2}(t_b+t_a)$，即 $t_b=\eta+\xi,t_a=\eta-\xi$，雅可比行列式为 $\begin{vmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{vmatrix}=2$，积分变为 $2\int_{-\infty}^{+\infty}\int_0^{\infty}d\xi d\eta$，即

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{t_a}^{\infty}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_b-t_a)+\frac{i}{\hbar}E_bt_b-\frac{i}{\hbar}E_at_a\right]dt_bdt_a\\
=&2\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(E_b-E_a\right)\eta\right]d\eta\int_0^{\infty}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(E_b+E_a-2E_n\right)\xi\right]d\xi
\end{aligned}
$$

第一个积分就是 $2\pi\delta\left[\frac{1}{\hbar}\left(E_b-E_a\right)\right]=2\pi\hbar\delta\left(E_b-E_a\right)$，第二个积分，类似式 $(5-17)$，是

$$
\frac{i\hbar}{E_b+E_a-2E_n+i\epsilon}\quad(\epsilon\to0)
$$

所以总的结果是

$$
4\pi\hbar^2i\delta(E_b-E_a)\sum_n\frac{\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)}{E_b+E_a-2E_n+i\epsilon}
$$

注意到这里出现了 $\delta(E_b-E_a)$，这意味着上述结果仅当 $E_b=E_a$ 时不为 0，也就是说非零的部分仅仅是 $E_b=E_a$ 的部分，那么将分母中的 E_b 换成 E_a，结果是一样的，因此上述答案等价于

$$
2\pi\hbar^2i\delta(E_b-E_a)\sum_n\frac{\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)}{E_a-E_n+i\epsilon}
$$

当然，如果你偏爱对称性，那么可以坚持 E_b+E_a 的形式。

5.2 5-2 量子力学变量的测量

5.2.1 问题 5-3

假设波函数为 $f(x)$ 的粒子出于任何处的几率

$$
\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(x)f(x)dx
$$

已经归一化为 1。在这个约束下证明，$f(x)=g(x)$ 的状态具有性质 G 的几率最高。

参考答案：

假设 $g(x)$ 也已经归一化，那么，根据施瓦兹不等式：

$$
\left|\int_{-\infty}^{+\infty}g^*(x)f(x)dx\right|^2\leq\int_{-\infty}^{+\infty}g^*(x)g(x)dx\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(x)f(x)dx=1
$$

不等式左边正是 $f(x)$ 具有性质 G 的几率，当 $f(x)=\pm g(x)$ 时取到等号，即此时几率最大。证毕。

如果读者不了解这个施瓦兹不等式，那么这里给出一个简单的证明。考虑关于 t 的二次方程

$$
\int_{-\infty}^{+\infty}\left(|g(x)|t-|f(x)|\right)^2dx=0
$$

显式地展开即

$$
\left(\int_{-\infty}^{+\infty}g^*gdx\right)t^2-2\left(\int_{-\infty}^{+\infty}|gf|dx\right)t+\left(\int_{-\infty}^{+\infty}f^*fdx\right)=0
$$

由于等号左端式子明显大于等于 0，因此作为 t 的二次方程，它至多有一个根，也就是对应的判别式 $\Delta \leq 0$:

$$\left(2\int_{-\infty}^{+\infty}|gf|dx\right)^2 \leq 4\left(\int_{-\infty}^{+\infty}g^*gdx\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty}f^*fdx\right)$$

而显然

$$\left(\int_{-\infty}^{+\infty}|gf|dx\right)^2 = \left(\int_{-\infty}^{+\infty}|g^*f|dx\right)^2 \geq \left|\int_{-\infty}^{+\infty}g^*fdx\right|^2$$

化简即得施瓦兹不等式。

5.2.2 问题 5-4

假设在 t_a 时刻系统的波函数是 $\psi(x)$。再假设 $t_b \geq t \geq t_a$ 间隔内，系统运动的性质由传播子 $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ 描述。证明：在 t_b 时刻发现，系统处于 $\chi(x)$ 态的概率由下面积分的模方给出：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*(x_b)K(x_b,t_b;x_a,t_a)\psi(x_a)dx_adx_b$$

我们称这个积分为由 $\psi(x)$ 态到 $\chi(x)$ 态的**跃迁几率幅**。

参考答案：

由式 $(3-42)$，有

$$\psi(x_b) = \int_{-\infty}^{+\infty}K(x_b,t_b;x_a,t_a)\psi(x_a)dx_a$$

再由式 $(5-31)$，所求几率幅为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*(x_b)\psi(x_b)dx_b = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*(x_b)K(x_b,t_b;x_a,t_a)\psi(x_a)dx_adx_b$$

概率即由上式的模方给出。

5.2.3 问题 5-5

假设函数 $f(x,y,z,\dots)$ 可以表示为

$$f(x,y,z,\dots) = \sum_a\sum_b\sum_c\dots F'_{a,b,c,\dots}\chi_{a,b,c,\dots}(x,y,z,\dots) \qquad (5-38)$$

把此式代入式 $(5-36)$，再用式 $(5-35)$ 定义的 χ 的正交性证明，$F'_{a,b,c,\dots} = F_{a,b,c,\dots}$

参考答案：

首先需要指出的是，原书中指出式 $(5-37)$ 是式 $(5-36)$ 的逆变换，是考虑了离散系数的可能性，但是式 $(5-35)$ 要对应地作一下修改。将式 $(5-36)$ 代入到式 $(5-37)$，交换求和号和积分号，得到

$$f(x,y,z,\dots) = \int_{-\infty}^{+\infty}\dots\left[\sum_a\sum_b\sum_c\dots\chi^*_{a,b,c,\dots}(x',y',z',\dots)\chi_{a,b,c,\dots}(x,y,z,\dots)\right]f(x',y',z',\dots)dx'dy'dz'\dots$$

这意味着有类似式 $(4-52)$ 的结果

$$\sum_a\sum_b\sum_c\dots\chi^*_{a,b,c,\dots}(x',y',z',\dots)\chi_{a,b,c,\dots}(x',y',z',\dots) = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')\dots$$

或者反过来，将式 $(5-37)$ 代入到式 $(5-36)$，交换求和号和积分号，得到

$$F_{a,b,c,\ldots}=\sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*_{a,b,c,\ldots}(x,y,z,\ldots)\chi_{a',b',c',\ldots}(x,y,z,\ldots)dxdydz\ldots\right]F_{a',b',c',\ldots}$$

这意味着

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*_{a,b,c,\ldots}(x,y,z,\ldots)\chi_{a',b',c',\ldots}(x,y,z,\ldots)dxdydz\cdots=\hat{\delta}(a-a')\hat{\delta}(b-b')\hat{\delta}(c-c')\ldots$$

这才是正确的式 $(5-35)$ 的替代式。这里的 $\hat{\delta}(x)$ 是本习题解答定义的，为

$$\hat{\delta}(x)=\begin{cases}1,\ x=0\\0,\ x\neq 0\end{cases}$$

是 $\delta(x)$ 的离散版本，满足

$$f(0)=\sum_n\hat{\delta}(n)f(n)$$

现在可以来解决问题5-5，将式 $(5-38)$ 代入式 $(5-36)$，得到

$$\begin{aligned}F_{a,b,c,\ldots}=&\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*_{a,b,c,\ldots}\sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\ldots F'_{a',b',c',\ldots}\chi_{a',b',c',\ldots}(x,y,z,\ldots)dxdydz\ldots\\=&\sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\ldots\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*_{a,b,c,\ldots}(x,y,z,\ldots)\chi_{a',b',c',\ldots}(x,y,z,\ldots)dxdydz\ldots\right]F'_{a',b',c',\ldots}\\=&\sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\ldots\hat{\delta}(a-a')\hat{\delta}(b-b')\hat{\delta}(c-c')F'_{a',b',c',\ldots}\\=&F'_{a,b,c,\ldots}\end{aligned}$$

证毕。

5.2.4　问题 5-6

假设 A、B、C 是动量的三个笛卡尔分量 p_x、p_y、p_z。函数 $\chi_{a,b,c}(x,y,z)$ 该有什么形式？使用节 $5-2$ 的结果证明得到节 $5-1$ 得到的关系式。

参考答案：

根据本节所讨论的要点，关键是要找出具有恒定动量 $\boldsymbol{p}=(a,b,c)$ 的波函数形式 $\chi_{a,b,c}(x,y,z)$。[7]而我们已经知道，具有确定动量 $\boldsymbol{p}$ 的波函数为[8]

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)$$

上式事实上还没有归一化，因为按照式 $(5-35)$ 的归一化要求，应当有

$$\chi_{a,b,c}(x,y,z)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)$$

[7]即具有动量 $\boldsymbol{p}$ 的粒子一定具有 $\chi_{a,b,c}(x,y,z)$ 形式的波函数。请反复咀嚼本节的“**多变量的测量**”部分第三段。

[8]因为 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{\omega}$，所以 $\exp(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{x})=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)$。

这时候，从空间表象到动量表象的变换是

$$\phi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\boldsymbol{x})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)d^3\boldsymbol{x}$$

逆变换是

$$\phi(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\boldsymbol{p})\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)d^3\boldsymbol{p}$$

这个形式跟 $5-1$ 得到的关系式 $(5-6)$ 和 $(5-8)$ 相差一个常数因子，这是由于式 $(5-6)$ 和式 $(5-8)$ 并没有完成归一化要求。

5.2.5 问题 5-7

假设 A、B、C、... 表象既不是坐标表象，也不是动量表象，而是表示系统状态的第三种方式。设已知函数 $\chi_{a,b,c,\dots}(x,y,z,\dots)$，它允许我们在坐标表象和 A、B、C、... 表象之间来回变换。再设我们已知在坐标表象和动量表象之间来回变换所必须的变换函数，求在动量表象与 A、B、C、... 表象之间变换所必要的函数。

参考答案：

很明显，从动量表象到 A、B、C、... 表象的变换，需要通过下面的途径迂回进行

动量表象 → 坐标表象 → A、B、C、... 表象

以三维情况为例，从动量表象到坐标表象的变换为

$$\phi(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\boldsymbol{p})\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)d^3\boldsymbol{p}$$

然后从坐标表象到 A、B、C 表象的变换为

$$\begin{aligned}\phi(a,b,c)&=\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*_{a,b,c}(x,y,z)\phi(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi_{a,b,c}(x,y,z)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)d^3\boldsymbol{x}\right]^*\phi(\boldsymbol{p})d^3\boldsymbol{p}\end{aligned}$$

所以，所必须的变换函数是

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi_{a,b,c}(x,y,z)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right)d^3\boldsymbol{x}$$

即等价于先对变换函数作中间表象的变换。

5.3 5-3 算符

5.3.1 问题 5-8

注意，式 $(5-44)$ 意味着 $G^*_A(x,x')=G_A(x',x)$。记住这点，证明对于任何两个当 $x\to\infty$ 时趋近于零的波函数 $f(x)$ 和 $g(x)$，有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}g^*(x)\mathscr{A}f(x)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}[\mathscr{A}g(x)]^*f(x)dx \tag{5-47}$$

任何一个使式 $(5-47)$ 成立的算符，如 $\mathscr{A}$，称为**厄米算符**【参看式 $(4-30)$】。

参考答案：

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} g^*(x)\mathscr{A}f(x)dx &= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} g^*(x)G_A(x,x')f(x')dx'dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} g^*(x)G_A^*(x',x)f(x')dx'dx \quad [\text{因为}G_A^*(x,x')=G_A(x',x)] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} g(x')G_A(x,x')dx'\right)^* f(x)dx \quad (\text{交换 } x,x' \text{ 记号和积分次序}) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}[\mathscr{A}g(x)]^* f(x')dx' \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}[\mathscr{A}g(x)]^* f(x)dx
\end{aligned}
$$

5.3.2 问题 5-9

空间表象与动量表象之间的变换函数是

$$\chi_{a,b,c}(\boldsymbol{x}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}\right) \tag{5-48}$$

(参看问题5-6)。把物理量 A 选为动量的 x 分量 p_x。证明，函数 G_A 是

$$G_{p_x}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \frac{\hbar}{i}\delta'(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \tag{5-49}$$

其中 $\delta'(x) = d\delta(x)/dx$。用这个结果决定相应于动量 x 分量的算符，并证明，这个算符的期望值可以写为

$$\langle p_x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(\boldsymbol{x})\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}f(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x} \tag{5-50}$$

参考答案：

由式 $(5-44)$ 的连续版本和问题5-6 得

$$
\begin{aligned}
G_{p_x}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') =& \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} p_x \exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\right]d^3\boldsymbol{p} \\
=& \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} p_x \exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\right]d^3\boldsymbol{p} \\
=& \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')
\end{aligned}
$$

这正是式 $(5-49)$。所以

$$
\begin{aligned}
\langle p_x\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(\boldsymbol{x})\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')f(\boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}'d\boldsymbol{x} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(\boldsymbol{x})\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}f(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}
\end{aligned}
$$

5.3.3　问题 5-10

设量 A 相应于位置的 x 坐标。证明，当函数 G_A 取为

$$G_x(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = x\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \tag{5-51}$$

时，才能得到 x 平均值的正确公式。而相应 x 的算符就是直接乘 x，即

$$\mathscr{X} f(x) = xf(x) \tag{5-52}$$

参考答案：

很明显，由于没有进行表象变换，因此概率直接就是

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} xf^*(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}$$

这等价于在式 $(5-46)$ 中取

$$G_A(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = x\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$$

对应的算符就是直接乘以 x，即

$$\mathscr{X} f(x) = xf(x)$$

5.3.4　问题 5-11

证明节 5-2 讨论过的波函数 $\chi_{a,b,c,\ldots}$ 被算符 $\mathscr{A}$ 作用时呈现极简单的性质，即

$$\mathscr{A}\chi_{a,b,c,\ldots}(x) = a\chi_{a,b,c,\ldots}(x) \tag{5-53}$$

参考答案：

$$\begin{aligned}
\mathscr{A}\chi_{a,b,c,\ldots}(x) =& \int_{-\infty}^{+\infty} G_A(x,x')\chi_{a,b,c,\ldots}(x')dx' \\
=& \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\ldots a'\chi_{a',b',c',\ldots}(x)\chi^*_{a',b',c',\ldots}(x')\right]\chi_{a,b,c,\ldots}(x')dx' \\
=& \sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\ldots\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*_{a',b',c',\ldots}(x')\chi_{a,b,c,\ldots}(x')dx'\right]a'\chi_{a',b',c',\ldots}(x) \\
=& \sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\ldots\hat{\delta}(a-a')\hat{\delta}(b-b')\hat{\delta}(c-c')a'\chi_{a',b',c',\ldots}(x) \\
=& a\chi_{a,b,c,\ldots}(x)
\end{aligned}$$

其中 $\hat{\delta}(x)$ 参考问题 5-5。

5.3.5　问题 5-12

证明位置的 x 坐标和动量的 x 分量不是同时可测量的物理量。

参考答案：

位置的 x 坐标和动量的 x 分量对应的算符分别是 x 和 $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$，为了证明它们不能同时测量，只需证明它们两个是不对易的，即

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}[xf(x)]-x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}f(x)=\frac{\hbar}{i}f(x)$$

即

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x-x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\hbar}{i}\neq 0$$

5.3.6 问题 5-13

讨论把 $\phi_n(x)$ 解释为节 5-2 中的函数 $\chi_{a,b,c...}(x)$ 的可能性。也就是说，$\phi_n(x)$ 是从 x 表象到用 n 标记的表象（能量表象）的变换函数。

参考答案：

在第四章我们已经证明了式 $(4-52)$，它类似式 $(5-35)$，这已经表明 $\phi_n(x)$ 可以作为一类变换函数。至于它的物理意义，我们回顾 $\phi_n(x)$ 的定义，可以发现，它是由分离变量法而来，参数 E_n 的物理意义是能量，即 $\phi_n(x)$ 是具有确定能量 E_n 的波函数。因此，$\phi_n(x)$ 可以作用从 x 表象到能量表象的变换函数。当然，由于只有一个下标 n，那么该结论只适用于一维情形。

6 第六章 量子力学的微扰方法

6.1 6-1 微扰展开

6.1.1 问题 6-1

假设可以把势写为 $U+V$，其中 V 是小量而 U 是大量。进一步假设只在势 U 中运动的传播子可以算出来（例如，U 可以是 x 的二次项而且与时间无关）。证明，在整个势 $U+V$ 中的运动由式 $(6-4)$、$(6-11)$、$(6-13)$、$(6-14)$ 描述，不过要用 K_U 来代替 K_0，其中 K_U 是只在势 U 中运动的传播子。于是可以把 V 看成是势 U 的微扰。我们可以说，$-(i/\hbar)V$ 是势的微扰部分散射的几率幅（每单位体积和每单位时间）。K_U 是系统在无微扰势 U 中运动的几率幅。

参考答案：

本题不过是重复 93 页到 96 页的式 $(6-3)\sim(6-16)$ 的推导，只需用 K_U 来代替 K_0，并没有什么值得重复演算的地方，因此这里就不给出详细解答了。

正确的答案显然是

$$K_{U+V}(b,a) = K_U(b,a) + K_U^{(1)}(b,a) + K_U^{(2)}(b,a) + \dots$$

其中（给出 $V(x_c,t_c)=V(c)$）

$$\begin{aligned}
K_U(b,a) &= \int_a^b \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2 + U(x,t)\right]dt\right\}\mathscr{D}x(t) \\
K_U^{(1)}(b,a) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\int_{-\infty}^{+\infty} K_U(b,c)V(c)K_U(c,a)dx_c dt_c \\
K_U^{(2)}(b,a) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \iint K_U(b,c)V(c)K_U(c,d)V(d)K_U(d,a)d\tau_c d\tau_d \\
&\dots
\end{aligned}$$

其中根据原书中约定，$d\tau = dxdt$。

6.1.2 问题 6-2

设一个系统由两个粒子组成，它们只通过势 $V(x,y,t)$ 相互作用；其中 x 表示第一个粒子的坐标，而 y 表示第二个粒子的坐标 [参看节 3-8 和式 $(3-75)$]。除了这个相互作用外，粒子不再受任何相互作用。若 V 是零，则 K 就是两个自由粒子传播子的乘积。应用这个事实，建立 $K_V(x_b,y_b,t_b;x_a,y_a,t_a)$ 的微扰展开式。用什么物理推理规则可以描述这个展开式中的各项？

参考答案：

记 $K_V(x_b,y_b,t_b;x_a,y_a,t_a)=K_V(b,a)$，则有

$$K_V(b,a) = K_0(b,a) + K_0^{(1)}(b,a) + K_0^{(2)}(b,a) + \dots$$

其中（给出 $V(x_c,y_c,t_c)=V(c)$）

$$
\begin{aligned}
K_0(b,a)=&\int_{x_a}^{x_b}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\frac{m}{2}\dot{x}^2dt\right)\mathscr{D}x(t)\int_{y_a}^{y_b}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\frac{M}{2}\dot{y}^2dt\right)\mathscr{D}y(t)\\
K_0^{(1)}(b,a)=&-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\iint_{-\infty}^{+\infty}K_0(b,c)V(c)K_0(c,a)dx_cdy_cdt_c\\
K_0^{(2)}(b,a)=&\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\iint K_0(b,c)V(c)K_0(c,d)V(d)K_0(d,a)d\tau_cd\tau_d\\
&\cdots
\end{aligned}
$$

而这里 $d\tau=dxdydt$。

倘若把相互作用 V 想象为某种“碰撞”，那么上式的各项可以形象地描述如下：K_V 是粒子 1 从 (x_a,t_a) 运动到 (x_b,t_b)、且粒子 2 从 (y_a,t_a) 运动到 (y_b,t_b) 的所有可能方式的和。这些可能的方式是

1. 两个粒子分别自由地运动到终点，互不影响；
2. 两个粒子开始自由运动，然后在运动过程中碰撞一次，碰撞后自由运动到终点；
3. 两个粒子开始自由运动，然后在运动过程中碰撞一次，碰撞后自由运动一段时间，又碰撞了一次，然后才自由运动到终点；
4. 两个粒子在此过程中碰撞了三次；
5. ...

6.2 6-2 K_V 的积分方程

6.2.1 问题 6-3

对于自由粒子，式 $(4-29)$ 化成

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}K_0(b,a)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K_0(b,a)=i\hbar\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)\tag{6-20}$$

由此结果和式 $(6-19)$ 证明，传播子 K_V 满足微分方程

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}K_V(b,a)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K_V(b,a)+V(b)K_V(b,a)\\
=&i\hbar\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)
\end{aligned}\tag{6-21}
$$

参考答案：

通过直接对式 $(6-19)$ 求 t_b 的偏导数，并且代入式 $(6-20)$ 的结果即得

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}K_V(b,a)=&-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}K_0(b,a)+\int\frac{\partial}{\partial t_b}K_0(b,c)V(c)K_V(c,a)d\tau_c\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K_0(b,a)+i\hbar\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)\\
&-\frac{i}{\hbar}\int\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K_0(b,a)+i\hbar\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)\right]V(c)K_V(c,a)d\tau_c\\
=&i\hbar\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}\left[K_0(b,a)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)V(c)K_V(c,a)d\tau_c\right]\\
&+\int\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)V(c)K_V(c,a)d\tau_c\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K_V(b,a)+V(b)K_V(b,a)+i\hbar\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)
\end{aligned}
$$

6.3 6-3 波函数展开

6.3.1 问题 6-4

应用与研究式 $(6-19)$ 时相类似的论述证明，波函数 $\psi(b)$ 满足积分方程

$$
\psi(b)=\phi(b)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)V(c)\psi(c)d\tau_c \qquad (6-26)
$$

这个积分方程等价于薛定谔方程

$$
-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi \qquad (6-27)
$$

仅对一维情形，说明如何从积分方程推出薛定谔方程。

参考答案：

将级数 $(6-25)$ 改写成

$$
\psi(b)=\phi(b)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)V(c)\left[\phi(c)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(c,d)V(d)K_0(d,a)d\tau_d+\ldots\right]d\tau_c
$$

方括号内的式子跟级数 $(6-25)$ 形式上相同，事实上，它就是 $\psi(c)$ 的表达式，因此

$$
\psi(b)=\phi(b)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(b,c)V(c)\psi(c)d\tau_c
$$

其中 $\phi(b)$ 即为自由粒子的波函数。

通过直接对式 $(6-26)$ 求 t_b 的偏导数，并且代入式 $(6-20)$ 的结果即得

$$
\begin{aligned}
-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}\psi(b)=&-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}\phi(b)+\int\frac{\partial}{\partial t_b}K_0(b,c)V(c)\psi(c)d\tau_c\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}\phi(b)-\frac{i}{\hbar}\int\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K_0(b,a)+i\hbar\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)\right]V(c)\psi(c)d\tau_c\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}\left[\phi(b)+\int K_0(b,c)V(c)\psi(c)d\tau_c\right]+\int\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a)V(c)\psi(c)d\tau_c\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}\psi(b)+V(b)\psi(b)
\end{aligned}
$$

直接利用式 $(6-21)$ 以及波函数的定义式 $(6-22)$ 也可以证明。

6.4　6-4 电子散射

6.4.1　问题 6-5

式 $(6-28)$ 对 t_c 的积分可以用固定相位的方法来近似。研究此方法对这个积分的应用证明，积分的大部分贡献来自接近区域 $t_c = r_a/u$ 的 t_c 值，要是电子以经典方式运动，经过这段时间 (r_a/u)，它会到达原子中心。

参考答案：

$$K^{(1)}(b,a) = -\frac{i}{\hbar}\iint_0^T \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(T-t_c)}\right)^{3/2} \exp\left\{\frac{im|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2}{2\hbar(T-t_c)}\right\} \times V(\boldsymbol{x}_c)\left(\frac{m}{2\pi i\hbar t_c}\right)^{3/2} \exp\left\{\frac{im|\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{x}_a|^2}{2\hbar t_c}\right\} dt_c d^3\boldsymbol{x}_c \tag{6-28}$$

的被积函数的指数部分为

$$\exp\left\{i\left(\frac{b}{T-t_c}+\frac{a}{t_c}\right)\right\}$$

其中 $b = m|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2/2\hbar, a = m|\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{x}_a|^2/2\hbar$，容易看到，当 $t\to 0$ 或 $t\to T$ 时，上述函数是高速振荡的，所以积分的主要贡献来自于低频部分，即 $\frac{b}{T-t_c}+\frac{a}{t_c}$ 取最小值时。而取最小值的条件是 $t_c = \frac{T\sqrt{a}}{\sqrt{b}+\sqrt{a}} = \frac{TR_{ca}}{R_{bc}+R_{ca}}$，将此结果代入被积函数，并且乘以 T，得到近似结果：

$$K^{(1)}(b,a) \approx -A\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^3 T\int\left[\left(1+\frac{R_{bc}}{R_{ca}}\right)\left(1+\frac{R_{ca}}{R_{bc}}\right)\right]^{3/2} \times \exp\left\{\frac{im(R_{bc}+R_{ca})^2}{2\hbar T}\right\} V(\boldsymbol{x}_c)d^3\boldsymbol{x}_c$$

其中 A 是一个常数。可见，通过固定相位法，我们已经正确地确定了积分结果的指数函数部分，这正是对 $\boldsymbol{x}_c$ 的积分中重要的部分。当然，由于是固定相位近似，我们不期望能够得到完全精确的结果。

通过对近似结果事后分析，我们可以得到近似的有效区域。当指数部分 $\exp\left\{\frac{im(R_{bc}+R_{ca})^2}{2\hbar T}\right\}$ 的相位越小时，即振动频率越低时，近似程度越好。因此，可以期望，上述近似的有效区域为

$$\frac{m(R_{bc}+R_{ca})^2}{2\hbar T} \sim 1$$

时。可以验证，在这个区域中，它跟式 $(6-29)$ 是近似的，相差一个量级为 1 的因子。

6.4.2　问题 6-6

设势是中心力势，因而 $V(\boldsymbol{x}) = V(r)$，$r = |\boldsymbol{x}|$。证明，$v(\breve{\boldsymbol{p}})$ 可以写为

$$v(\breve{\boldsymbol{p}}) = v(\breve{p}) = \frac{4\pi\hbar}{\breve{p}}\int_0^\infty \left(\sin\frac{\breve{p}r}{\hbar}\right)V(r)rdr \tag{6-45}$$

设 $V(r)$ 是库仑势 $-Ze^2/r$。在此情况下，$v(\breve{p})$ 的积分在上限振荡。但是可以先引进因子 $\exp(-\epsilon r)$，然后再取当 $\epsilon\to 0$ 时结果的极限，这样人为地使积分收敛了。按照这样计算，证明截面对应于卢瑟福截面：

$$\frac{d\sigma_{\text{Ruth}}}{d\Omega} = \frac{4m^2Z^2e^4}{\breve{p}^4} = \frac{Z^2e^4}{16(mu^2/2)\sin^4(\theta/2)} \tag{6-46}$$

其中

$$
\begin{aligned}
e &= \text{电子电荷}\\
\breve{p} &= |\breve{\boldsymbol{p}}| = 2p\sin(\theta/2) = 2mu\sin(\theta/2)\\
\theta &= \text{矢量}\boldsymbol{i}_a\text{和}\boldsymbol{i}_b\text{之间的夹角}
\end{aligned}
$$

参考答案：

显然，由于球对称性，我们会考虑使用球坐标变换：

$$
\begin{cases}
x = r\sin\theta\cos\varphi\\
y = r\sin\theta\sin\varphi\\
z = r\cos\theta
\end{cases}
$$

其积分测度变换为 $r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi$，因此式 $(6-39)$ 变为

$$
\int_0^\infty dr\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\breve{p}_x r\sin\theta\cos\varphi+\breve{p}_y r\sin\theta\sin\varphi+\breve{p}_z r\cos\theta\right)\right]V(r)r^2\sin\theta
$$

我们要做的是先把对 θ 和 φ 的积分算出来，但看上去并不容易。然而，我们留意到，如果 $p_x=p_y=0$，只留下 p_z，那么积分是容易的：

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\infty dr\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{p}_z r\cos\theta\right)V(r)r^2\sin\theta\\
=&\int_0^\infty dr\frac{2\pi\hbar}{i\breve{p}_z r}(e^{ip_z r/\hbar}-e^{-i\breve{p}_z r/\hbar})V(r)r^2\\
=&\frac{4\pi\hbar}{\breve{p}_z}\int_0^\infty\sin\left(\frac{\breve{p}_z r}{\hbar}\right)V(r)rdr
\end{aligned}
$$

对于一般的 $\breve{\boldsymbol{p}}$，可以通过正交变换来简化。对于势 $V(r)$，式 $(6-39)$ 用矩阵记号来表示为

$$
v(\breve{\boldsymbol{p}})=\int\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)V\left(\sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right)d^3\boldsymbol{x}
$$

设 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}',\boldsymbol{p}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{p}'$，$\boldsymbol{U}$ 是一个正交矩阵（满足 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$），在正交变换下，模长、点积和积分元都保持不变[9]，因此

$$
v(\breve{\boldsymbol{p}})=\int\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}'}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}'\right)V(\sqrt{\boldsymbol{x}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}'})d^3\boldsymbol{x}'
$$

总可以选择适当的 $\boldsymbol{U}$（这等价于使用不同的直角坐标系），使得 $\boldsymbol{p}'=(0,0,\breve{p})$，此时变换为开头所说的简单情况，只要将 p_z 换为 $\breve{p}$ 就行了。因此一般地

$$
v(\breve{\boldsymbol{p}})=\frac{4\pi\hbar}{\breve{p}}\int_0^\infty\left(\sin\frac{\breve{p}r}{\hbar}\right)V(r)rdr
$$

进一步地，应用于库仑势 $V(r)=-Ze^2/r$，有

$$
v(\breve{\boldsymbol{p}})=-\frac{4\pi\hbar Ze^2}{\breve{p}}\int_0^\infty\left(\sin\frac{\breve{p}r}{\hbar}\right)dr
$$

[9]正交变换相当于把坐标系作了一下旋转，并没有改变向量的长度和相对位置。

我们已经碰到过这类积分，它只不过是式 $(5-15)$ 的虚部而已。我们也知道怎么处理它，也就是先引进因子 $\exp(-\epsilon r)$，然后再取当 $\epsilon\to 0$ 时结果的极限。结果在式 $(5-16)$ 已经给出，在那里答案是 $1/\omega$，对应这里，则是 $\hbar/\breve{p}$，所以

$$v(\breve{\boldsymbol{p}})=-\frac{4\pi\hbar^2 Ze^2}{\breve{p}^2}$$

代入式 $(6-44)$ 得到

$$\frac{d\sigma_{\text{Ruth}}}{d\Omega}=\frac{4m^2Z^2e^4}{\breve{p}^4}$$

而

$$\begin{aligned}\breve{p}^2=&|\boldsymbol{p}_a-\boldsymbol{p}_b|^2\\=&\boldsymbol{p}_a^2+\boldsymbol{p}_b^2-2\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{p}_b\\=&2p^2(1-\cos\theta)\quad(p=|\boldsymbol{p}_a|=|\boldsymbol{p}_b|=mu)\\=&4p^2\sin^2\frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

故 $\breve{p}=2p\sin(\theta/2)$。

6.4.3 问题 6-7

设势 $V(\boldsymbol{r})=-e\phi(\boldsymbol{r})$ 是由电荷分布 $\rho(\boldsymbol{r})$ 产生的，于是

$$\nabla^2\phi(\boldsymbol{r})=-4\pi\rho(\boldsymbol{r})\tag{6-48}$$

设当 $|\boldsymbol{r}|\to 0$ 时 $\rho(\boldsymbol{r})$ 趋于零，用 $\exp(i\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ 乘式 $(6-48)$，两边对 $\boldsymbol{r}$ 积分两次，证明，$v(\breve{\boldsymbol{p}})$ 可以用 $\rho(\boldsymbol{r})$ 表示为

$$v(\breve{\boldsymbol{p}})=-\frac{4\pi\hbar^2e}{\breve{p}^2}\int\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{r}\right)\rho(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}\tag{6-49}$$

一个原子可以用它的电荷密度来表示。在原子核处电荷密度是奇异的，因此，它可以用强度为 Z 的 $\boldsymbol{r}$ 的 δ 函数来表示，这里 Z 是原子核的电荷。于是，若 $\rho_e(\boldsymbol{r})$ 是原子中的电子密度，则 $v(\breve{\boldsymbol{p}})$ 是

$$v(\breve{\boldsymbol{p}})=\frac{4\pi\hbar^2e}{\breve{\boldsymbol{p}}^2}\left[Z-\int\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{r}\right)\rho_e(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}\right]\tag{6-50}$$

中括号中的量称为电子散射的**形状因子**。[附带，X 射线散射中也出现类似的形状因子。X 射线散射理论表明，只有原子中的电子（而不是原子核）对散射有贡献。因此，X 射线散射的形状因子是同样的，但是不含 Z 这一项。

参考答案：

题中所提示的思路虽然可行，但不容易想到。事实上，已经求得

$$\nabla^2G(\boldsymbol{r})=-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$$

的解是

$$G(\boldsymbol{r})=\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}$$

而

$$\rho(\boldsymbol{r})=\int\rho(\boldsymbol{r}')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}'$$

所以

$$\phi(\boldsymbol{r})=\int\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}d^3\boldsymbol{r}'$$

代入 $V(\boldsymbol{r})=-e\phi(\boldsymbol{r})$，再代入式 $(6-39)$，得到

$$\begin{aligned}\phi(\boldsymbol{r})&=-\int\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{r}\right)\int\frac{e\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}\\&=-\int e\rho(\boldsymbol{r}')\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{r}'\right)d^3\boldsymbol{r}'\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\end{aligned}$$

后一积分结果在问题6-6 已经给出，结果是 $4\pi\hbar^2/\breve{p}^2$，跟 $\boldsymbol{r}'$ 无关，因此

$$v(\breve{\boldsymbol{p}})=-\frac{4\pi\hbar^2e}{\breve{p}^2}\int\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{r}'\right)\rho(\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}'$$

换回 $\boldsymbol{r}$ 即得式 $(6-49)$。

最后，根据题设，整个原子的电荷密度分布可以写为 $\rho(\boldsymbol{r})=Ze\delta(\boldsymbol{r})-e\rho_e(\boldsymbol{r})$（后面一项变号，因为电子间互相排斥），代入式 $(6-49)$ 即得式 $(6-50)$。

6.4.4 问题 6-8

在原子中，仅在非常小的半径内，势才遵循库仑定律。随着半径增加，原子中的电子逐渐屏蔽（或抵消）核电荷，直到当 r 值足够大时，势等于零。有一种非常粗糙的近似方式，用下述公式可以计算出原子中电子的屏蔽效应：

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\tag{6-51}$$

在此表示式中，a 称为原子半径。这与化学中使用的原子的外径不同，它由 $a_0/Z^{1/3}$ 给出，其中

$$a_0=\hbar^2/me^2=0.0529\text{nm}$$

证明在这个势中，

$$v(\breve{\boldsymbol{p}})=-\frac{4\pi Ze^2}{(\breve{p}/\hbar)^2+(1/a)^2}\tag{6-52}$$

因此

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{Z^2e^4}{(mu^2/2)^2[4\sin^2(\theta/2)+(\hbar/pa)^2]^2}\tag{6-53}$$

总截面 σ_T 定义为 $d\sigma/d\Omega$ 在单位球面上的积分，即

$$\sigma_T=\int_0^{4\pi}\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega\tag{6-54}$$

在这个例子中证明，σ_T 由下式给出：

$$\sigma_T=\pi a^2\frac{(2Ze^2/u\hbar)^2}{1+(\hbar/2pa)^2}\tag{6-55}$$

参考答案：

将式 $(6-51)$ 的势代入式 $(6-45)$，得到

$$\begin{aligned}
v(\breve{\boldsymbol{p}}) &= -\frac{4\pi\hbar Ze^2}{\breve{p}}\int_0^\infty \sin\left(\frac{\breve{p}r}{\hbar}\right)e^{-r/a}dr \\
&= -\frac{4\pi\hbar Ze^2}{\breve{p}} Im\left[\int_0^\infty \exp\left(-\frac{r}{a}+i\frac{\breve{p}r}{\hbar}\right)dr\right] \\
&= -\frac{4\pi Ze^2}{(\breve{p}/\hbar)^2+(1/a)^2}
\end{aligned}$$

代入式 $(6-44)$ 就可以求得

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2e^4}{(mu^2/2)^2[4\sin^2(\theta/2)+(\hbar/pa)^2]^2}$$

下面是关于总截面 σ_T 的概念。出现这个概念，是因为屏蔽效应的出现，使得散射效应在某个区域外就失效。换句话说，只有进入到某个区域内，电子才有可能被散射（才可能到达某个指定的 b 点），如果不在这个区域内，则电子不可能被散射。这个区域的总面积，就是我们要求的 σ_T。而为了求出它，我们需要对 $\boldsymbol{p}_b$ 的所有可能的方向进行积分（整个球面）。这样一来，我们使用球面坐标，以 $\boldsymbol{p}_a$ 所在直线为 z 轴，那么式 $(6-53)$ 中的 θ 便是参数之一，它在 $[0,\pi]$ 内变化，于是

$$\begin{aligned}
\sigma_T &= \int_0^{2\pi} d\varphi\int_0^\pi d\theta\sin\theta\frac{Z^2e^4}{(mu^2/2)^2[4\sin^2(\theta/2)+(\hbar/pa)^2]^2} \\
&= -\frac{2\pi Z^2e^4}{(mu^2/2)^2}\int_0^\pi\frac{d(\cos\theta)}{[2(1-\cos\theta)+(\hbar/pa)^2]^2} \\
&= \frac{2\pi Z^2e^4}{(mu^2/2)^2}\int_0^2\frac{ds}{[2s+(\hbar/pa)^2]^2}\quad (s=1-\cos\theta) \\
&= \frac{2\pi Z^2e^4}{(mu^2/2)^2}\left(-\frac{1/2}{2s+(\hbar/pa)^2}\bigg|_0^2\right) \\
&= \pi a^2\frac{(2Ze^2/u\hbar)^2}{1+(\hbar/2pa)^2}
\end{aligned}$$

6.4.5 问题 6-9

现在介绍下述事实，即原子核有一个由

$$r_N = 1.2\times10^{-13}\times(\text{质量数})^{1/3}\text{cm} \tag{6-56}$$

给定的有限半径，并且假设核电荷几乎均匀分布在这个半径的球体中。那么当电子被原子散射的转移动量 $\breve{p}$ 大时，这个假定对界面有什么影响？

利用这个效用证明，可以根据某些核电荷分布的细节决定核半径。为了产生明显效应，入射电子动量 p 必须多大？观察大角散射和观察小角散射，哪一种观察应当更细致一点？为什么？

注意：在这里实验中，所需要的电子动量很高，以至于求动能必须用相对论公式 $E=\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}-mc^2$。因此，严格地说，我们不应使用非相对论公式去描述相互作用。然而，动量和波长、能量和频率之间的关系在相对论情况下并不改变。因为正是波长决定了这个“电子显微镜”的分辨力，所以非相对论公式计算的动量仍是正确的。

参考答案：

由于电荷是连续分布的, 因此, 需要利用式 (6 − 49) 来计算散射截面。同式 (6 − 39) 化为式 (6 − 45) 一样，式 (6 − 49) 可以化为

$$v(\breve{\boldsymbol{p}}) = -\frac{4\pi\hbar e}{\breve{p}^2}\frac{4\pi\hbar}{\breve{p}}\int_0^\infty \sin\left(\frac{\breve{p}r}{\hbar}\right)\rho(r)rdr$$

对于题目所定义的球体原子核，定义

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} e\rho, |\boldsymbol{r}| \leq r_N \\ 0, |\boldsymbol{r}| > r_N \end{cases}$$

那么

$$\begin{aligned} v(\breve{\boldsymbol{p}}) &= -\frac{4\pi\hbar e^2}{\breve{p}^2}\frac{4\pi\hbar\rho}{\breve{p}}\int_0^{r_N} \sin\left(\frac{\breve{p}r}{\hbar}\right)rdr \\ &= -\frac{4\pi\hbar e^2}{\breve{p}^2}\frac{4\pi\hbar\rho}{\breve{p}}\left[\frac{\hbar^2}{\breve{p}^2}\sin\left(\frac{\breve{p}}{\hbar}r_N\right) - \frac{\hbar}{\breve{p}}r_N\cos\left(\frac{\breve{p}}{\hbar}r_N\right)\right] \end{aligned}$$

将方括号部分展开为 r_N 的级数得

$$v(\breve{\boldsymbol{p}}) = -\frac{4\pi\hbar e^2}{\breve{p}^2}\frac{4\pi r_N^3\rho}{3}\left(1 - \frac{1}{10}\frac{\breve{p}^2}{\hbar^2}r_N^2 + \dots\right)$$

其中由定义知 $4\pi r_N^3\rho/3 = Z$，因此

$$v(\breve{\boldsymbol{p}}) = -\frac{4\pi\hbar Ze^2}{\breve{p}^2}\left(1 - \frac{1}{10}\frac{r_N^2\breve{p}^2}{\hbar^2} + \dots\right)$$

如果只取第一项，那么相当于电荷全部集中分布在原点之时，也就是在问题6-6 中我们求出来的结果，后面的修正项代表着有限半径 r_N 的影响。因此，如果已知电荷分布，并且通过实验来记录到 $|v(\breve{\boldsymbol{p}})|^2$，那么我们就可以根据上式来反解出 r_N 来，也就是决定核半径。

如果希望这个效应能够产生明显的效果，也就是后面的高阶项不能过小，那么必然有

$$\frac{\breve{p}}{\hbar}r_N \sim 1$$

即

$$\breve{p} \sim \frac{\hbar}{r_N}$$

代入已知的数据，取质量数为 1，采用国际单位，那么 $\hbar \approx 10^{-34}, r_N \approx 10^{-15}$，那么

$$\breve{p} \sim 10^{-19}\text{kg}\cdot\text{m/s}$$

这基本就是入射电子动量的最小值。看上去很小，但是要注意，电子质量不过是 $m_e \approx 10^{-31}$kg，如果按照经典公式，就有

$$v = \breve{p}/m_e = 10^{11}\text{m/s}$$

这已经远远超过了光速 3×10^8m/s 了，因此严格来讲我们不能用非相对论理论来计算。

此外，由于 $\breve{p} = 2p\sin(\theta/2)$，可见 θ 越大，$\breve{p}$ 也越大，因此，小角散射更不明显，需要更细致地观察。

6.4.6 问题 6-9

考虑有两个原子 A 和 B 组成的双原子分子，A 和 B 的质心分别位于矢量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 给定的点。使用玻恩近似证明，电子由这种分析散射的几率幅为

$$K^{(1)} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}\right) f_A(\breve{\boldsymbol{p}}) + \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{b}\right) f_B(\breve{\boldsymbol{p}}) \tag{6-57}$$

其中 f_A 和 f_B 分别是两个原子分别位于坐标系中心时单独散射的几率幅，原子的结合不会使核周围的电荷分布有很大变化（除了像氢那样非常轻的核），因为结合力只影响少数几个最外层的电子。

利用式 $(6-57)$ 证明，$\breve{\boldsymbol{p}}$ 取某特定值时的散射概率正比于 $v_A^2+v_B^2+2v_Av_B\cos(\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{d}/\hbar)$，其中 $\boldsymbol{d}=\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$，而 v_A, v_B 是它们分别单独散射时用式 $(6-39)$ 计算的 $v(\breve{\boldsymbol{p}})$。

参考答案：

类似式 $(6-38)$，只不过把 $V(\boldsymbol{x}_c)$ 换成了 $V_A(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{a})+V_B(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{b})$，结果是

$$\begin{aligned}
K^{(1)} \approx& \mathscr{K}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{x}_c\right)[V_A(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{a})+V_B(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{b})]d^3\boldsymbol{x}_c\\
=&\mathscr{K}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{x}_c\right)V_A(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{a})d^3\boldsymbol{x}_c+\mathscr{K}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{x}_c\right)V_B(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{b})d^3\boldsymbol{x}_c
\end{aligned}$$

其中常数 $\mathscr{K}$ 就是式 $(6-38)$ 前面的系数

$$\mathscr{K} = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{5/2}\frac{u}{T^{1/2}r_ar_b}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{mu^2}{2}T\right)$$

上式可以继续计算下去

$$\begin{aligned}
K^{(1)} \approx& \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}\right)\mathscr{K}\int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{a})\right]V_A(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{a})d^3(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{a})\\
&+\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{b}\right)\mathscr{K}\int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{b})\right]V_B(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{b})d^3(\boldsymbol{x}_c-\boldsymbol{b})\\
=&\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}\right)\mathscr{K}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{x}_c\right)V_A(\boldsymbol{x}_c)d^3\boldsymbol{x}_c\\
&+\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{b}\right)\mathscr{K}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{x}_c\right)V_B(\boldsymbol{x}_c)d^3\boldsymbol{x}_c\\
=&\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}\right)f_A(\breve{\boldsymbol{p}})+\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{b}\right)f_B(\breve{\boldsymbol{p}})
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
f_A &= \mathscr{K}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{x}_c\right)V_B(\boldsymbol{x}_c)d^3\boldsymbol{x}_c = \mathscr{K}v_A(\breve{\boldsymbol{p}})\\
f_B &= \mathscr{K}\int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{x}_c\right)V_B(\boldsymbol{x}_c)d^3\boldsymbol{x}_c = \mathscr{K}v_B(\breve{\boldsymbol{p}})
\end{aligned}$$

正好分别是两个原子分别位于坐标系中心时单独散射的几率幅。

至于后面所说的散射概率正比于 $v_A^2+v_B^2+2v_Av_B\cos(\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{d}/\hbar)$，这里应当隐含了假设“原子势 V_A 和

V_B 都是中心力势”，这种情形之下，根据式 $(6-45)$ 知 $v(\breve{\boldsymbol{p}})$ 明显是实数，有

$$\begin{aligned}|K^{(1)}|^2 &= \left|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}\right)f_A(\breve{\boldsymbol{p}})+\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{b}\right)f_B(\breve{\boldsymbol{p}})\right|^2\\ &=|\mathscr{K}|^2\left|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}\right)v_A(\breve{\boldsymbol{p}})+\exp\left(\frac{i}{\hbar}\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{b}\right)v_B(\breve{\boldsymbol{p}})\right|^2\\ &=|\mathscr{K}|^2\left[v_A^2(\breve{\boldsymbol{p}})+v_B^2(\breve{\boldsymbol{p}})+2v_A(\breve{\boldsymbol{p}})v_B(\breve{\boldsymbol{p}})\cos(\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{d}/\hbar)\right]\end{aligned}$$

6.4.7 问题 6-11

设该双分子原子的取向是无轨的。证明：电子被一群这种分子散射的平均几率正比于 $v_A^2+v_B^2+2v_Av_B\frac{\sin(|\breve{\boldsymbol{p}}||\boldsymbol{d}|/\hbar)}{|\breve{\boldsymbol{p}}||\boldsymbol{d}|/\hbar}$。这个结果怎样推广到多原子分子情形？

这个结果就是电子衍射技术可能确定分子形状的根据。用玻恩近似计算的 v 值是实数，其结果适用于各种分子衍射实验中通常所使用的电子能量 (keV 量级)。然而，若分子包含了像铀那样非常重的原子，则这个原子的势太大了，以致玻恩近似不足以描述它，从而必须有一些小的修正。

参考答案：

问题 6-10 中我们已经求出了几率，它正比于

$$v_A^2+v_B^2+2v_Av_B\cos(\breve{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{d}/\hbar)$$

为了求出平均几率，事实上是要我们遍取所有可能的 $\boldsymbol{d}=\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$ 的方向求平均，这等价于在球面上求平均。以给定的 $\breve{\boldsymbol{p}}$ 所在的直线为 z 轴，可以建立直角坐标系，此时单个几率正比于

$$v_A^2+v_B^2+2v_Av_B\cos(|\breve{\boldsymbol{p}}||\boldsymbol{d}|\cos\theta/\hbar)$$

继而使用球坐标，那么平均值正比于

$$\begin{aligned}&\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\left[v_A^2+v_B^2+2v_Av_B\cos(|\breve{\boldsymbol{p}}||\boldsymbol{d}|\cos\theta/\hbar)\right]\sin\theta d\theta\\ =&v_A^2+v_B^2-v_Av_B\left.\frac{\sin(|\breve{\boldsymbol{p}}||\boldsymbol{d}|\cos\theta/\hbar)}{|\breve{\boldsymbol{p}}||\boldsymbol{d}|/\hbar}\right|_0^{\pi}\\ =&v_A^2+v_B^2+2v_Av_B\frac{\sin(|\breve{\boldsymbol{p}}||\boldsymbol{d}|/\hbar)}{|\breve{\boldsymbol{p}}||\boldsymbol{d}|/\hbar}\end{aligned}$$

6.4.8 问题 6-12

设 $V(\boldsymbol{r})$ 与时间无关，证明：二阶散射项 $K^{(2)}(b,a)$ 的时间积分给出

$$\begin{aligned}K^{(2)}(b,a)=&\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\iint\frac{R_{bc}+R_{cd}+R_{da}}{R_{bc}R_{cd}R_{da}}\\ &\times\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(R_{bc}+R_{cd}+R_{da})^2\right]V(\boldsymbol{x}_d)V(\boldsymbol{x}_c)d^3\boldsymbol{x}_cd^3\boldsymbol{x}_d\end{aligned}\tag{6-58}$$

其中 a,b,c,d 各点的排列如图 6-9 所示。R_{cd} 为点 d,c 之间的距离，其余类推。

设在比 r_a 或 r_b 还短得多的距离上，$V(\boldsymbol{r})$ 已经小得可以忽略了。证明：截面由 $d\sigma/d\Omega=|f|^2$ 给

出，式中包含一阶项的散射几率幅 f 是

$$
\begin{aligned}
f =& \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_b\cdot\boldsymbol{x}_c\right)V(\boldsymbol{x}_c)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_c\right)d\boldsymbol{x}_c \\
&+\left(\frac{-m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\iint \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_b\cdot\boldsymbol{x}_c\right)V(\boldsymbol{x}_c)\frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar}pR_{cd}\right)}{R_{cd}} \\
&\times V(\boldsymbol{x}_d)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_d\right)d\boldsymbol{x}_c d\boldsymbol{x}_d
\end{aligned}
\tag{6-59}
$$

其中 $\boldsymbol{p}_a$ 和 $\boldsymbol{p}_b$ 分别是在 $\boldsymbol{x}_b$ 和 $-\boldsymbol{x}_a$ 方向上飞行的电子动量。动量的大小是 p，电子被比较重的原子弹性散射时，p 几乎不变。

参考答案：

首先来关注式 $(6-58)$，它是

$$
K^{(2)}=\int\int K_0(b,c)V(c)K_0(c,d)V(d)K_0(d,a)d\tau_d d\tau_c
$$

这里的 $d\tau=d^3\boldsymbol{x}dt$，根据式 $(6-29)$，对 t_d 的积分给出

$$
\begin{aligned}
K^{(2)}=\int d\tau_c K_0(b,c)V(c)\int&\left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\left(\frac{1}{R_{cd}}+\frac{1}{R_{da}}\right)V(d)\\
&\times\left(\frac{m}{2\pi i\hbar t_c}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar t_c}(R_{cd}+R_{da})^2\right]d^3\boldsymbol{x}_d
\end{aligned}
$$

注意到

$$
\left(\frac{m}{2\pi i\hbar t_c}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar t_c}(R_{cd}+R_{da})^2\right]
$$

在形式上也是一个自由传播子，跟 $K(c,a)$ 类似，因此，对 t_c 的积分同样类似于式 $(6-29)$，这也就意味着，对 $t_c,t_d,t_e,\ldots$ 的积分可以一直计算下去，它们是递归的。对 t_c 的积分，我们给出

$$
\begin{aligned}
K^{(2)}=&\iint\left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left(\frac{1}{R_{bc}}+\frac{1}{R_{cd}+R_{da}}\right)V(c)\left(\frac{1}{R_{cd}}+\frac{1}{R_{da}}\right)V(d)\\
&\times\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(R_{bc}+R_{cd}+R_{da})^2\right]d^3\boldsymbol{x}_d d^3\boldsymbol{x}_c\\
=&\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\iint\frac{R_{bc}+R_{cd}+R_{da}}{R_{bc}R_{cd}R_{da}}\\
&\times\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(R_{bc}+R_{cd}+R_{da})^2\right]V(\boldsymbol{x}_d)V(\boldsymbol{x}_c)d^3\boldsymbol{x}_c d^3\boldsymbol{x}_d
\end{aligned}
$$

甚至可以类比，$K^{(n)}$ 中，对所有时间的积分给出

$$
\begin{aligned}
K^{(n)}=\left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^n\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\iint&\frac{R_{bc}+R_{cd}+\cdots+R_{pq}+R_{qa}}{R_{bc}R_{cd}\ldots R_{pq}R_{qa}}\\
&\times\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(R_{bc}+R_{cd}+\cdots+R_{pq}+R_{qa})^2\right]\\
&\times V(\boldsymbol{x}_c)V(\boldsymbol{x}_d)\ldots V(\boldsymbol{x}_p)V(\boldsymbol{x}_q)d^3\boldsymbol{x}_c d^3\boldsymbol{x}_d\ldots d^3\boldsymbol{x}_p d^3\boldsymbol{x}_q
\end{aligned}
$$

这表示从 $b\to c\to d\to\cdots\to p\to q\to a$ 的积分路径。

继续关注 $K^{(2)}$，在指数部分，对 R_{bc} 和 R_{da} 采用近似式 $(6-30)$ 和 $(6-31)$

$$R_{bc} \approx r_b - \boldsymbol{i}_b \cdot \boldsymbol{x}_c$$
$$R_{da} \approx r_a + \boldsymbol{i}_a \cdot \boldsymbol{x}_d$$

而在分式中，直接让 $R_{bc} \approx r_b, R_{da} \approx r_a$，则有近似

$$\begin{aligned}K^{(2)} \approx &\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2} \iint \frac{r_b + R_{cd} + r_a}{r_b R_{cd} r_a} \\ &\times \exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(r_b - \boldsymbol{i}_b \cdot \boldsymbol{x}_c + R_{cd} + r_a + \boldsymbol{i}_a \cdot \boldsymbol{x}_d)^2\right] V(\boldsymbol{x}_d) V(\boldsymbol{x}_c) d^3\boldsymbol{x}_c d^3\boldsymbol{x}_d\end{aligned}$$

注意，我们假设“在比 r_a 或 r_b 还短得多的距离上，$V(\boldsymbol{r})$ 已经小得可以忽略了”，这意味着，对积分有主要贡献的，是 $\boldsymbol{x}_c, \boldsymbol{x}_d, R_{cd} = |\boldsymbol{x}_c - \boldsymbol{x}_d|$ 很小的时候，那么假设我们在分母中以及在指数中只需要保留它们的一阶项，这也就意味着

$$\frac{r_b + R_{cd} + r_a}{r_b R_{cd} r_a} \approx \frac{r_b + r_a}{r_b r_a} \frac{1}{R_{cd}}$$

和

$$\begin{aligned}&\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(r_b - \boldsymbol{i}_b \cdot \boldsymbol{x}_c + R_{cd} + r_a + \boldsymbol{i}_a \cdot \boldsymbol{x}_d)^2\right] \\ \approx &\exp\left\{\frac{im}{2\hbar T}\left[(r_b + r_a)^2 - 2(r_b + r_a)\boldsymbol{i}_b \cdot \boldsymbol{x}_c + 2(r_b + r_a)R_{cd} + 2(r_b + r_a)\boldsymbol{i}_a \cdot \boldsymbol{x}_d\right]\right\} \\ = &\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(r_b + r_a)^2\right] \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{x}_c}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{ipR_{cd}}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{x}_d}{\hbar}\right)\end{aligned}$$

其中 $p = m(r_b + r_a)/T, \boldsymbol{p}_a = p\boldsymbol{i}_a, \boldsymbol{p}_b = p\boldsymbol{i}_b$。这时候

$$\begin{aligned}K^{(2)} \approx &\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2} \left(\frac{r_b + r_a}{r_b r_a}\right) \\ &\times \iint \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{x}_c\right) V(\boldsymbol{x}_c) \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar}pR_{cd}\right)}{R_{cd}} V(\boldsymbol{x}_d) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{x}_d\right) d\boldsymbol{x}_c d\boldsymbol{x}_d\end{aligned}$$

要计算散射截面，需要计算 $|K^{(1)} + K^{(2)}|^2$，代入到式 $(6-40) \sim (6-43)$ 中，各项系数基本上是没有变化的。最后依旧可以得到式 $(6-44)$，只不过把 $v(\breve{\boldsymbol{p}})$ 换成

$$\begin{aligned}&\int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{x}_c\right) V(\boldsymbol{x}_c) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{x}_c\right) d\boldsymbol{x}_c \\ &+ \left(\frac{-m}{2\pi\hbar^2}\right) \iint \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{x}_c\right) V(\boldsymbol{x}_c) \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar}pR_{cd}\right)}{R_{cd}} V(\boldsymbol{x}_d) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{x}_d\right) d\boldsymbol{x}_c d\boldsymbol{x}_d\end{aligned}$$

而

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |v(\breve{\boldsymbol{p}})|^2 = |f|^2$$

所以可以取

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} v(\breve{\boldsymbol{p}})$$

6.4.9 问题 6-13

设 $V(\boldsymbol{r},t)$ 实际上与 t 无关。在式 $(6-61)$ 中代入自由粒子传播子 K_0，将结果对 t_c 积分，证明：

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x}_b,t_b)=&\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_a t_b\right)\left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_b\right)\right.\\&\left.-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{1}{R_{bc}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_a R_{bc}\right)V(\boldsymbol{x}_c)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_c\right)d^3\boldsymbol{x}_c\right]\end{aligned}\tag{6-62}$$

其中 R_{bc} 是由终点 $\boldsymbol{x}_b$ 到积分变点 $\boldsymbol{x}_c$ 的距离；而 $p_a=|\boldsymbol{p}_a|$ 是电子动量大小。

再一次假设，在比 r_a 或 r_b 还小得多的距离上，势已经下降到零。证明：可以把式 $(6-62)$ 写为

$$\psi(\boldsymbol{x}_b,t_b)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_a t_b\right)\left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_b\right)+\frac{f(\theta)}{r_b}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_a r_b\right)\right]\tag{6-63}$$

其中散射幅 $f(\theta)$ 用 $v(\breve{\boldsymbol{p}})$ 定义为 [参看式 $(6-39)$]

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}v(\breve{\boldsymbol{p}})\tag{6-64}$$

式 $(6-63)$ 的最后一项 $\frac{f(\theta)}{r_b}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_a r_b\right)$ 可以看成为散射波函数的空间部分。它的形式为由散射原子的质心向外辐射的球面波。这个球面波在某特定散射角处的波幅通过函数 $f(\theta)$ 与角度有关，而根据式 $(6-64)$，$f(\theta)$ 又随传递动量 $\breve{\boldsymbol{p}}$ 而变化。因此，散射以后电子的完整波函数可以看成是两项之和。第一项是未被散射电子的平面波 $\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_b\right)$，第二项是散射电子的球面波，如图 6-10 所示。应用这个观点推导截面 $d\sigma/d\Omega$ 的公式。

参考答案：

为了完成 $K^{(1)}$ 中对 t_c 的积分，我们首先写出

$$\begin{aligned}&\int_0^{t_b}K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_c,t_c)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_a t_c\right)dt_c\\=&\int_0^{t_b}\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b-t_c)}\right]^{3/2}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}\frac{|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2}{t_b-t_c}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_a t_c\right)dt_c\end{aligned}$$

设 $s^2=1/(t_b-t_c)$，即 $s=1/\sqrt{t_b-t_c}$，代入上式

$$\begin{aligned}&\int_0^{t_b}\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b-t_c)}\right]^{3/2}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}\frac{|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2}{t_b-t_c}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_a t_c\right)dt_c\\=&\int_0^{t_b}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{3/2}s^3\exp\left[\frac{im}{2\hbar}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2s^2-\frac{i}{\hbar}E_a\left(t_b-\frac{1}{s^2}\right)\right]d\left(t_b-\frac{1}{s^2}\right)\\=&2\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_a t_b\right)\int_{1/\sqrt{t_b}}^{\infty}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2s^2+\frac{i}{\hbar}\frac{E_a}{s^2}\right)ds\end{aligned}$$

这个积分没有简单的表达式，而为了得出较为简单的表达式，我们考虑将用下面的积分近似代替：

$$\int_{1/t_b}^{\infty}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2s^2+\frac{i}{\hbar}\frac{E_a}{s^2}\right)ds\approx\int_0^{\infty}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2s^2+\frac{i}{\hbar}\frac{E_a}{s^2}\right)ds$$

显然，右端是左端积分在 $t_b\to 0$ 时的近似。我们可以更准确地分析该近似在什么时候效果会好，因为我们已经知道，积分的主要贡献源自低频附近的位置，我们有

$$\frac{m}{2\hbar}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2s^2+\frac{1}{\hbar}\frac{E_a}{s^2}\geq 2\sqrt{\frac{mE_a}{2\hbar^2}}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|$$

取等号时有

$$\frac{m}{2\hbar}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2s^2=\frac{1}{\hbar}\frac{E_a}{s^2}\quad\rightarrow\quad s=\sqrt[4]{\frac{2E_a}{m|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2}}=\sqrt{\frac{p_a}{m|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|}}$$

因此积分的主要贡献来源于 $s=\sqrt{\frac{p_a}{m|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|}}$ 附近，所以当 $\frac{1}{\sqrt{t_b}}\ll\sqrt{\frac{p_a}{m|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|}}$ 时，即 $p_a\gg\frac{m|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|}{t_b}$ 时，积分近似是好的，因为两者均已经包含了积分的主要贡献，而两者之差的部分对积分的贡献是则是微小的。

假设上面讨论的条件满足，那么用近似积分代替原来的积分，根据附录中的公式 $(A-3)$，得到：

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2s^2+\frac{i}{\hbar}\frac{E_a}{s^2}\right)ds&=\sqrt{\frac{\pi i}{2m|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|^2/\hbar}}\exp\left(2i\sqrt{\frac{mE_a}{2\hbar^2}}|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|\right)\\&=\sqrt{\frac{\pi i\hbar}{2m}}\frac{1}{R_{bc}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_aR_{bc}\right)\end{aligned}$$

最后我们得到

$$\begin{aligned}&\int_0^{t_b}K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_c,t_c)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_at_c\right)dt_c\\\approx&2\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_at_b\right)\sqrt{\frac{\pi i\hbar}{2m}}\frac{1}{R_{bc}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_aR_{bc}\right)\\=&\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_at_b\right)\frac{1}{R_{bc}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_aR_{bc}\right)\end{aligned}$$

代入到式 $(6-61)$ 即得式 $(6-62)$。

基于式 $(6-62)$ 式，以及“在比 r_a 或 r_b 还小得多的距离上，势已经下降到零”的假设，可以进一步近似，这意味着，在分母中可以使用近似 $R_{bc}\approx r_b$，而在指数中，则需要保留 $\boldsymbol{x}_c$ 的一阶项，即 $R_{bc}\approx r_b-\boldsymbol{i}_b\cdot\boldsymbol{x}_c$，代入即得式 $(6-63)$。

最后，按照式 $(6-43)$，便有

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega}=&\frac{r_b^2P(b)}{[(r_a+r_b)/r_a]^2P(d)}\\=&\frac{r_b^2\left|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_at_b\right)\frac{f(\theta)}{r_b}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_ar_b\right)\right|^2}{[(r_a+r_b)/r_a]^2\left|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_at_b\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_b\right)\right|^2}\\=&\left(\frac{r_a}{r_a+r_b}\right)^2|f(\theta)|^2\end{aligned}$$

注意这里的答案跟式 $(6-44)$ 并不相同，除非 $r_a\rightarrow\infty$。这是因为在上述推导过程中，我们多用了一步近似，即 $p_a\gg\frac{m|\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{x}_c|}{t_b}$，为满足这个近似，一种方案是 p_a 和 t_b 都尽可能大，而这正好意味着 r_a 尽可能大，因此在所采用的近似之下，两者是等价的。。

6.4.10 问题 6-14

应用波函数方法讨论电子被正弦振荡场散射的情况，这个场的势由下式给出：

$$V(\boldsymbol{x},t)=U(\boldsymbol{x})\cos\omega t\qquad(6-65)$$

证明：在一阶玻恩近似中，出射波的能量要改变一个量，或者是 $\hbar\omega$ 或者是 $-\hbar\omega$。在高阶项会发生什么情况？

参考答案：

首先将 $V(\boldsymbol{x},t)$ 写为

$$V(\boldsymbol{x},t)=U(\boldsymbol{x})\frac{\exp(i\omega t)+\exp(-i\omega t)}{2}$$

代入到式 $(6-61)$ 中，有

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x}_b,t_b)=&\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_at_b\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_b\right)\\&-\frac{i}{2\hbar}\int_0^{t_b}\int K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_c,t_c)U(\boldsymbol{x}_c)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_c-\frac{i}{\hbar}(E_a-\hbar\omega)t_c\right]d^3\boldsymbol{x}_cdt_c\\&-\frac{i}{2\hbar}\int_0^{t_b}\int K_0(\boldsymbol{x}_b,t_b;\boldsymbol{x}_c,t_c)U(\boldsymbol{x}_c)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{x}_c-\frac{i}{\hbar}(E_a+\hbar\omega)t_c\right]d^3\boldsymbol{x}_cdt_c\end{aligned}$$

对于高阶项，如二阶项，跟

$$U(\boldsymbol{x}_c)U(\boldsymbol{x}_d)\left(\frac{\exp(i\omega t)+\exp(-i\omega t)}{2}\right)^2=U(\boldsymbol{x}_c)U(\boldsymbol{x}_d)\frac{\exp(2i\omega t)+2+\exp(-2i\omega t)}{4}$$

有关。这时能量的改变可能为 $0,\pm\hbar\omega,\pm2\hbar\omega$。(本题的解答比较含糊，因为笔者也不是特别理解该问题，请了解的读者不吝指教，谢谢)

6.5 6-5 与时间有关的微扰及跃迁几率幅

6.5.1 问题 6-15

记得在问题 5-4 中，我们把一个特定积分定义为由状态 $\psi(x)$ 到状态 $\chi(x)$ 的跃迁几率幅。证明：当初态是本征函数 $\phi_n(x)$ 而末态是本征函数 $\phi_m(x)$ 时，函数 λ_{mn} 满足这个定义。

参考答案：

根据问题 5-4 的定义，为了证明 λ_{mn} 是跃迁几率幅，我们要证明

$$\lambda_{mn}(t_b,t_a)=\iint\phi_m^*(x_b)K_V(b,a)\phi_n(x_a)dx_adx_b$$

积分是对全空间进行的。接下来，只需要把式 $(6-68)$ 的 $K_V(b,a)$ 代进上式右端：

$$\begin{aligned}&\iint\phi_m^*(x_b)K_V(b,a)\phi_n(x_a)dx_adx_b\\=&\iint\phi_m^*(x_b)\left[\sum_p\sum_q\lambda_{pq}(t_b,t_a)\phi_p(x_b)\phi_q^*(x_a)\right]\phi_n(x_a)dx_adx_b\\=&\sum_p\sum_q\underbrace{\left(\int\phi_m^*(x_b)\phi_p(x_b)dx_b\right)\left(\int\phi_q^*(x_a)\phi_n(x_a)dx_a\right)}_{\text{根据式 (4-47)，这两项分别为}\delta_{mp},\delta_{qn}}\lambda_{pq}(t_b,t_a)\\=&\sum_p\sum_q\delta_{mp}\delta_{qn}\lambda_{pq}(t_b,t_a)\\=&\lambda_{mn}(t_b,t_a)\end{aligned}$$

6.5.2 问题 6-16

把式 $(6-71)$ 解释为对所有可能性求和，请阐明这些可能性的含义。

参考答案：

让我们来重写式 $(6-71)$：

$$V_{mn}(t_c)=\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m^*(x_c)V(x_c,t_c)\phi_n(x_c)dx_c \tag{6-71}$$

左端可以理解为在 t_c 时刻，系统从状态 n 被散射到状态 m 的几率幅，它等于右端所描述的各项几率幅的求和，其含义是：

1. $\phi_n(x_c)$ 是系统处于状态 n 时，在 x_c 点发现它的几率幅;
2. $V(x_c,t_c)$ 是系统在 t_c 时刻，在 x_c 被散射的几率幅;
3. $\phi_m^*(x_c)$ 是系统在 x_c 点时，它处于状态 m 的几率幅;
4. $\phi_m^*(x_c)V(x_c,t_c)\phi_n(x_c)$ 便是在 t_c 时刻，系统处于状态 n，并且在 x_c 点被势 V 散射，最终到达状态 m 的几率幅。

因此，要求在 t_c 时刻系统从状态 n 被散射到状态 m 的几率幅，就需要把所有可能的 x_c 进行求和，由于 x_c 的选取是任意的，这里的求和就表现为对 x_c 的积分。

6.5.3 问题 6-17

通过解释每一项的含义来解释式 $(6-72)$，然后证明并解释二阶系数方程

$$\begin{aligned}\lambda_{mn}^{(2)}=\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{t_a}^{t_b}\Bigg[\int_{t_a}^{t_c}\sum_k\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_c)\right)V_{mk}(t_c)\\ \times\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k(t_c-t_d)\right)V_{kn}(t_d)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t_d-t_a)\right)dt_d\Bigg]dt_c\end{aligned}$$

参考答案：

事实上，本题的答案在中文版 113 页，问题6-19 的下方已经给出，即“我们可以用下述规则解释 (6-69) 式中的所有项...”开始的接下来三段。

6.5.4 问题 6-18

推导并解释积分方程

$$\begin{aligned}\lambda_{mn}(t_b,t_a)=&\delta_{mn}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_a)\right]\\ &-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_c)\right]\sum_k V_{mk}(t_c)\lambda_{kn}(t_c,t_a)dt_c\end{aligned} \tag{6-75}$$

参考答案：

在问题6-15 中，我们已经证明了

$$\lambda_{mn}(t_b,t_a)=\iint\phi_m^*(x_b)K_V(b,a)\phi_n(x_a)dx_adx_b$$

而 U 作为未微扰势，对应于式 $(6-19)$ 的结果是

$$K_V(b,a)=K_U(b,a)-\frac{i}{\hbar}\iint K_U(b,c)V(c)K_V(c,a)dx_cdt_c$$

于是，在上式两端都乘以 $\phi_m^*(x_b)\phi_n(x_a)$ 并对 x_a,x_b 积分，得到

$$\begin{aligned}&\lambda_{mn}(t_b,t_a)\\=&\iint\phi_m^*(x_b)K_V(b,a)\phi_n(x_a)dx_adx_b\\=&\iint\phi_m^*(x_b)K_U(b,a)\phi_n(x_a)dx_adx_b-\int\left[\iiint\phi_m^*(x_b)K_U(b,c)V(c)K_V(c,a)\phi_n(x_a)dx_ad_bdx_c\right]dt_c\end{aligned}$$

其中，因为 $K_U(b,a)$ 是未微扰的，因此

$$K_U(b,a)=\sum_k\phi_k(x_b)\phi_k^*(x_a)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_k(t_b-t_a)\right]$$

代入第一项得

$$\iint\phi_m^*(x_b)K_U(b,a)\phi_n(x_a)dx_adx_b=\delta_{mn}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_a)\right]$$

现在留意方括号福分，将上式代入后得到

$$\sum_k\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_k(t_b-t_c)\right]\iiint\phi_m^*(x_b)\phi_k(x_b)\phi_k^*(x_c)V(c)K_V(c,a)\phi_n(x_a)dx_adx_bdx_c$$

完成对 x_b 的积分

$$\sum_k\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_k(t_b-t_c)\right]\iint\delta_{mk}\phi_k^*(x_c)V(c)K_V(c,a)\phi_n(x_a)dx_adx_c$$

根据式 $(6-73)$，完成对 x_a 的积分

$$\sum_k\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_k(t_b-t_c)\right]\int\delta_{mk}\phi_k^*(x_c)V(c)\sum_j\lambda_{jn}\phi_j(x_c)dx_c$$

最后，根据式 $(6-71)$ 完成对 x_c 的积分，得到

$$\sum_j\sum_k\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_k(t_b-t_c)\right]\iint\delta_{mk}V_{jk}(t_c)\lambda_{jn}=\sum_j\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_a)\right]V_{jm}(t_c)\lambda_{jn}$$

因此，

$$\begin{aligned}\lambda_{mn}(t_b,t_a)=&\delta_{mn}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_a)\right]\\&-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_c)\right]\sum_kV_{mk}(t_c)\lambda_{kn}(t_c,t_a)dt_c\end{aligned}\tag{6-75}$$

该式子的物理意义可以这样描述：

系统从 t_a 时刻的状态 n 跃迁到 t_b 时刻的状态 m 的跃迁几率幅，是下面两部分几率幅之和：

1. 系统没有被势 V 散射,于是一直处于状态 n 种,振幅随时间变化,即 $\delta_{mn}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_a)\right]$;
2. 系统被势 V 散射过，其中，最后一次散射发生在时刻 t_c，被散射到了状态 k，而到达 k 之前的散射几率幅由 $\lambda_{kn}(t_c,t_a)$ 精确描述，在 t_c 时刻被散射的几率幅正比于 $V(t_c)dt_c$，被散射到状态 m 之后，在 t_b 发现系统处于状态 m 的几率正比于 $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_c)\right]$，因此总几率幅是正比于 $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b-t_c)\right]V_{mk}(t_c)\lambda_{kn}(t_c,t_a)dt_c$，而 t_c 和 k 都是任意的，因此要遍历 t_c 和 k 求和。

6.5.5　问题 6-19

把 $\lambda_{mn}(t_b, t_a)$ 看成是最终时间 t_b 的函数 $\lambda_{mn}(t_b)$。使用式 $(6-75)$ 或式 $(6-69)$ 证明：

$$\frac{d}{dt_b}\lambda_{mn}(t_b) = -\frac{i}{\hbar}\left[E_m\lambda_{mn}(t_b) + \sum_k V_{mk}(t_b)\lambda_{kn}(t_b)\right] \tag{6-76}$$

给出这个结果的直接物理解释。然后直接从薛定谔方程推出这一结果。

提示　应用式 $(6-73)$ 并代入薛定谔方程。注意，可直接用式 $(6-76)$ 和初始条件 $\lambda_{mn}(t_a) = \delta_{mn}$ 一起来确定 λ。

参考答案：

回顾式 $(4-24)$，可得

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}K(b,a) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K(b,a) + [U(b)+V(b)]K(b,a) = [H_b + V(b)]K(b,a)$$

这里的 H_b 是未微扰的结果，即

$$H_b = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2} + U(b)$$

跟前一问题类似，在上式两端都乘以 $\phi_m^*(x_b)\phi_n(x_a)$ 并对 x_a, x_b 积分，得到

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dt_b}\lambda_{mn}(t_b) = &\iint \phi_m^*(x_b)H_bK(b,a)\phi_n(x_a)dx_adx_b\\ &+\iint \phi_m^*(x_b)V(b)K(b,a)\phi_n(x_a)dx_adx_b\end{aligned}$$

根据式 $(6-71)$ 完成对 x_a 的积分，得到

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dt_b}\lambda_{mn}(t_b) = &\int \phi_m^*(x_b)H_b\sum_k\lambda_{kn}\phi_k(x_b)dx_b\\ &+\int \phi_m^*(x_b)V(b)\sum_k\lambda_{kn}\phi_k(x_b)dx_b\end{aligned}$$

等号右边后半部分正是 $\sum_k V_{mk}(t_b)\lambda_{kn}(t_b)$，而前半部分，根据定义式 $(4-42)$，有 $H_b\phi_k(x_b) = E_k\phi_k(x_b)$，所以等于

$$\int \phi_m^*(x_b)H_b\sum_k\lambda_{kn}\phi_k(x_b)dx_b = \sum_k E_k\lambda_{kn}\int\phi_m^*(x_b)\phi_k(x_b)dx_b = E_m\lambda_{mn}$$

最后得到式 $(6-76)$。

（至于明显的物理意义，笔者愚钝，还没有想出来。请读者不吝指教。）

6.5.6　问题 6-20

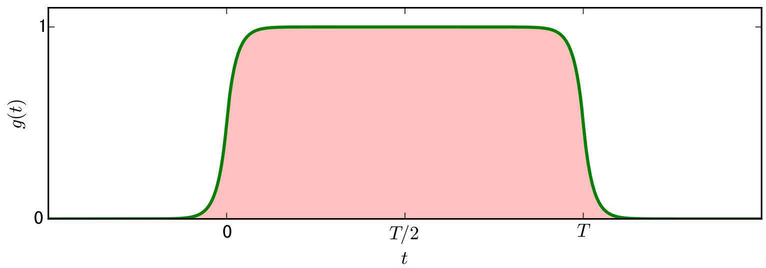
设 V 是缓慢地“开”和“关”。例如，令 $V(x,t) = V(x)g(t)$，式中 $g(t)$ 是光滑的，如图 $(6-12)$ 所示。

$$g(t) = \begin{cases}\frac{1}{2}\exp(\gamma t) & \text{当}t<0\\ 1-\frac{1}{2}\exp(-\gamma t) & \text{当}0<t<\frac{T}{2}\\ 1-\frac{1}{2}\exp[\gamma(t-T)] & \text{当}\frac{T}{2}<t<T\\ \frac{1}{2}\exp[-\gamma(t-T)] & \text{当}t>T\end{cases} \tag{6-80}$$

设函数 $g(t)$ 上升的时间 $1/\gamma \ll T$，而且 $\gamma \ll (E_m - E_n)$。证明：式 $(6-79)$ 给出的概率缩小了一个因子 $[1+(E_m-E_n)^2/\hbar^2\gamma^2]^{-2}$。在 $g(t)$ 的这个定义中，其对时间的二次导数仍有不连续点。更光滑的函数会带来进一步的缩小。

参考答案：

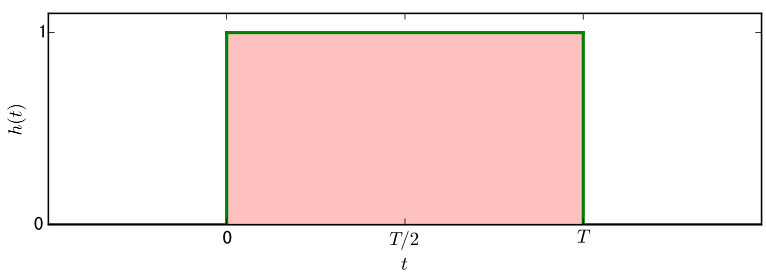
首先需要指出问题中的一个错误之处，即上述 $g(t)$ 在 $t=T/2$ 处的一阶导数也是不连续的，除非 γ 足够大，以至于这里的误差可以忽略。$g(t)$ 的图像大致如下



此外，笔者认为，就问题的意图而言，问题的表述有些函数。事实上，本题应该是希望我们比较两种类似的势 $V(x)g(t)$ 和 $V(x)h(t)$ 在“一直以来”的跃迁概率，即 $t\in(-\infty,+\infty)$，其中 $h(t)$ 为

$$h(t)=\begin{cases}1 & \text{当}0<t<T\\ 0 & \text{其他情况}\end{cases} \tag{6-80}$$

其大致图像为



$g(t)$ 和 $h(t)$ 的区别在于，$g(t)$ 的势是“缓慢而来”并且“缓慢消失”的，它的时间具有较大的不确定性；$h(t)$ 的势是“突如其来”并且“忽然消失”的，它的时间具有较小的不确定性。本题就是希望比较这两种不确定性的区别导致的跃迁概率的区别。式 $(6-79)$ 正好给了势 $V(x)h(t)$ 的结果。下面求 $V(x)g(t)$ 的结果

记 $V_{mn}=\int\phi_m^*(x_c)V(x_c)\phi_n(x_c)dx_c, V_{mn}(t)=\int\phi_m^*(x_c)V(x_c)g(t)\phi_n(x_c)dx_c=V_{mn}g(t)$，那么由式 $(6-77)$ 得到

$$\lambda_{mn}^{(1)}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_mt_b-E_nt_a)\right]=-\frac{i}{\hbar}V_{mn}\int_{-\infty}^{+\infty}g(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t\right]dt$$

积分分为四部分，但它们差别不大，简洁起见，记 $\omega=(E_m t_b-E_n t_a)/\hbar$，则

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{0}\frac{1}{2}\exp(\gamma t)\exp(i\omega t)dt&=\frac{1}{2}\frac{1}{\gamma+i\omega}\\
\int_{0}^{T/2}\left[1-\frac{1}{2}\exp(-\gamma t)\right]\exp(i\omega t)dt&=\frac{\exp(i\omega T/2)-1}{i\omega}-\frac{1}{2}\frac{1}{\gamma-i\omega}\\
\int_{T/2}^{T}\left[1-\frac{1}{2}\exp(\gamma(t-T))\right]\exp(i\omega t)dt&=\frac{\exp(i\omega T)-\exp(i\omega T/2)}{i\omega}-\frac{1}{2}\frac{\exp(i\omega T)}{i\omega+\gamma}\\
\int_{T}^{+\infty}\frac{1}{2}\exp[-\gamma(t-T)]\exp(i\omega t)dt&=\frac{1}{2}\frac{\exp(i\omega T)}{\gamma-i\omega}
\end{aligned}$$

以上结果均采用了 $\gamma T\gg 1$ 的近似，即忽略了带有 $\exp(-\gamma T)$ 的项，将上面四式相加，得到

$$\left(\frac{1}{i\omega}+\frac{1}{2}\frac{1}{\gamma-i\omega}-\frac{1}{2}\frac{1}{\gamma+i\omega}\right)[\exp(i\omega T)-1]=\frac{\exp(i\omega T)-1}{i\omega}\frac{\gamma^2}{\gamma^2+\omega^2}$$

跟式 $(6-78)$ 相比，正好相差一个因子

$$\frac{\gamma^2}{\gamma^2+\omega^2}=\frac{1}{1+(E_m-E_n)^2/\hbar^2\gamma^2}$$

所以概率正好缩小了因子 $[1+(E_m-E_n)^2/\hbar^2\gamma^2]^{-2}$。

可以发现，$|E_m-E_n|$ 越大，这个因子越小，这也意味着，对于大的 $|E_m-E_n|$，概率变得更小了，换言之，对于 $g(t)$ 来说，时间的不确定性变大了，能量的不确定性就变小了。

6.5.7 问题 6-21

考虑一个特殊情况，除了在两个能级 1 和 2 之间外，微扰势 V 的矩阵元均为 0，而且还假设这两个能级是简并的，即设 $E_1=E_2=E$。令 $V_{12}=V_{21}=v$；V_{11},V_{22} 和所有其他 V_{mn} 均等于零。证明

$$\begin{cases}\lambda_{11}=1-\dfrac{v^2T^2}{2\hbar^2}+\dfrac{v^4T^4}{24\hbar^4}-\cdots=\cos\dfrac{vT}{\hbar} & (6-81)\\ \lambda_{12}=-i\dfrac{vT}{\hbar}+i\dfrac{v^3T^3}{6\hbar^3}-\cdots=-i\sin\dfrac{vT}{\hbar} & (6-82)\end{cases}$$

参考答案：

在这种情况下，$V_{mn}=\begin{pmatrix}0&v\\v&0\end{pmatrix}$ 是一个二阶方阵，相应地，式 $(6-76)$ 是一有限的常系数微分方程组：

$$\frac{d}{dt_b}\lambda_{mn}=-\frac{i}{\hbar}\left[E\lambda_{mn}+\begin{pmatrix}0&v\\v&0\end{pmatrix}\lambda_{mn}\right]$$

上面的乘法是矩阵乘法。为解这个方程组，留意到 $E\lambda_{mn}$ 这一项，我们可以设

$$\lambda_{mn}=L_{mn}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et_b\right)$$

代入原方程，可以得到

$$\frac{d}{dt_b}L_{mn}=-\frac{i}{\hbar}\begin{pmatrix}0&v\\v&0\end{pmatrix}L_{mn}=-\frac{v}{\hbar}\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}L_{mn}$$

它的解，用矩阵形式的指数函数写出来是（就像解单个普通的常微分方程一样）

$$L_{mn} = C_{mn} \exp\left[-\frac{vt_b}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right]$$

其中 C_{mn} 是待定的常数矩阵。现在我们要来化简指数部分，留意到

$$\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}^2 = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

我们知道，对于二阶方阵来说，$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 相当于数字中的 1，那么上式表明，$\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ 相当于复数中的 i（因为它的平方等于矩阵中的-1，这跟复数中 i 的定义一致），那么 $\exp\left[-\frac{vt_b}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right]$ 就相当于复数的 $\exp\left(-\frac{vt_b}{\hbar}i\right)$，由欧拉公式知道[10]

$$\exp\left[-\frac{vt_b}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\cos\frac{vt_b}{\hbar} - \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}\sin\frac{vt_b}{\hbar}$$

至此，我们有

$$\lambda_{mn} = C_{mn}\begin{pmatrix} \cos\frac{vt_b}{\hbar} & -i\sin\frac{vt_b}{\hbar} \\ -i\sin\frac{vt_b}{\hbar} & \cos\frac{vt_b}{\hbar} \end{pmatrix}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et_b\right)$$

我们选择 $t_a=0, t_b=T$，则

$$\lambda_{mn} = C_{mn}\begin{pmatrix} \cos\frac{vT}{\hbar} & -i\sin\frac{vT}{\hbar} \\ -i\sin\frac{vT}{\hbar} & \cos\frac{vT}{\hbar} \end{pmatrix}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}ET\right)$$

最后来确定常数，显然，当 $v=0$ 时，即为无微扰的解，我们已经它的答案是 $\delta_{mn}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}ET\right)$，因此 $C_{mn}=\delta_{mn}$。所以

$$\lambda_{mn} = \begin{pmatrix} \cos\frac{vT}{\hbar} & -i\sin\frac{vT}{\hbar} \\ -i\sin\frac{vT}{\hbar} & \cos\frac{vT}{\hbar} \end{pmatrix}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}ET\right)$$

或者

$$\lambda_{11} = \lambda_{22} = \cos\frac{vT}{\hbar}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}ET\right)$$
$$\lambda_{12} = \lambda_{21} = -i\sin\frac{vT}{\hbar}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}ET\right)$$

可见，费曼提供的答案中缺少了能量的因子 $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}ET\right)$，在考虑概率时，这个因子是没有意义的。

6.5.8 问题 6-22

在问题 6-21 中，我们有 $V_{12}=V_{21}$，因此，V_{12} 是实数。证明，即使 V_{12} 是复数，物理结果仍相同（令 $v=|V_{12}|$）。

[10] 要注意的是，这种“相当于”不是唯一的，如 $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}^2 = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$，而且这种相当是只有它单一存在才成立，比如两个相当于 i 的矩阵之和 $\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ 就不相当于 $2i$。

参考答案：

根据定义式 $(6-71)$，必然有 $V_{mn}=V^*_{mn}$，因此当 V_{12} 是复数的时候有 $V_{21}=V^*_{12}$，跟问题6-21 比较，过程并没有太大变化，主要是矩阵 $\begin{pmatrix} 0 & V_{12} \\ V^*_{12} & 0 \end{pmatrix}$ 取代了矩阵 $\begin{pmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{pmatrix}$，而相当于复数 i 的矩阵变为

$$\frac{i}{v}\begin{pmatrix} 0 & V_{12} \\ V^*_{12} & 0 \end{pmatrix}$$

其中 $v=|V_{12}|$，其余地方并没有变化，不再重复写一次了。

6.5.9 问题 6-23

证明：即使波函数 $\phi(\boldsymbol{x})$ 归一化为在某任意体积 V 内的概率为 1，结果也与上式相同。

参考答案：

事实上不需要怎么证明，因为体积的单位本来就是任意选择的，在某任意体积 V 内归一化，这只不过是相当于选择了另外的单位体积。而 $d\sigma/d\Omega$ 只是两个截面之比，是个无量纲的量，因此选择什么单位并不会影响它的值。

如果要写出数学上的证明，那么新中文版 117 页的过程，保留 V 的情况下，正是本题的完整证明。(为什么有这个说法呢？因为在勘误那里，我把该页的全部 V 都改回为了 1。)

6.5.10 问题 6-24

设势 V 是时间的周期函数。例如，设 $V(x,t)=V(x)\cos\omega t$。证明发生跃迁的概率是很小的，除非终态能量为下面两个值之一：(1)$E_f=E_i+\hbar\omega$ (相应于吸收能量)，(2)$E_f=E_i-\hbar\omega$ (相应于放出能量)。这意味着式 $(6-86)$ 不变，不过态密度 $\rho(E)$ 必须在 E 的这些新值处重新计算。或者与式 $(6-87)$ 类似，有

$$\frac{dP(n\to m)}{dt}=\frac{2\pi}{\hbar}|M_{n\to m}|^2[\delta(E_m-E_n-\hbar\omega)+\delta(E_m-E_n+\hbar\omega)] \qquad (6-94)$$

参考答案：

记 $V_{mn}=\int\phi^*_m(x_c)V(x_c)\phi_n(x_c)dx_c, V_{mn}(t)=\int\phi^*_m(x_c)V(x_c)\cos\omega t\phi_n(x_c)dx_c=V_{mn}\cos\omega t$，可将 $\cos\omega t$ 改写为 $\frac{1}{2}[\exp(i\omega t)+\exp(-i\omega t)]$，那么由式 $(6-77)$ 得到

$$\begin{aligned}
&\lambda^{(1)}_{mn}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m t_b-E_n t_a)\right]\\
=&-\frac{i}{2\hbar}V_{mn}\int_0^T\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n+\hbar\omega)t\right]dt-\frac{i}{2\hbar}V_{mn}\int_0^T\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n-\hbar\omega)t\right]dt\\
=&-iV_{mn}\left[\exp\frac{i}{2\hbar}(E_m-E_n+\hbar\omega)T\times\frac{1}{E_m-E_n+\hbar\omega}\sin\frac{(E_m-E_n+\hbar\omega)T}{2\hbar}\right.\\
&\left.\qquad+\exp\frac{i}{2\hbar}(E_m-E_n-\hbar\omega)T\times\frac{1}{E_m-E_n-\hbar\omega}\sin\frac{(E_m-E_n-\hbar\omega)T}{2\hbar}\right]
\end{aligned}$$

此时，

$$\begin{aligned}P(n\to m)=&|\lambda_{mn}^{(1)}|^2\\=&V_{mn}\left[\frac{\sin^2\frac{(E_m-E_n+\hbar\omega)T}{2\hbar}}{(E_m-E_n+\hbar\omega)^2}+\frac{\sin^2\frac{(E_m-E_n-\hbar\omega)T}{2\hbar}}{(E_m-E_n-\hbar\omega)^2}\right.\\&\left.+2\cos\omega T\frac{\sin\frac{(E_m-E_n+\hbar\omega)T}{2\hbar}\sin\frac{(E_m-E_n-\hbar\omega)T}{2\hbar}}{(E_m-E_n+\hbar\omega)(E_m-E_n-\hbar\omega)}\right]\end{aligned}$$

可以看到，仅当 $E_m-E_n+\hbar\omega\to 0$（相应于放出能量）或者 $E_m-E_n-\hbar\omega\to 0$（相应于吸收能量）时，才可能产生比较大的 $P(n\to m)$。

如果要写成式 $(6-87)$ 的形式，那么只需要把 $\delta(E_m-E_n)$ 换成对应的 $\delta(E_m-E_n+\hbar\omega)+\delta(E_m-E_n-\hbar\omega)$。

6.5.11　问题 6-25

已经说过，像力学方程一样，电动力学方程必须改变成以光电效应为基础的量子化形式。在光电效应中，能量为 $\hbar\omega$ 的电子在频率为 ω 的光的影响下，偶然会从金属薄层中发射出来。如果物质服从量子定律，而光依然用连续波表示，这是可能的吗？由问题 6-24 的结果来看，关于放弃电动力学的经典描述的必要性，你可以提出什么论述？

参考答案：

由问题 6-24 的结果可以看出，如果我们允许光的势为复数，比如取 $V(x,t)=V(x)\exp(-i\omega t)$，那么跃迁的终态能量发生在 $E_m=E_n+\hbar\omega$ 处，这正好跟光电效应一样。因此，取复的周期势可以描述光电效应，并且使得光依然用连续波来表示。

6.5.12　问题 6-26

设有两个离散能级 E_1 和 E_2，其中任何一个都不处于连续区。设跃迁由 $V(x,t)=V(x)g(t)$ 形式的势所引起。证明跃迁概率是

$$P(1\to 2)=|V_{12}|^2|\phi(\omega_0)|^2/\hbar^2 \tag{6-95}$$

只要 $g(t)$ 可用其傅里叶变换

$$g(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\omega)\exp(i\omega t)d\omega \tag{6-96}$$

表示，并且 $\omega_0=(E_1-E_2)/\hbar$。

参考答案：

记 $V_{21}=\int\phi_2^*(x_c)V(x_c)\phi_1(x_c)dx_c, V_{21}(t)=\int\phi_2^*(x_c)V(x_c)g(t)\phi_1(x_c)dx_c=V_{21}g(t)$，那么由式 $(6-77)$ 得到

$$\begin{aligned}&\lambda_{21}^{(1)}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_2t_b-E_1t_a)\right]\\=&-\frac{i}{\hbar}V_{21}\int_{-\infty}^{+\infty}g(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t\right]dt\\=&-\frac{i}{\hbar}V_{21}\int_{-\infty}^{+\infty}g(t)\exp\left(-i\omega_0t\right)dt\qquad[\omega_0=(E_1-E_2)/\hbar]\\=&-\frac{i}{\hbar}V_{21}\phi(\omega_0)\end{aligned}$$

其中 $\phi(\omega_0)$ 是 $g(t)$ 的傅里叶变换。这里求的是系统在整个历史中（包括过去未来）的跃迁概率幅，这时候，跃迁概率为

$$P(1\to 2)=|\lambda_{21}^{(1)}|^2=|V_{12}|^2|\phi(\omega_0)|^2/\hbar^2 \tag{6-95}$$

而 $\phi(\omega_0)$ 的逆变换为

$$g(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\omega)\exp(i\omega t)d\omega \tag{6-96}$$

6.5.13 问题 6-27

推导随时间周期变化的势的微扰展开，直到二阶项。

参考答案：

设 $g(t)$ 是关于 t 的一个周期函数,用 $V(x,t)=V(x)g(t)$ 作为"随时间周期变化的势"的代表（我们在问题 6-14 和问题 6-24 中已经考虑过这种势），这里依然简记 $V_{mn}=\int\phi_m^*(x_c)V(x_c)\phi_n(x_c)dx_c, V_{mn}(t)=\int\phi_m^*(x_c)V(x_c)g(t)\phi_n(x_c)dx_c=V_{mn}g(t)$，一阶项我们已经知道，它是

$$\begin{aligned}&\lambda_{mn}^{(1)}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_mt_b-E_nt_a)\right]\\=&-\frac{i}{\hbar}V_{mn}\int_0^T g(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t\right]dt\end{aligned}$$

二阶项，在形式上也不困难，它是

$$\begin{aligned}&\lambda_{mn}^{(2)}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_mt_b-E_nt_a)\right]\\=&\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\sum_j V_{mj}V_{jn}\int_0^T\int_0^{t_c}g(t_c)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_j)t_c\right]g(t_d)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_j-E_n)t_d\right]dt_ddt_c\end{aligned}$$

进一步的计算需要写出 $g(t)$ 的具体形式。如简单的复势 $g(t)=\exp(-i\omega t)$，则只需要把式 $(6-78)$ 中的 E_m-E_n 分别换成 $E_m-E_n-\hbar\omega$，以及把式 $(6-98)$ 中的 $E_m-E_n, E_m-E_j, E_j-E_n$ 分别换成 $E_m-E_n-2\hbar\omega, E_m-E_j-\hbar\omega, E_j-E_n-\hbar\omega$。更典型的代表是实的势 $g(t)=\cos\omega t$，一阶项我们已经在问题 6-24 计算过，这里我们来计算二阶项。

展开

$$\begin{aligned}g(t_c)g(t_d)=&\cos\omega t_c\cos\omega t_d\\=&\frac{1}{4}\left[\exp(i\omega t_c)\exp(i\omega t_d)+\exp(-i\omega t_c)\exp(-i\omega t_d)\right.\\&\left.+\exp(i\omega t_c)\exp(-i\omega t_d)+\exp(-i\omega t_c)\exp(i\omega t_d)\right]\end{aligned}$$

所以，式 $(6-98)$ 是四项之和：

$$
\begin{aligned}
&4\lambda_{mn}^{(2)} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m t_b - E_n t_a)\right] \\
= &\sum_j \frac{V_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n - 2\hbar\omega)T\right]-1}{E_m - E_n - 2\hbar\omega} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j - \hbar\omega)T\right]-1}{E_m - E_j - \hbar\omega}\right\} \\
= &+\sum_j \frac{V_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n + 2\hbar\omega)T\right]-1}{E_m - E_n + 2\hbar\omega} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j + \hbar\omega)T\right]-1}{E_m - E_j + \hbar\omega}\right\} \\
= &+\sum_j \frac{V_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)T\right]-1}{E_m - E_n} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j + \hbar\omega)T\right]-1}{E_m - E_j + \hbar\omega}\right\} \\
= &+\sum_j \frac{V_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)T\right]-1}{E_m - E_n} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j - \hbar\omega)T\right]-1}{E_m - E_j - \hbar\omega}\right\}
\end{aligned}
$$

根据式 $(6-100)$，只包含二阶项的 $M_{n\to m}$ 为

$$M_{n\to m} = \frac{1}{2}\sum_j \frac{V_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega - i\epsilon} + \frac{1}{2}\sum_j \frac{V_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega - i\epsilon}$$

但是式 $(6-86)$ 的密度要在 $E_j - E_n \pm \hbar\omega$ 处重新计算。

6.5.14 问题 6-28

证明：当直接跃迁和经过一个中间态的跃迁都不可能，而需要使用两个中间态时，跃迁就由下述矩阵元决定：

$$M_{n\to m} = -\sum_j\sum_k \frac{V_{mj}V_{jk}V_{kn}}{(E_j - E_n)(E_k - E_n)} \tag{6-110}$$

这相应于微扰展开式中的三阶项。

参考答案：

容易类比，对于三阶项，我们有：

$$
\begin{aligned}
\lambda_{mn}^{(3)} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m t_b - E_n t_a)\right] &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \sum_j\sum_k V_{mj}V_{jk}V_{kn} \\
&\times \int_0^T\int_0^{t_c}\int_0^{t_d} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[(E_m - E_j)t_c + (E_j - E_k)t_d + (E_k - E_n)t_e\right]\right\} dt_e dt_d dt_c
\end{aligned}
$$

积分的结果是

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{(E_j - E_n)(E_k - E_n)}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)T\right]-1}{E_m - E_n} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j)T\right]-1}{E_m - E_j}\right. \\
&\qquad\left. -(E_j - E_n)\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_k)T\right]-1}{(E_m - E_k)(E_j - E_k)} + (E_j - E_n)\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j)T\right]-1}{(E_m - E_j)(E_j - E_k)}\right\}
\end{aligned}
$$

假设当 $E_k = E_n$ 和 $E_j = E_k$ 的态，均有 $V_{kn} = V_{jk} = 0$（这意味着这样的跃迁不可能发生），那么净效应就只有第一项，即

$$\lambda_{mn}^{(3)} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m t_b - E_n t_a)\right] = -\sum_j\sum_k \frac{V_{mj}V_{jk}V_{kn}}{(E_j - E_n)(E_k - E_n)}\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)T\right]-1}{E_m - E_n}$$

这意味着

$$M_{n\to m}=-\sum_j\sum_k\frac{V_{mj}V_{jk}V_{kn}}{(E_j-E_n)(E_k-E_n)} \tag{6-110}$$

6.5.15　问题 6-29

设有 $V(x,t)$ 和 $U(x,t)$ 两种微扰作用，例如，交流电场和直流电场组合或者电场和磁场的组合。再设某特定跃迁当 V 和 U 单独存在时均不可能发生，只有当两者一起存在时才会发生。在 V 和 U 都是与时间无关这一假设下，证明：决定矩阵跃迁的矩阵元由

$$M_{n\to m}=\sum_j\frac{V_{mj}U_{jn}+U_{mj}V_{jn}}{E_m-E_j} \tag{6-111}$$

给出。再进一步设两个势都随时间周期变化，但有不同的频率 ω_V 和 ω_U，试求矩阵元。

参考答案：

首先考虑与时间无关的情况，$W(x)=V(x)+U(x)$，或者等价地 $W_{mn}=V_{mn}+U_{mn}$，由于当 V 和 U 单独存在时均不可能发生跃迁，因此，具有效应的第一项是二阶项，即

$$M_{n\to m}=\sum_j\sum_k\frac{W_{mj}W_{jn}}{E_j-E_n}$$

而

$$\begin{aligned}W_{mj}W_{jn}=&(V_{mj}+U_{mj})(V_{jn}+U_{jn})\\=&V_{mj}V_{jn}+V_{mj}U_{jn}+U_{mj}V_{jn}+U_{mj}U_{jn}\end{aligned}$$

已经说过，单独出现不能造成跃迁，因此，能造成跃迁的是 $V_{mj}W_{jn}+W_{mj}V_{jn}$ 这部分，所以

$$M_{n\to m}=\sum_j\sum_k\frac{V_{mj}U_{jn}+U_{mj}V_{jn}}{E_j-E_n}$$

然后考虑“两个势都随时间周期变化，但有不同的频率 ω_V 和 ω_U”的情况。我们还是先考虑复势的情况，即

$$W(x,t)=V(x)\exp(i\omega_Vt)+U(x)\exp(i\omega_Ut)$$

对应地

$$W_{mn}(t)=V_{mn}exp(i\omega_Vt)+U_{mn}\exp(i\omega_Ut)$$

以及

$$\begin{aligned}W_{mj}(t_c)W_{jn}(t_d)=&V_{mj}V_{jn}\exp i\omega_V(t_c+t_d)+U_{mj}U_{jn}\exp i\omega_U(t_c+t_d)\\&+V_{mj}U_{jn}\exp(i\omega_Vt_c+i\omega_Ut_d)+U_{mj}V_{jn}\exp(i\omega_Vt_c+i\omega_Ut_d)\end{aligned}$$

由本文假设，前两项是没有效应的，因此

$$W_{mj}(t_c)W_{jn}(t_d)=V_{mj}U_{jn}\exp(i\omega_Vt_c+i\omega_Ut_d)+U_{mj}V_{jn}\exp(i\omega_Vt_c+i\omega_Ut_d)$$

代入到式 (6 − 98) 得到

$$
\begin{aligned}
&\lambda_{mn}^{(2)} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m t_b - E_n t_a)\right] \\
=&\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_j \int_0^T \int_0^{t_c} W_{mj}(t_c) W_{jn}(t_d) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j)t_c + \frac{i}{\hbar}(E_j - E_n)t_d\right] dt_d dt_c \\
=& \sum_j \frac{U_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_V} \left\{ \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n + \hbar\omega_V + \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_n + \hbar\omega_V + \hbar\omega_U} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j + \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_j + \hbar\omega_U} \right\} \\
&+ \sum_j \frac{V_{mj}U_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_U} \left\{ \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n + \hbar\omega_V + \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_n + \hbar\omega_V + \hbar\omega_U} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j + \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_j + \hbar\omega_V} \right\}
\end{aligned}
$$

最后结果是

$$
M_{n\to m} = \sum_j \frac{U_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_V - i\epsilon} + \sum_j \frac{V_{mj}U_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_U - i\epsilon}
$$

接着可以考虑两个实势的情况，即

$$
W(x,t) = V(x)\cos\omega_V t + U(x)\cos\omega_U t
$$

对应地

$$
W_{mn}(t) = V_{mn}\cos\omega_V t + U_{mn}\cos\omega_U t
$$

以及

$$
\begin{aligned}
W_{mj}(t_c)W_{jn}(t_d) =& V_{mj}V_{jn}\cos\omega_V t_c \cos\omega_V t_d + U_{mj}U_{jn}\cos\omega_U t_c \cos\omega_U t_d \\
&+ V_{mj}U_{jn}\cos\omega_V t_c \cos\omega_U t_d + U_{mj}V_{jn}\cos\omega_U t_c \cos\omega_V t_d
\end{aligned}
$$

由本文假设，前两项是没有效应的，因此

$$
W_{mj}(t_c)W_{jn}(t_d) = V_{mj}U_{jn}\cos\omega_V t_c \cos\omega_U t_d + U_{mj}V_{jn}\cos\omega_U t_c \cos\omega_V t_d
$$

所以

$$
\begin{aligned}
&\lambda_{mn}^{(2)} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m t_b - E_n t_a)\right] \\
=&\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_j V_{mj}U_{jn} \int_0^T \int_0^{t_c} \cos\omega_V t_c \cos\omega_U t_d \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j)t_c + \frac{i}{\hbar}(E_j - E_n)t_d\right] dt_d dt_c \\
&+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_j U_{mj}V_{jn} \int_0^T \int_0^{t_c} \cos\omega_U t_c \cos\omega_V t_d \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j)t_c + \frac{i}{\hbar}(E_j - E_n)t_d\right] dt_d dt_c
\end{aligned}
$$

积分比较繁琐，但是没有实质困难，可以预料，最终的结果有 8 项：

$$
\begin{aligned}
&4\lambda_{mn}^{(2)} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m t_b - E_n t_a)\right] \\
= &\sum_j \frac{V_{mj}U_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_U}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n + \hbar\omega_U + \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_n + \hbar\omega_U + \hbar\omega_V} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j + \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_j + \hbar\omega_V}\right\} \\
&+ \sum_j \frac{V_{mj}U_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_U}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n + \hbar\omega_U - \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_n + \hbar\omega_U - \hbar\omega_V} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j - \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_j - \hbar\omega_V}\right\} \\
&+ \sum_j \frac{V_{mj}U_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega_U}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n - \hbar\omega_U + \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_n - \hbar\omega_U + \hbar\omega_V} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j + \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_j + \hbar\omega_V}\right\} \\
&+ \sum_j \frac{V_{mj}U_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega_U}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n - \hbar\omega_U - \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_n - \hbar\omega_U - \hbar\omega_V} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j - \hbar\omega_V)T\right] - 1}{E_m - E_j - \hbar\omega_V}\right\} \\
&+ \sum_j \frac{U_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_V}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n + \hbar\omega_V + \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_n + \hbar\omega_V + \hbar\omega_U} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j + \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_j + \hbar\omega_U}\right\} \\
&+ \sum_j \frac{U_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_V}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n + \hbar\omega_V - \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_n + \hbar\omega_V - \hbar\omega_U} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j - \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_j - \hbar\omega_U}\right\} \\
&+ \sum_j \frac{U_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega_V}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n - \hbar\omega_V + \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_n - \hbar\omega_V + \hbar\omega_U} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j + \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_j + \hbar\omega_U}\right\} \\
&+ \sum_j \frac{U_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega_V}\left\{\frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n - \hbar\omega_V - \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_n - \hbar\omega_V - \hbar\omega_U} - \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m - E_j - \hbar\omega_U)T\right] - 1}{E_m - E_j - \hbar\omega_U}\right\}
\end{aligned}
$$

最后的结果是

$$
\begin{aligned}
M_{n\to m} = \ &\frac{1}{2}\sum_j \frac{U_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_V - i\epsilon} + \frac{1}{2}\sum_j \frac{U_{mj}V_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega_V - i\epsilon} \\
&+ \frac{1}{2}\sum_j \frac{V_{mj}U_{jn}}{E_j - E_n + \hbar\omega_U - i\epsilon} + \frac{1}{2}\sum_j \frac{V_{mj}U_{jn}}{E_j - E_n - \hbar\omega_U - i\epsilon}
\end{aligned}
$$

7 第七章 跃迁元

7.1 7-1 跃迁元的定义

本小节没有习题

7.2 7-2 泛函导数

求泛函导数的过程，跟求普通导数一样，不同的地方是：把 d 换成了 δ，以及有可能要多次使用分部积分法，使得结果写成下面的形式

$$\int G[x(t)]\delta x(t)dt$$

那么 $G[x(t)]$ 便是所求泛函导数。

7.2.1 问题 7-1

如果 $S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t)dt$，证明，对于任何在 t_a 和 t_b 的区域中的 s，有

$$\frac{\delta S}{\delta x(s)} = -\frac{d}{ds}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) + \frac{\partial L}{\partial x} \tag{7-25}$$

其中偏导数取 $t = s$ 处的值。

参考答案：

直接变分就有

$$\begin{aligned}
\delta S[x(t)] =& \delta \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t)dt \\
=& \int_{t_a}^{t_b} \delta L(\dot{x}, x, t)dt \\
=& \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial L}{\partial x}\delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\delta x)'\right] dt \quad (\text{现在可以对第二项分部积分}) \\
=& \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right] \delta x dt + \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(\delta x)\right|_{t_a}^{t_b} \\
=& \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right] \delta x dt
\end{aligned}$$

最后是因为 $\delta(t_a) = \delta(t_b) = 0$。此时，我们就有

$$\frac{\delta S}{\delta x} = \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$$

或者写成式 $(7-25)$ 的形式。

7.2.2 问题 7-2

如果 $F[x] = x(t)$，证明：

$$\frac{\delta F}{\delta x(s)} = \delta(t-s) \tag{7-26}$$

参考答案：

$$\delta F = \delta x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t-s)\delta x(s) ds$$

所以 $\frac{\delta F}{\delta x(s)} = \delta(t-s)$。注意，这里使用了两个不同意义的 δ，实在是不得已而为之，请读者见谅。$\delta x(t)$ 中的 δ，是变分号，表示增量变化，而 $\delta(t-s)$ 中的 δ，表示的是狄拉克 δ 函数。

7.2.3 问题 7-3

证明

$$F[j(\boldsymbol{r},t)] = \exp\left[\frac{1}{2}\iiiint j(\boldsymbol{r}_1,t_1)j(\boldsymbol{r}_2,t_2)R(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1,t_2-t_1)d^3\boldsymbol{r}_2dt_2d^3\boldsymbol{r}_1dt_1\right]$$

的泛函导数由下式给出：

$$\frac{\delta F}{\delta j(\boldsymbol{x},s)} = F\iint \frac{1}{2}j(\boldsymbol{r},t)[R(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x},t-s)+R(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r},s-t)]d^3\boldsymbol{r}dt \qquad (7-27)$$

注意：函数 $j(\boldsymbol{r},t)$ 是四个变量 (r_x,r_y,r_z,t) 的函数。这样，像式 $(7-14)$ 中所使用的单个坐标 s 必须换成坐标组 (x,y,z,s)，才能明确规定泛函导数所要取值的点。

参考答案：

这里的 $\boldsymbol{r}$ 与 t 地位完全是一样的，因此，没有必要区分开来，我们可以设 $\boldsymbol{\xi}=(\boldsymbol{r},t)$，把泛函写为

$$F[j(\boldsymbol{\xi})] = \exp\left[\frac{1}{2}\iint j(\boldsymbol{\xi}_1)j(\boldsymbol{\xi}_2)R(\boldsymbol{\xi}_2-\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_2d^4\boldsymbol{\xi}_1\right]$$

而式 $(7-27)$ 写为

$$\frac{\delta F}{\delta j(\boldsymbol{\xi}')} = F\int\frac{1}{2}j(\boldsymbol{\xi})[R(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\xi}')+R(\boldsymbol{\xi}'-\boldsymbol{\xi})]d^4\boldsymbol{\xi} \qquad (7-27)$$

这样既能够简化记号，又体现了对称性，何乐而不为呢？

现在求泛函导数，即

$$\begin{aligned}
\delta F[j(\boldsymbol{\xi})] =&\delta\exp\left[\frac{1}{2}\iint j(\boldsymbol{\xi}_1)j(\boldsymbol{\xi}_2)R(\boldsymbol{\xi}_2-\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_2d^4\boldsymbol{\xi}_1\right]\\
=&F\times\frac{1}{2}\delta\iint j(\boldsymbol{\xi}_1)j(\boldsymbol{\xi}_2)R(\boldsymbol{\xi}_2-\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_2d^4\boldsymbol{\xi}_1\\
=&\frac{1}{2}F\times\left[\iint\delta j(\boldsymbol{\xi}_1)j(\boldsymbol{\xi}_2)R(\boldsymbol{\xi}_2-\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_2d^4\boldsymbol{\xi}_1+\iint j(\boldsymbol{\xi}_1)\delta j(\boldsymbol{\xi}_2)R(\boldsymbol{\xi}_2-\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_2d^4\boldsymbol{\xi}_1\right]\\
=&\frac{1}{2}F\times\left[\iint\delta j(\boldsymbol{\xi}_1)j(\boldsymbol{\xi}_2)R(\boldsymbol{\xi}_2-\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_2d^4\boldsymbol{\xi}_1+\iint j(\boldsymbol{\xi}_2)\delta j(\boldsymbol{\xi}_1)R(\boldsymbol{\xi}_1-\boldsymbol{\xi}_2)d^4\boldsymbol{\xi}_1d^4\boldsymbol{\xi}_2\right]\\
=&\frac{1}{2}F\times\int\left[\int j(\boldsymbol{\xi}_2)R(\boldsymbol{\xi}_2-\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_2+\int j(\boldsymbol{\xi}_2)R(\boldsymbol{\xi}_1-\boldsymbol{\xi}_2)d^4\boldsymbol{\xi}_2\right]\delta j(\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_1
\end{aligned}$$

去掉 $\delta j(\boldsymbol{\xi}_1)d^4\boldsymbol{\xi}_1$ 部分的一重积分，然后将 $\boldsymbol{\xi}_2$ 换为 $\boldsymbol{x}$，将 $\boldsymbol{\xi}_1$ 换为 $\boldsymbol{\xi}$'，就得到

$$\frac{\delta F}{\delta j(\boldsymbol{\xi}')} = \frac{1}{2}F\int j(\boldsymbol{\xi})[R(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\xi}')+R(\boldsymbol{\xi}'-\boldsymbol{\xi})]d^4\boldsymbol{\xi}$$

然后将 $\boldsymbol{\xi}$ 换回 $(\boldsymbol{t},t)$，将 $\boldsymbol{\xi}'$ 换回 $(\boldsymbol{x},s)$，积分 $d^4\boldsymbol{\xi}_1$ 换回 $d^3\boldsymbol{r}dt$，就得到所求的式 $(7-27)$。

7.2.4 问题 7-4

讨论为什么积出的部分消失了。

参考答案：

积分 $\mathscr{D}x(t)$ 实际上是无穷维积分，那么，式 $(7-32)$ 的左边是下式的极限

$$\int \cdots \int \frac{\partial F(x_0, x_1, \ldots, x_{N-1}, x_N)}{\partial x_k} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(x_0, x_1, \ldots, x_{N-1}, x_N)\right] dx_1 \ldots dx_{N-1}$$

要注意积分元只是 $N-1$ 个，因为 $x_0 = x_a, x_N = x_b$ 是固定的边界点。这样，我们可以把对 x_k 的积分使用分部积分，得到

$$\int \cdots \int F \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) dx_1 \ldots dx_{k-1} dx_{k+1} \ldots dx_{N-1}\Bigg|_{x_k=-\infty}^{x_k=+\infty} - \frac{i}{\hbar} \int \cdots \int F \frac{\partial S}{\partial x_k} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) dx_1 \ldots dx_{N-1}$$

其中，第一项中我们已经将 x_k 单独积分出来了，它等于零，或者说，等价于零。这是因为 $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$ 是关于 x_k 的虚指数函数，当它单独取极限时，等价于 0（即 $\lim_{x\to\infty} f(x)\exp(ix^2)$ 等于 0，类似 $\lim_{x\to\infty} f(x)\exp(-x^2) = 0$，只要 $f(x)$ 的增长速度低于 $\exp(-x^2)$。）。

7.2.5 问题 7-5

有人争论说：因为式 $(7-33)$ 只适用于直角坐标，式 $(7-34)$ 可能引起误解。要求论证这一问题，例如研究应用求坐标的相应关系所得的结果，即找出 $\langle \partial F/\partial r_k \rangle_S$。

参考答案：

事实上，式 $(7-33)$ 确实只适用于直角坐标，为了找出 $\langle \partial F/\partial r_k \rangle_S$，可以遵循以下思路：

$$\begin{aligned}
&\left\langle \frac{\partial F}{\partial r_k} \right\rangle_S \\
=&\iiint \frac{\partial F}{\partial r_k} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \mathscr{D}x(t)\mathscr{D}y(t)\mathscr{D}z(t) \\
=&\iiint \left(\frac{\partial x_k}{\partial r_k}\frac{\partial F}{\partial x_k} + \frac{\partial y_k}{\partial r_k}\frac{\partial F}{\partial y_k} + \frac{\partial z_k}{\partial r_k}\frac{\partial F}{\partial z_k}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \mathscr{D}x(t)\mathscr{D}y(t)\mathscr{D}z(t) \\
=&-\frac{i}{\hbar} \iiint \left(\frac{\partial x_k}{\partial r_k}\frac{\partial S}{\partial x_k} + \frac{\partial y_k}{\partial r_k}\frac{\partial S}{\partial y_k} + \frac{\partial z_k}{\partial r_k}\frac{\partial S}{\partial z_k}\right) F \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \mathscr{D}x(t)\mathscr{D}y(t)\mathscr{D}z(t) \\
&- \iiint \left(\frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial x_k}{\partial r_k} + \frac{\partial}{\partial y_k}\frac{\partial y_k}{\partial r_k} + \frac{\partial}{\partial z_k}\frac{\partial z_k}{\partial r_k}\right) F \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \mathscr{D}x(t)\mathscr{D}y(t)\mathscr{D}z(t) \\
=&-\frac{i}{\hbar} \iiint \frac{\partial S}{\partial r_k} F \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \mathscr{D}x(t)\mathscr{D}y(t)\mathscr{D}z(t) \\
&- \iiint \left(\frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial x_k}{\partial r_k} + \frac{\partial}{\partial y_k}\frac{\partial y_k}{\partial r_k} + \frac{\partial}{\partial z_k}\frac{\partial z_k}{\partial r_k}\right) F \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \mathscr{D}x(t)\mathscr{D}y(t)\mathscr{D}z(t)
\end{aligned}$$

其中，第一项正好是

$$-\frac{i}{\hbar}\left\langle F \frac{\partial S}{\partial r_k} \right\rangle_S$$

但是第二项并非恒等于零，因此关系式 $(7-33)$ 或者 $(7-34)$ 只适用于直角坐标系；要用到其他坐标系中，需要引入修正项（即上式中的第二项）。

7.3 7-3 某些特殊泛函的跃迁元

7.3.1 问题 7-6

对在三维空间 (x, y, z) 中运动的粒子，证明

$$\langle (x_{k+1}-x_k)^2\rangle = \langle (y_{k+1}-y_k)^2\rangle = \langle (z_{k+1}-z_k)^2\rangle = -\frac{\hbar\epsilon}{im}\langle 1\rangle \tag{7-50}$$

$$\langle (x_{k+1}-x_k)(y_{k+1}-y_k)\rangle = \langle (x_{k+1}-x_k)(z_{k+1}-z_k)\rangle = \langle (y_{k+1}-y_k)(z_{k+1}-z_k)\rangle = 0 \tag{7-51}$$

参考答案：

式 $(7-35)$ 到式 $(7-49)$ 的结果，基本上都可以平行地过渡到三维空间，而式 $(7-40)$ 在三维空间中的形式也是一样的 (需要求 y_k, z_k 分量的，把 x_k 换成 y_k, z_k 即可)，因此，在三维空间中，依然成立式 $(7-49)$：

$$\left\langle \left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}\right)^2 \right\rangle = -\frac{\hbar}{im\epsilon}\langle 1\rangle$$

其实两个分量也一样

$$\left\langle \left(\frac{y_{k+1}-y_k}{\epsilon}\right)^2 \right\rangle = -\frac{\hbar}{im\epsilon}\langle 1\rangle = \left\langle \left(\frac{z_{k+1}-z_k}{\epsilon}\right)^2 \right\rangle$$

两端都乘以 ϵ^2，就得到式 $(7-50)$。

至于式 $(7-51)$，只需要在式 $(7-40)$ 或式 $(7-43)$ 中，取 $F = y_k$，则得到

$$\left\langle y_k \left[m\left(\frac{x_{k+1}-2x_k+x_{k-1}}{\epsilon^2}\right) + V'(x_k)\right]\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}\right)^2 \right\rangle = 0$$

两边乘以 ϵ^2，并取 $\epsilon \to 0$ 的极限，得到

$$0 = \langle y_k (x_{k+1}-2x_k+x_{k-1})\rangle = \langle y_k (x_{k+1}-x_k) - y_k (x_k - x_{k-1})\rangle$$

如对式 $(7-47)$ 的分析一样，在 $\epsilon \to 0$ 的极限时，$y_k (x_k - x_{k-1})$ 与 $y_{k+1} (x_{k+1}-x_k)$ 是相等的，那么可以用 $y_{k+1} (x_{k+1}-x_k)$ 替换掉上式的 $y_k (x_k - x_{k-1})$，得到

$$0 = \langle (y_k - y_{k+1}) (x_{k+1}-x_k)\rangle$$

此即等价于式 $(7-51)$ 的第一式，余下两式类似，证略。

7.3.2 问题 7-7

证明，对于任何二次型的作用量，有

$$\langle x(t)\rangle = \bar{x}(t)\langle 1\rangle \tag{7-57}$$

参考答案：

二次型的作用量意味着对应的经典运动方程是线性的，也就是说，对应的式 $(7-42)$，变为

$$\langle \mathscr{L} x(t)\rangle = 0$$

这里的 $\mathscr{L}$ 是一个线性算子，由对 t 求导、乘上一个常数或者加上一个常数等线性操作组成。由于算子所涉及到的变量跟路径积分部分的变量无关，因此，求平均与线性算子可以交换位置，即

$$\mathscr{L}\langle x(t)\rangle = 0$$

这只不过是关于 $\langle x(t)\rangle$ 的线性微分方程，跟经典运动方程是一样的，并且边界条件也一致：

$$\langle x(t_a)\rangle = x_a\langle 1\rangle,\quad \langle x(t_b)\rangle = x_b\langle 1\rangle$$

这只不过就是说，关于 $\langle x(t)\rangle$ 的一切内容，跟经典运动方程一致，只不过以 $\langle 1\rangle$ 为单位而已，所以结果显然是

$$\langle x(t)\rangle = \bar{x}(t)\langle 1\rangle$$

这里 $\bar{x}(t)$ 是经典运动方程。

7.3.3 问题 7-8

当势不是常数而是对应于受迫谐振子时，找到 $\langle x(t)x(s)\rangle = g(t,s)$ 的跃迁元。通过找到 $g(t,s)$ 的微分方程，并尝试下面的解来找此跃迁元：

$$\langle x(t)x(s)\rangle = g(t,s) = [\bar{x}(t)\bar{x}(s) + G(t,s)]\langle 1\rangle \tag{7-65}$$

寻找一个表明 G 与端点 x_a 和 x_b 无关，也与力函数 [势的梯度 $\gamma(t)$] 无关的 $G(t,s)$ 的方程。普遍地证明（$T = t_b - t_a$），

$$G(t,s) = \begin{cases} \dfrac{\hbar}{im}\dfrac{\sin\omega t\sin\omega(T-s)}{\omega\sin\omega T} & 当t<s \\ \dfrac{\hbar}{im}\dfrac{\sin\omega s\sin\omega(T-t)}{\omega\sin\omega T} & 当t>s \end{cases} \tag{7-66}$$

参考答案：

式 $(7-59)$ 已经给出了一般结果，我们再次写出

$$\langle\ddot{x}(t)x(s)\rangle + \frac{1}{m}\langle V'(x(t))x(s)\rangle = \frac{\hbar}{im}\delta(t-s)\langle 1\rangle \tag{7-59}$$

对于受迫谐振子

$$V(x) = \frac{1}{2}\omega^2x^2(t) + f(t)x(t)$$

也就是

$$V'(x) = \omega^2x(t) + f(t)$$

那么（由于是路径积分，$f(t)$ 与路径无关，所以相当于常数，可以提取出来）

$$\langle\ddot{x}(t)x(s)\rangle + \omega^2\langle x(t)x(s)\rangle + \frac{f(t)}{m}\langle x(s)\rangle = \frac{\hbar}{im}\delta(t-s)\langle 1\rangle$$

在求解之前，我们可以设

$$\langle x(t)x(s)\rangle = G(t,s) + \bar{x}(t)\bar{x}(s)\langle 1\rangle$$

其中 $\bar{x}(t)$ 是对应的经典运动方程。根据问题 7-7，我们已经知道 $\bar{x}(t)\bar{x}(s)\langle 1\rangle = \bar{x}(t)\langle x(s)\rangle$，而对于经典路径有 $\ddot{\bar{x}}(t) + \omega^2\bar{x}(t) + f(t)/m = 0$，也就是说，$\bar{x}(t)\bar{x}(s)\langle 1\rangle$ 满足

$$\ddot{\bar{x}}(t)\bar{x}(s)\langle 1\rangle + \omega^2\bar{x}(t)\bar{x}(s)\langle 1\rangle + \frac{f(t)}{m}\langle x(s)\rangle = 0$$

那么根据解的合成法则，$G(t,s)$ 只需要满足

$$\left\langle \frac{\partial^2 G(t,s)}{\partial t^2} \right\rangle + \omega^2 \langle G(t,s) \rangle = \frac{\hbar}{im}\delta(t-s)\langle 1 \rangle$$

这变成了求对应的齐次方程的格林函数问题了，它与绝对时间无关，只和相对时间 $T=t_b-t_a$ 有关，因此简单起见可以设 $t_a=0,t_b=T$，边界条件为 $G(0,s)=G(T,s)=0$。同样地，我们分两种情况求解，对于 $t>s$，我们有

$$\left\langle \frac{\partial^2 G(t,s)}{\partial t^2} \right\rangle + \omega^2 \langle G(t,s) \rangle = 0$$

解得

$$G(t,s)=a(s)\sin\omega t+b(s)\sin\omega(t-T)$$

留意边界条件 $G(T,s)=0$，得 $a(s)=0$，所以

$$G(t,s)=b(s)\sin\omega(t-T)$$

对于 $t<s$，也有

$$\left\langle \frac{\partial^2 G(t,s)}{\partial t^2} \right\rangle + \omega^2 \langle G(t,s) \rangle = 0$$

解得

$$G(t,s)=A(s)\sin\omega t+B(s)\sin\omega(t-T)$$

留意边界条件 $G(0,s)=0$，得 $B(s)=0$，所以

$$G(t,s)=A(s)\sin\omega t$$

注意 s,t 必然是对称的，因此，对于 $s<t$ (在第二解中，把 t,s 互换)，必然也有

$$G(t,s)=A(t)\sin\omega s$$

所以 $b(s)\sin\omega(t-T)\equiv A(t)\sin\omega s$，令 $s\to 0$，得到 $A(t)=C\sin\omega(t-T)$，其中 $C=\lim\limits_{s\to 0}b(s)/\sin\omega s$ ；令 $t\to T$，得 $b(s)=D\sin\omega s$，其中 $D=\lim\limits_{t\to T}A(t)/\sin\omega(t-T)$。现在有

$$\begin{cases} G(t,s)=D\sin\omega(t-T)\sin\omega s, & (t>s) \\ G(t,s)=C\sin\omega(s-T)\sin\omega t, & (t<s) \end{cases}$$

现在只差两个常数了，$G(t,s)$ 关于 t 显然是连续的 (在稍微不同时刻做的统计，结果应该是近似的)，因此两个 $G(t,s)$ 在 $t=s$ 时应该相等，这给出 $C=D$，所以最后只剩下一个常数。我们还没有用到 $\delta(t-s)$，由于

$$\left\langle \frac{\partial^2 G(t,s)}{\partial t^2} \right\rangle + \omega^2 \langle G(t,s) \rangle = \frac{\hbar}{im}\delta(t-s)\langle 1 \rangle$$

而 $G(t,s)$ 关于 t 显然是连续的 (在稍微不同时刻做的统计，结果应该是近似的)，所以，$\delta(t-s)$ 这一项只能来源于二阶导数项，这就意味着 $G(t,s)$ 的一阶导数在 $t=s$ 时发生了跳跃，幅度为 $\hbar\langle 1\rangle/im$[11]，

[11]这是根据

$$\frac{d}{dx}\theta(x)=\delta(x)$$

其中

$$\theta(x)=\begin{cases} 1, & x\geq 0 \\ 0, & x<0 \end{cases}$$

即

$$\frac{\partial}{\partial t}G_{t>s}(t,s)\bigg|_{t=s} - \frac{\partial}{\partial t}G_{t<s}(t,s)\bigg|_{t=s} = \frac{\hbar}{im}$$

这时

$$C\omega\cos\omega(s-T)\sin\omega s - C\omega\sin\omega(s-T)\cos\omega s = \frac{\hbar}{im}\langle 1\rangle$$

这正好是

$$C\omega\sin\omega T = \frac{\hbar}{im}\langle 1\rangle \quad \Rightarrow \quad C = \frac{\hbar}{im}\frac{1}{\omega\sin\omega T}\langle 1\rangle$$

代入即得式 $(7-66)$。

7.4 7-4 二次型作用量的一般结果

7.4.1 问题 7-9

应用上述结果证明，若谐振子作用量为

$$S = \frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}[\dot{x}^2 - \omega^2 x^2]dt$$

则

$$\begin{aligned}\left\langle \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} f(t)x(t)dt\right]\right\rangle = \langle 1\rangle \exp\bigg\{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T} \\ \times \qquad \bigg[\frac{2x_b}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b} f(t)\sin\omega(t-t_a)dt + \frac{2x_a}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b} f(t)\sin\omega(t_b-t)dt \\ -\frac{2}{m^2\omega^2}\int_{t_a}^{t_b}\int_{t_a}^{t} f(t)f(s)\sin\omega(t_b-t)\sin\omega(s-t_a)dsdt\bigg]\bigg\}\end{aligned}$$

其中 x_a, x_b 为振子的始态、终态坐标，$T = t_b - t_a$。

参考答案：

本题并没有什么难度，只是常规的代入而已。式 $(7-68)$ 已经告诉了我们答案，然后把问题3-11中的式 $(3-66)$ 代入，就可以得到答案。

7.4.2 问题 7-10

证明：对于任何二次型泛函，若我们写下

$$\langle x(t)\rangle = \bar{x}(t)\langle 1\rangle \quad 和 \quad \langle x(t)x(s)\rangle = \left[\bar{x}(t)\bar{x}(s) + \frac{\hbar}{i}G(t,s)\right]\langle 1\rangle$$

则

$$\langle x(t)x(s)x(u)\rangle = \left[\bar{x}(t)\bar{x}(s)\bar{x}(u) + \frac{\hbar}{i}\bar{x}(t)G(s,u) + \frac{\hbar}{i}\bar{x}(s)G(t,u) + \frac{\hbar}{i}\bar{x}(u)G(t,s)\right]\langle 1\rangle$$

找出四个 x 乘积的跃迁元。[**提示：**因为 $S'_{cl} - S_{cl}$ 是 f 的二次型泛函，并且当 $f=0$ 时它等于 0，所以它的数学形式必然为

$$S'_{cl} - S_{cl} = \frac{1}{2}\iint f(t)f(s)G(t,s)dtds + \int \bar{x}(t)f(t)dt$$

其中 G 和 $\bar{x}$ 是某种函数。]

参考答案：

从求解问题3-11 的过程中，我们应该可以领悟到，对于任意的二次型问题，所求的作用量必然是

$$S'_{cl}=S_{cl}+\frac{1}{2}\iint f(t)f(s)G(t,s)dtds+\int \bar{x}(t)f(t)dt$$

其中，S_{cl} 是在没有外力的情况下的作用量（即对应的齐次方程），$\bar{x}(t)$ 是在没有外力的情况下的经典路径，而 $G(t,s)$ 就是对应的齐次方程的格林函数。

这样我们就知道，$S'_{cl}-S_{cl}$ 最多与 f 的二次项有关，也就意味着，对 $S'_{cl}-S_{cl}$ 的三阶或三阶以上的变分为 0。这样

$$\begin{aligned}\langle x(t)x(s)x(u)\rangle=&\langle 1\rangle\left(\frac{\hbar}{i}\right)^3\frac{\delta^3}{\delta f(t)\delta f(s)\delta f(u)}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S'_{cl}-S_{cl})\right]\\=&\langle 1\rangle\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\delta}{\delta f(u)}\left\{\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\delta^2 S'_{cl}}{\delta f(t)\delta f(s)}+\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(t)}\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(s)}\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S'_{cl}-S_{cl})\right]\right\}\\=&\langle 1\rangle\left[\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\frac{\delta^3 S'_{cl}}{\delta f(t)\delta f(s)\delta f(u)}+\frac{\hbar}{i}\frac{\delta^2 S'_{cl}}{\delta f(t)\delta f(s)}\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(u)}+\frac{\hbar}{i}\frac{\delta^2 S'_{cl}}{\delta f(s)\delta f(u)}\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(t)}\right.\\&\left.+\frac{\hbar}{i}\frac{\delta^2 S'_{cl}}{\delta f(u)\delta f(t)}\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(s)}+\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(t)}\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(s)}\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(u)}\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S'_{cl}-S_{cl})\right]\end{aligned}$$

然后取 $f=0$，这相当于先把指数部分去掉，然后把 $\frac{\delta S'_{cl}}{\delta f(t)}$ 换为 $\bar{x}(t)$，再把 $\frac{\delta^2 S'_{cl}}{\delta f(t)\delta f(s)}$ 换为 $G(t,s)$，而三阶以上的导数则为 0，结果为

$$\langle x(t)x(s)x(u)\rangle=\left[\bar{x}(t)\bar{x}(s)\bar{x}(u)+\frac{\hbar}{i}\bar{x}(t)G(s,u)+\frac{\hbar}{i}\bar{x}(s)G(t,u)+\frac{\hbar}{i}\bar{x}(u)G(t,s)\right]\langle 1\rangle$$

对于 $\langle x(t)x(s)x(u)x(v)\rangle$，结果是

$$\begin{aligned}&\left[\bar{x}(t)\bar{x}(s)\bar{x}(u)\bar{x}(v)+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2G(t,s)G(u,v)+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2G(s,u)G(t,v)+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2G(u,t)G(s,v)\right.\\&\quad+\frac{\hbar}{i}G(t,s)\bar{x}(u)\bar{x}(v)+\frac{\hbar}{i}G(t,u)\bar{x}(s)\bar{x}(v)+\frac{\hbar}{i}G(t,v)\bar{x}(s)\bar{x}(u)\\&\quad\left.+\frac{\hbar}{i}G(s,u)\bar{x}(t)\bar{x}(v)+\frac{\hbar}{i}G(s,v)\bar{x}(t)\bar{x}(u)+\frac{\hbar}{i}G(u,v)\bar{x}(t)\bar{x}(s)\right]\langle 1\rangle\end{aligned}$$

其实就是用若干个 $\frac{\hbar}{i}G(t,s),\bar{x}(t)$ 组合起来，t,s,u,v 各出现一次，把每种情况都只列举一次，然后加起来。（注意，两个 G 的组合只有三种，因为 $G(t,s)=G(s,t)$）由此规则不难写出五个 x 乘积的跃迁元，只不过更加长而已。

7.5 7-5 跃迁元与算符记号

7.5.1 问题 7-11

若

$$\begin{aligned}\chi(p)&=\int_{-\infty}^{+\infty}\chi(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)dx\\\psi(p)&=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)dx\end{aligned}\qquad(7-80)$$

证明：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*(p)p\psi(p)\frac{dp}{2\pi\hbar} \tag{7-81}$$

参考答案：

式 $(7-80)$ 实际上就是一个傅里叶变换的过程，逆变换为

$$\chi(x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi(p)\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)dp$$
$$\psi(x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(q)\exp\left(\frac{i}{\hbar}qx\right)dq$$

所以

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}dx=&\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*(p)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)dp\int_{-\infty}^{+\infty}q\psi(q)\exp\left(\frac{i}{\hbar}qx\right)dp\\ =&\frac{1}{2\pi\hbar}\iint_{-\infty}^{+\infty}dpdq\chi^*(p)q\psi(q)\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{i}{\hbar}qx-\frac{i}{\hbar}px\right)\frac{dx}{2\pi\hbar}}_{\text{正好是一个}\delta(q-p)}\\ =&\frac{1}{2\pi\hbar}\iint_{-\infty}^{+\infty}dpdq\chi^*(p)q\psi(q)\delta(q-x)\\ =&\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dp\chi^*(p)p\psi(p)\end{aligned}$$

7.5.2 问题 7-12

若 g 只是位置的任意函数，证明：

$$\left\langle\chi\left|\frac{dg}{dt}\right|\psi\right\rangle=\left\langle\chi\left|\frac{g(x_{k+1})-g(x_k)}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\chi^*(gH-Hg)\psi dx \tag{7-89}$$

考虑 g 也是时间函数的情形，证明：dg/dt 的跃迁元等价于算符 $-(i/\hbar)(gH-Hg)+\partial g/\partial t$ 的跃迁元。

参考答案：

参考得到式 $(7-78)$ 的过程即可。显式写出来是

$$\begin{aligned}\left\langle\chi\left|\frac{dg}{dt}\right|\psi\right\rangle=&\left\langle\chi\left|\frac{g(x_{k+1})-g(x_k)}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle\\ =&\frac{1}{\epsilon}\left[\langle\chi\left|g(x_{k+1})\right|\psi\rangle-\langle\chi\left|g(x_k)\right|\psi\rangle\right]\\ =&\frac{1}{\epsilon}\left[\int\chi^*(x_{k+1},t_{k+1})g(x_{k+1})\psi^*(x_{k+1},t_{k+1})dx_{k+1}-\int\chi^*(x_k,t_k)g(x_k)\psi^*(x_k,t_k)dx_k\right]\\ =&\frac{1}{\epsilon}\left[\int\chi^*(x,t_{k+1})g(x)\psi^*(x,t_{k+1})dx-\int\chi^*(x,t_k)g(x)\psi^*(x,t_k)dx\right]\end{aligned}$$

最后一步是因为，积分变量 x_{k+1},x_k 只不过是一个记号罢了，全部统一换为 x 更简单。

然后，代入 $t=t_k,t_{k+1}=t_k+\epsilon=t+\epsilon$，然后使用式 $(7-75)$ 和式 $(7-76)$ 的近似，得到

$$\left\langle\chi\left|\frac{dg}{dt}\right|\psi\right\rangle=-\frac{i}{\hbar}\left[\int\chi^*(x,t)g(x)[H\psi^*(x,t)]dx-\int[H\chi(x,t)]^*g(x)\psi^*(x,t)dx\right]$$

由于 H 是厄米算符，因此满足式 $(4-30)$，这就意味着

$$\int [H\chi(x,t)]^* g(x)\psi^*(x,t)dx = \int \chi(x,t)^* H[g(x)\psi^*(x,t)]dx$$

代入前一式，结果就是

$$\left\langle \chi \left| \frac{dg}{dt} \right| \psi \right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(gH - Hg)\psi dx \tag{7-89}$$

如果 g 与时间有关，那么

$$\begin{aligned}\left\langle \chi \left| \frac{dg}{dt} \right| \psi \right\rangle = &\left\langle \chi \left| \frac{g(x_{k+1},t_{k+1}) - g(x_k,t_k)}{\epsilon} \right| \psi \right\rangle \\ =&\frac{1}{\epsilon}\left[\langle \chi \left| g(x_{k+1},t_k+\epsilon)\right| \psi\rangle - \langle \chi \left| g(x_k,t_k)\right| \psi\rangle\right] \\ =&\frac{1}{\epsilon}\left[\langle \chi \left| g(x_{k+1},t_k)\right| \psi\rangle + \epsilon\left\langle \chi \left| \frac{\partial g}{\partial t_k} \right| \psi \right\rangle - \langle \chi \left| g(x_k,t_k)\right| \psi\rangle\right]\end{aligned}$$

因此，相比与 t 无关的情况，多出了一个 $\partial g/\partial t$ 项。

7.5.3 问题 7-13

证明：

$$\langle \chi \left| m\ddot{x} \right| \psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(pH - Hp)\psi dx \tag{7-90}$$

对于由算符或其他方式给出的任何量 A，论证 dA/dt 等价于 $-(i/\hbar)(AH - HA) + \partial A/\partial t$

参考答案：

由于 $m\ddot{x} = d(m\dot{x})/dt = \dot{p}$，因此，将 $g = p$ 代入问题 7-12 的结果即可。后半问的过程跟问题 7-12 类似，只不过把 g 换为 A，即便 A 是算符结果也是一样的。(事实上，在问题 7-12 中，我们并没有指出 g 是函数还是算符，也就是说，问题 7-12 的过程本来就是对算符也成立的，记号也可以完全一样。)

7.5.4 问题 7-14

证明：$(m/\epsilon)(x_{k+1} - x_k)f(x_{k+1})$ 的跃迁概率幅等价于 $(f\cdot p)$ 的跃迁概率幅。

参考答案：

令 $F = (m/\epsilon)(x_{k+1} - x_k)f(x_{k+1})$，那么

$$\begin{aligned}\langle\chi|F|\psi\rangle =&\frac{m}{\epsilon}\int \chi^*(x_{k+1},t)f(x_{k+1})x_{k+1}\psi(x_{k+1},t)dx_{k+1} \\ &-\frac{m}{\epsilon}\iint \chi^*(x_{k+1},t)f(x_{k+1})K(x_{k+1},t;x_k,t-\epsilon)x_k\psi(x_k,t-\epsilon)dx_k dx_{k+1}\end{aligned}$$

这里的 $t = t_{k+1}$。由薛定谔方程的推导过程得到

$$\int K(x_{k+1},t;x_k,t-\epsilon)g(x_k,t-\epsilon)dx_k = g(x_{k+1},t-\epsilon) - \frac{i\epsilon}{\hbar}Hg(x_{k+1},t-\epsilon)$$

然后根据式 $(7-75)$

$$\psi(x_k,t-\epsilon) = \psi(x_k,t) + \frac{i\epsilon}{\hbar}H\psi(x_k,t)$$

将这两个式子代入原始的式子，保留 ϵ 的一阶项，完成对 x_k 的积分，得到

$$\langle\chi|F|\psi\rangle = \frac{mi}{\hbar}\int \chi^*(x_{k+1},t)f(x_{k+1})\left(Hx_{k+1}-x_{k+1}H\right)\psi(x_k,t)dx_{k+1}$$

这也就意味着

$$\langle\chi|F|\psi\rangle = \langle\chi|f\cdot p|\psi\rangle$$

7.5.5　问题 7-15

证明：对于两个相继动量，上述规则适用，就是说

$$\begin{aligned}\left\langle\chi\left|m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}m\frac{x_k-x_{k-1}}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle &= \iint \chi^*(y,t)pp\psi(x,t)dxdy\\ &= -\hbar^2\iint \chi^*(y,t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)dxdy\end{aligned} \tag{7-97}$$

参考答案：

本题的难度在于它涉及到了 ϵ 的二阶项，换言之，要求精度较高，因此，近似式 $(7-75)$ 和 $(7-76)$ 都不再适用。

对于薛定谔方程

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\phi = H\phi$$

这里假设 H 与时间无关，那么它有一个形式解

$$\phi(x,t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}tH\right)\phi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^n t^nH^n\phi(x,0)$$

这个解是精确的。

对于所求的

$$m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}m\frac{x_k-x_{k-1}}{\epsilon} = \frac{m^2}{\epsilon^2}\left(x_{k+1}x_k - x_k^2 - x_{k+1}x_{k-1} + x_kx_{k-1}\right)$$

因此

$$\begin{aligned}\frac{\epsilon^2}{m^2}\left\langle\chi\left|m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}m\frac{x_k-x_{k-1}}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle &= \int\left(e^{-i\epsilon H/\hbar}\chi\right)^* xe^{-i\epsilon H/\hbar}\left(x\psi\right)dx - \int\chi^*x^2\psi dx\\ &-\int\left(e^{-i\epsilon H/\hbar}\chi\right)^* xe^{-2i\epsilon H/\hbar}\left(xe^{i\epsilon H/\hbar}\psi\right)dx + \int\chi^*xe^{-i\epsilon H/\hbar}\left(xe^{-i\epsilon H/\hbar}\psi\right)dx\end{aligned}$$

这是类比式 $(7-92)$ 给出的，只不过在式 $(7-92)$ 中，对时间的传播用对 K 的积分来描述，这里用 $e^{itH/\hbar}$ 来描述。里边省略了 $t=t_k$，它是以 t_k 为基准，往前传播就乘以 $e^{-i\epsilon H/\hbar}$，往后传播就乘以 $e^{i\epsilon H/\hbar}$。

注意到 H 是厄米算符（即满足式 $(4-30)$），容易证明 H^n 也是，类似地可以定义 $\cos(tH/\hbar)$ 和 $\sin(tH/\hbar)$，它们都是厄米算符，但是 $e^{-itH/\hbar} = \cos(tH/\hbar) - i\sin(tH/\hbar)$ 不是厄米算符，因为虚数单位

i 不是厄米的。据此，上式第一项积分可以改写成

$$
\begin{aligned}
&\int\left[\cos(\epsilon H/\hbar)\chi - i\sin(\epsilon H/\hbar)\chi\right]^{*} x e^{-i\epsilon H/\hbar}\,(x\psi)\,dx \\
=&\int\left\{\left[\cos(\epsilon H/\hbar)\chi\right]^{*} + i\left[\sin(\epsilon H/\hbar)\chi\right]^{*}\right\} x e^{-i\epsilon H/\hbar}\,(x\psi)\,dx \\
=&\int \chi^{*}\left[\cos(\epsilon H/\hbar) + i\sin(\epsilon H/\hbar)\right] x e^{-i\epsilon H/\hbar}\,(x\psi)\,dx \\
=&\int \chi^{*} e^{i\epsilon H/\hbar} x e^{-i\epsilon H/\hbar}\,(x\psi)\,dx
\end{aligned}
$$

其他几项类似：

$$
\begin{aligned}
&\frac{\epsilon^2}{m^2}\left\langle \chi\left| m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon} m\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle \\
=&\int \chi^{*}\left(e^{i\epsilon H/\hbar}xe^{-i\epsilon H/\hbar}x - x^2 - e^{i\epsilon H/\hbar}xe^{-2i\epsilon H/\hbar}xe^{i\epsilon H/\hbar} + xe^{-i\epsilon H/\hbar}xe^{i\epsilon H/\hbar}\right)\psi dx
\end{aligned}
$$

接下来展开到 ϵ 的二阶项即可，跟普通的泰勒展开式是一样的，但是要注意算子运算的不可交换性，因此在求导的时候，要保持顺序。这是一个冗长、需要细心的过程，最终，括号部分的展开式为：

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\epsilon^2[(H^2x^2 + xH^2x - 2HxHx) \\
&\quad - (H^2x^2 + 4xH^2x + x^2H^2 - 4HxHx - 4xHxH + 2Hx^2H) \\
&\quad + (xH^2x + x^2H^2 - 2xHxH)]
\end{aligned}
$$

它等于 $\epsilon^2(HxHx - xHxH - HxxH + xHxH) = \epsilon^2(Hx - xH)^2$ 代入就得到式 $(7-97)$。

对于 H 与时间 t 有关的情况，笔者愚钝，暂时没想出较好的办法。

7.5.6 问题 7-16

如果 $t_j = t, t_k = s$，则对于 $t_j > t_k$，证明：

$$
\left\langle \chi\left| x_j m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle = \iint \chi^{*}(x,t)xK(x,t;y,s)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\psi(y,s)dydx \qquad (7-798)
$$

若 $t_j < t_k$，则结果如何？

参考答案：

从上一问题中，我们可以清楚知道，求这些相继变量的跃迁元，只需要依次插入相应的 $e^{-itH/\hbar}$，由于这个解是精确的，我们不用担心精度问题。最后，取相应的近似表达式。例如，本题中：

$$
x_j m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon} = \frac{m}{\epsilon}(x_jx_{k+1} - x_jx_k)
$$

则

$$
\begin{aligned}
&\left\langle \chi\left| x_j m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle \\
=&\frac{m}{\epsilon}\int \chi^{*}(x,t)xe^{-i(t-s-\epsilon)H/\hbar}xe^{-i\epsilon H/\hbar}\psi(x,s)dx - \frac{m}{\epsilon}\int \chi^{*}(x,t)xe^{-i(t-s)H/\hbar}x\psi(x,s)dx \\
=&\frac{m}{\epsilon}\int \chi^{*}(x,t)xe^{-i(t-s)H/\hbar}\left(e^{i\epsilon H/\hbar}xe^{-i\epsilon H/\hbar} - x\right)\psi(x,s)dx
\end{aligned}
$$

对比式 $(7-95)$，发现 $\frac{m}{\epsilon}\left(e^{i\epsilon H/\hbar}xe^{-i\epsilon H/\hbar}-x\right)$ 正好是动量算符。于是

$$\left\langle\chi\left|x_j m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle=\int\chi^*(x,t)xe^{-i(t-s)H/\hbar}p\psi(x,s)dx$$

而 $e^{-i(t-s)H/\hbar}$ 可以写成乘以 K 再积分的形式：

$$\int\chi^*(x,t)xe^{-i(t-s)H/\hbar}p\psi(x,s)dx=\iint\chi^*(x,t)xK(x,t;y,s)p\psi(y,s)dydx$$

这就是所求的式子。

读者可能觉得有点不完美，因为已经说过 $e^{itH/\hbar}$ 这种形式的解只适用于不显含时间的 H。但事实上对于与时间有关的情况，我们也可以进行，只不过要把 $e^{-itH/\hbar}$ 部分可以换成乘以 K 再积分的形式。由于我们已经知道了 K 关于时间的一阶展开式，因此是可以完成展开的，但这里不再进行了。

7.5.7　问题 7-17

应用式 $(7-40)$ 以及 $F=(m/\epsilon)(x_{k+1}-x_k)$ 证明

$$\left\langle\chi\left|m^2\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{\epsilon^2}\right|\psi\right\rangle=\frac{m\hbar}{i\epsilon}\langle\chi\left|1\right|\psi\rangle+\left\langle\chi\left|m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}m\frac{x_k-x_{k-1}}{\epsilon}\right|\psi\right\rangle \tag{7-99}$$

参考答案：

将 $F=(m/\epsilon)(x_{k+1}-x_k)$ 代入式 $(7-40)$，得到

$$\begin{aligned}-\frac{m}{\epsilon}\langle 1\rangle=&-\frac{i\epsilon}{\hbar}\left\langle m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}\left[m\left(\frac{x_{k+1}-2x_k+x_{k-1}}{\epsilon^2}\right)+V'(x_k)\right]\right\rangle\\&-\frac{i}{\hbar}\left\langle m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}\left[m\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}-m\frac{x_k-x_{k-1}}{\epsilon}\right)+\epsilon V'(x_k)\right]\right\rangle\\&-\frac{i}{\hbar}\left\langle m^2\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{\epsilon^2}-m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}m\frac{x_k-x_{k-1}}{\epsilon}+m(x_{k+1}-x_k)V'(x_k)\right\rangle\end{aligned}$$

$m(x_{k+1}-x_k)V'(x_k)$ 是在两个相继时间内求值的，它是 ϵ 的量级，当 $\epsilon\to 0$ 时它为 0，因此

$$\begin{aligned}\frac{m}{\epsilon}\langle 1\rangle=&\frac{i}{\hbar}\left\langle m^2\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{\epsilon^2}-m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}m\frac{x_k-x_{k-1}}{\epsilon}\right\rangle\\=&\frac{i}{\hbar}\left\langle m^2\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{\epsilon^2}\right\rangle-\frac{i}{\hbar}\left\langle m\frac{x_{k+1}-x_k}{\epsilon}m\frac{x_k-x_{k-1}}{\epsilon}\right\rangle\end{aligned}$$

这就是所要证的式 $(7-99)$。

8 勘误

8.1 详细内容

8.1.1 75 页

式 $(5-5)$ 中 dy 改为 dx。

8.1.2 89 页

式 $(5-49)$ 中的 $G_{p_x}(x,x')$ 应当改为 $G_{p_x}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$，即加粗表示三维空间，而式 $(5-50)$ 改为

$$\langle p_x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(\boldsymbol{x})\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}f(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x} \tag{5-50}$$

以及式 $(5-51)$ 的 $G_x(x,x')$ 改为 $G_x(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$。

8.1.3 90 页

式 $(5-58)$ 下方的段落, "我们首先注意到，$\phi_n(x)$ 是只要系统在点 x，它就处于状态 n 的几率幅。" 应当改为"我们首先注意到，$\phi_n(x)$ 是只要系统处于状态 n，它就位于点 x 的几率幅。"(假设与结论交换)

8.1.4 91 页

问题 5-13 中, "χ 表象"改为"x 表象"。

8.1.5 94 页

第二段, "应用得出式 $(2-13)$ 的相同论述"，应改为"应用得出式 $(2-31)$ 的相同论述"。

8.1.6 96 页

式 $(6-16)$，双重积分号

$$\int_{t_a}^{t_b}\int_{ts'}^{t_b}$$

应改为

$$\int_{t_a}^{t_b}\int_{s'}^{t_b}$$

8.1.7 102 页

为了符号的前后一致，式 $(6-39)$ 应当改为

$$v(\check{\boldsymbol{p}}) = \int e^{i(\check{\boldsymbol{p}}/\hbar)\cdot\boldsymbol{x}}V(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x} \tag{6-39}$$

8.1.8　107 页

问题 6-9 中有一句“观察大角散射和观察小角散射，哪一种观察应当更细心一点？为什么？”。事实上，“小心”一词最好换成“细心”或“细致”，因为这里的意思是观察更认真仔细（more carefully 在中文的歧义），用“小心”有歧义，让人感觉好像会发生什么意外事故那样。

8.1.9　107 页

问题 6-10、6-11 均有修改，篇幅较大，请直接参考前面的习题解答。

8.1.10　108 页

问题 6-12，把式 $(6-58)$ 前面的系数 $\frac{1}{2}$ 去掉，把式 $(6-59)$ 所加的第二项的系数 $\frac{1}{2}$ 去掉。

8.1.11　112 页

问题 6-16，原翻译不当，正确的翻译大致如下：把式 $(6-71)$ 解释为对所有可能性求和，请阐明这些可能性的含义。

8.1.12　114 页

式 $(6-78)$，第二个等号右边，$e^{+(i/\hbar)(E_m-E_n)/T}$ 应该改为 $e^{+(i/\hbar)(E_m-E_n)T}$。

8.1.13　116 页

倒数第二行，“在我们的情况，$M_{n\to m}$ 是 V_{mn}”改为“在我们的情况，$M_{n\to m}$ 是 $-V_{mn}$”。

8.1.14　117 页

这一页全部的 V 都改回 1，这里是因为新英文版 [Emended Edition. (2005)] 修改错误所致，原著并没有错误。

8.1.15　119 页

公式 $(6-98)$，最后一部分的大写 T，不应该写成上标，改为普通的相乘，即 $(E_m-E_n)T$ 和 $(E_m-E_j)T$。

8.1.16　119 页

这一页中，部分段落翻译得不好，导致理解上变得困难，现修正如下：

1、式 $(6-98)$ 下面的一段，第一句“这个结果最后一个因子中两项的第一部分与时间的关系...”，改为“这个结果方括号中的因子的两项的第一部分与时间的关系...”；

2、式 $(6-99)$ 下面一段，基本上全部都修改一下：

若假设态处于连续区，则求和变成积分。式 $(6-99)$ 在如下情况是正确的：(1) 不能直接通过一阶跃迁从态 n 跃迁到态 m；(2) 不能通过一阶跃迁从态 n 跃迁到任一与态 n 具有相同能量的态。在这些情况下，对于 $E_j=E_n$ 的态，有 $V_{jn}=0$。于是式 $(6-98)$ 的方括号中的项绝不会很大，除非 E_n-E_j

接近于零；但如果 $E_n - E_j$ 接近于零，那么分子中的 V_{jn} 也是零。这时所有的效应都来自第一项，所以式 $(6-99)$ 是正确的。现在，对式 $(6-98)$ 中的 j 求和在 $E_j = E_m$ 的极点处也就没有歧义了，因为在 E_j 与 E_m 的值相等处，分子也为零。

8.1.17 120 页

式 $(6-100)$，V_{mn} 前要加一个负号，即 V_{mn} 改为 $-V_{mn}$。

8.1.18 121 页

式 $(6-109)$ 中的 V_{mn} 前要加一个负号，即 V_{mn} 改为 $-V_{mn}$。

8.1.19 122 页

式 $(6-111)$，分母 $E_n - E_j$ 要改为 $E_j - E_n$。

8.1.20 123 页

第二段，最后一句"而不是以前的函数 $\exp(-i/\hbar)E_m t$"，改为"而不是以前的函数 $\exp(-i/\hbar)E_n t$"

8.1.21 130 页

式 $(7-16)$，等号右边原来是

$$\frac{1}{2\hbar^2}\iint\cdots$$

应该为

$$\frac{1}{\hbar^2}\iint\cdots$$

8.1.22 133 页

式 $(7-30)$，$\langle\dots\rangle_s$ 应该改为 $\langle\dots\rangle_S$（小写 s 改为大写 S）

8.1.23 135 页

式 $(7-41)$ 改为

$$\frac{i}{\hbar}\left\langle\int[m\ddot{x}+V'(x)]\delta x(t)dt\right\rangle = 0$$

8.1.24 137 页

式 $(7-50)$，改为

$$\langle(x_{k+1}-x_k)^2\rangle = \langle(y_{k+1}-y_k)^2\rangle = \langle(z_{k+1}-z_k)^2\rangle = -\frac{\hbar\epsilon}{im}\langle 1\rangle$$

8.1.25 140 页

问题 7-8，式 $(7-65)$ 上方有一个笔误，"并尝试下面的解来找比跃迁元"，改为"并尝试下面的解来找此跃迁元"。

8.1.26 142 页

把问题 7-11 中，正文部分的 $G(t,s)$ 改为 $\frac{\hbar}{i}G(t,s)$，比如"对于任何二次型泛函，若我们写下

$$\langle x(t)\rangle = \bar{x}(t)\langle 1\rangle \quad 和 \quad \langle x(t)x(s)\rangle = \left[\bar{x}(t)\bar{x}(s) + \frac{\hbar}{i}G(t,s)\right]\langle 1\rangle$$

"，等等。但是方括号中的提示部分则不要改动。

8.1.27 143 页

7-5 跃迁元与算符记号这一节的第一段, "在这一节和下一节我们将看到，任何用传统的波函数"改为"在这一节和下一节我们将看到，如何用传统的波函数"

8.1.28 146 页

问题 7-12，最后一句，改为"... 等价于算符 $-(i/\hbar)(gH - Hg) + \partial g/\partial t$ 的跃迁元"

8.1.29 177 页

$(8-123)$ 式中的方括号中，c^2 前的"−"号，应该改为"+"号。随之，$(8-124)$ 等号右边要多加一个 $-$ 号。

8.1.30 189 页

问题 9-4 中，所有的小写 s 都该改为大写 S，而且 δ_q 应当改为 δx。