

第八章 Mathematica在 量子力学中的应用举例

§ 8.1 粒子在中心力场中的运动问题

设电子与原子核的约化质量为 $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$, $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$, 哈密

顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} + V(r).$$

其中 r 为粒子所处的空间位置到中心势原点的距离。

利用中心势的球对称性, **球坐标中的薛定格方程**写为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] \psi(r, \vartheta, \varphi) = (E - V(r)) \psi(r, \vartheta, \varphi).$$

角动量算符的定义为： $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ 。可以证明 $[\hat{L}, \hat{H}] = 0$ ，所以角动量 $\hat{L}$ 是守恒量，即**在中心力场中运动粒子的一个重要特征是角动量守恒**。由此可以得到 $\hat{L}^2$ （角动量的平方）也是守恒量。在求解中心力场作用下粒子的能量本征方程时， $(\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z)$ 构成对易算符的一个**完全集**。

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \right].$$

其中在**球坐标中的角动量平方算符**可以表示为：

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}.$$

薛定格方程则可以写为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} \right] \psi(r, \theta, \varphi) = (E - V) \psi(r, \theta, \varphi).$$

波函数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 与极角 θ ($-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$) 和方位角

φ ($0 \leq \varphi \leq \pi$) 的关联是由算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 决定的。假定满足薛

定格方程的本征波函数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 可以分离变量表示为

$$\psi(r, \theta, \varphi) \equiv R(r)Y(\theta, \varphi) \equiv R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi).$$

$\hat{L}_z$ 在球坐标系中可以表示为： $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ 。该算符的本

征值由求解本征方程

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) = L_z \Phi(\varphi),$$

来得到。上面方程的解为

$$\Phi(\varphi) = Ae^{iL_z \varphi / \hbar}.$$

由于上式所示波函数解必须唯一确定，因而它也必定满足条件： $\Phi(\varphi) = \Phi(2\pi + \varphi)$ ，并且角动量算符 $\hat{L}_z$ 的本征值应当是离散的，其本征值表示为： $L_z = m\hbar$ ， $(m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ 。由本征波函数的归一化条件，归一化的解可以写为

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

类似地，对另一个守恒量—角动量平方，我们有本征方程：

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} Y(\theta, \varphi) = L^2 Y(\theta, \varphi).$$

上面方程的解是球谐函数 $Y_{l,m}$ 。如果本征值满足

$L^2 = l(l+1)\hbar^2$ ，方程写为

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \right\} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = 0.$$

角动量算符 $\hat{L}^2$ 作用在球谐函数 $Y_{l,m}$ 上的本征值由角量子数 $l = 0, 1, 2, \dots$ 决定。对应于确定的角量子数 l ，算符 $\hat{L}^2$

本征值则为 $l(l+1)\hbar^2$ ，此时磁量子数 m 则描写该角动量在 z 轴上的投影，它的取值范围为：
 $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ 。这就是说：对确定的角动量量子数 l ，应当有 $2l+1$ 个本征函数 $Y_{l,m}$ 。对磁量子数 m 为正时的情况，球谐函数的完整表达式为

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

其中 $P_l^m(x)$ 为 l 阶的第 m 个伴随勒让德函数。如果磁量子数为负时 $(-|m|)$ ，其球谐函数满足如下关系式

$$Y_{l,-|m|}(\theta, \varphi) = (-1)^{|m|} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} Y_{l,|m|}^*(\theta, \varphi) .$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m} .$$

因而**球谐函数** $Y_{l,m}$ 既是角动量算符平方 $\hat{L}^2$ ，也是角动量算符的 z 分量 $\hat{L}_z$ 的本征函数。在 Mathematica 中球谐函数表示为 SphericalHarmonicY[]。**勒让德多项式**表示为 LegendreP[]。

本征波函数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 表示中的径向部分 $R(r)$ 应当满足的方程。

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{r} \right] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 . \quad (8.1.15)$$

Z 为原子核所带正电荷数。对于氢原子 $Z=1$ ，而类氢原子 ($He^+, Li^{++}, Be^{+++} \dots$ 等)， $Z \neq 1$ 。下面我们以氢原子为例进行分析。

定义波尔半径 $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \approx 5.29 \times 10^{-11} m$ 为长度单位，即 $\rho = r/a_0$ ；以氢原子

的电离能量 $E_0 = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{m_e e^4}{\hbar^4} \approx 13.5\text{eV}$ 为能量单位, 即 $\varepsilon = E/E_0$; 定

义径向函数 $R(\rho) = u(\rho)/\rho$ 。这时方程 (8.1.15) 写为

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left[\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad (8.1.16)$$

能量 ε 的值是由方程 (8.1.16) 的本征值和本征函数决定的。

考虑稳定状态 (束缚态), 即 $\varepsilon < 0$ 的状态。函数 $u(\rho)$ 可以表示为多项式或者指数形式。为了找出 $u(\rho)$ 的近似式, 通过考察它在 $r \rightarrow 0$ 和 $r \rightarrow \infty$ 时的极限行为,

**发现由波函数的么正性条件要求上述两种表达方
式下都可以推出**

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\gamma\rho} f_l(\rho). \quad (8.1.17)$$

**将(8.1.17)式代入(8.1.16)后, 求解得到超几何函数
(${}_1F_1$)形式的解。**

$$f_l(\rho) = c_1 F_1 \left(l+1 - \frac{Z}{\gamma}, 2l+2; 2\gamma\rho \right). \quad (8.1.18)$$

**其中 $\gamma \equiv \sqrt{-\varepsilon}$ 。由式(8.1.17)得到电子在库仑势中的波
函数的径向部分为**

$$R(\rho) = N_{n,l} \rho^l e^{-Z\rho/n} {}_1F_1 \left(l+1-n, 2l+2; \frac{2Z}{n} \rho \right). \quad (8.2.19)$$

由于归一化条件的要求, (8. 1. 18) 的级数表示必须只有有限项。这个限制就给出了能量的值

$$n_r = -\left(l+1-\frac{Z}{\gamma}\right), \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots). \quad (8. 1. 20)$$

由此我们得到

$$\gamma = \frac{Z}{n_r + l + 1}. \quad (8. 1. 21)$$

由 γ 和 ε 的定义, 则

$$E = -\frac{E_0 Z^2}{(n_r + l + 1)^2} = -\frac{E_0 Z^2}{n^2}. \quad (8. 1. 22)$$

其中 n 为主量子数 ($n = 1, 2, \dots$)。它是由径向量子数 n_r ($n_r = 0, 1, 2, \dots$) 和轨道角动量量子数 l ($l = 0, 1, 2, \dots$) 决定的。在这里我们引入一组称为“拉盖尔 (Laguerre) 多项式”的特殊正交多项式 $L_k^{(\gamma)}$, 拉盖尔多项式由级数定义为

$$L_k^{(\gamma)}(x) = \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{k+\gamma}{k-j} \frac{x^j}{j!}.$$

相应的归一化为

$$\int_0^\infty dx x^\gamma \exp(-x) L_k^{(\gamma)}(x) L_{k'}^{(\gamma)}(x) = \frac{\Gamma(\gamma + k + 1)}{k!} \delta_{kk'}.$$

超几何函数与拉盖尔多项式间有如下关系式

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(1 + \alpha)} {}_1F_1(-n, \alpha + 1; x).$$

这样电子在库仑势中的波函数的径向部分的解也可以写为

$$R(\rho) = N'_{n,l} \rho^l e^{-Z\rho/n} L_{n+l}^{(2l+1)}\left(\frac{2Z}{n}\rho\right). \quad (8.1.23)$$

相应的电子总波函数为

$$\psi_{n,l,m}(\rho, \theta, \varphi) = N_{n,l} \rho^l e^{-Z\rho/n} {}_1F_1\left(l+1-n, 2l+2; \frac{2Z}{n}\rho\right) Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (8.1.24)$$

在(8.1.19)和(8.1.24)式中的归一化常数为

$$N_{n,l} = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}} \left(\frac{2Z}{n}\right)^{l+3/2}. \quad (8.1.25)$$

在 Mathematica 系统中拉盖尔多项式表述为 `LaguerreL[]` ; 超几何函数 $({}_1F_1)$ 表述为 `Hypergeometric1F1[]`。

下面的程序包 `Coulombp.m` 提供了电子在类氢原子库仑势中的本征波函数, 以及该波函数在球坐标下的径向部分和角度关联部分的表示。本征波函数、径向波函数部分和角度关联波函数部分分别用 Mathematica 函数定义为 `WaveF[]`, `WaveR[]` 和 `WaveA[]`。它们的数学表示分别来自公式 (8.1.24-25), (8.1.19) 和 (8.1.12)。

它们用 Mathematica V3.0 语言的定义表述如下:

Mathematica Package file `Coulombp.m`

```
BeginPackage["CoulombPotential`"]
```

```
Clear[WaveF, WaveR, WaveA];
```

```
WaveF::usage = "WaveF[Z_, r_, theta_, phi_, n_, l_, m_] 计算电子在库仑势中本征波函数的表示。Z 为原子核的电荷数. r为电子到中心势原点的距离. theta 和 phi 为球坐标中的角度. n, l和 m为能量和角动量算符的量子数。"
```

WaveR::usage = "WaveR[Z_, r_, n_, l_] 计算电子在库仑势中的本征波函数径向部分的表示。Z 为原子核的电荷数。r 为电子到中心势原点的距离。n 和 l 为能量和角动量算符的量子数。"

WaveA::usage = "WaveA[theta_, phi_, l_, m_] 计算电子在库仑势中本征波函数的角度关联部分表示。theta 和 phi 为球坐标中的角度。l 和 m 表示角动量算符的量子数。"

(* --- 定义公共变量 --- *)

r::usage

n::usage

l::usage

m::usage

theta::usage

phi::usage

Begin["' Private' "]

(* --- 产生库仑势中波函数的径向部分 --- *)

WaveR[Z_, r_, n_, l_] :=

Module[{unit, tmp},

 (* --- 归一化常数 --- *)

 unit = (Sqrt[(n + 1)!/(2 n (n - 1 - 1)!)] ((2 Z)/n)^(1 + 3/2))
 /(2 l + 1)!;

 (* --- 产生波函数径向部分的定义 --- *)

tmp = unit r^l Exp[-((Z r)/n)] Hypergeometric1F1[1 + 1 - n, 2 l +
2, (2 Z r)/n]

]

```

(* --- 产生库仑势中本征波函数的角度相关部分 --- *)
WaveA[theta_, phi_, l_, m_] :=
  Module[{tmp},
    tmp = SphericalHarmonicY[l, m, theta, phi]
  ]
(* -- 产生电子在库仑势中的本征波函数 --- *)
WaveF[Z_, r_, theta_, phi_, n_, l_, m_] :=
  Module[{tmp},
    tmp = WaveR[Z, r, n, l] WaveA[theta, phi, l, m]
  ]
End[]
EndPackage[]

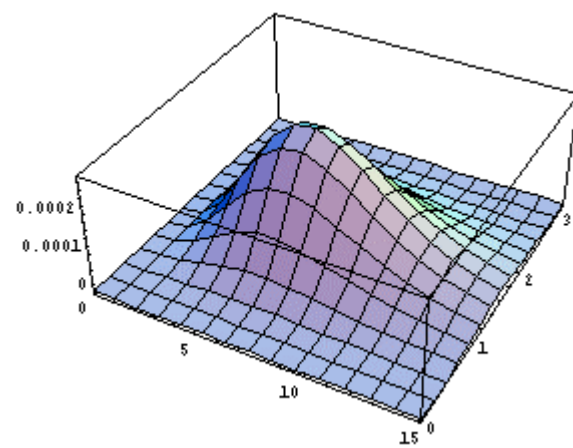
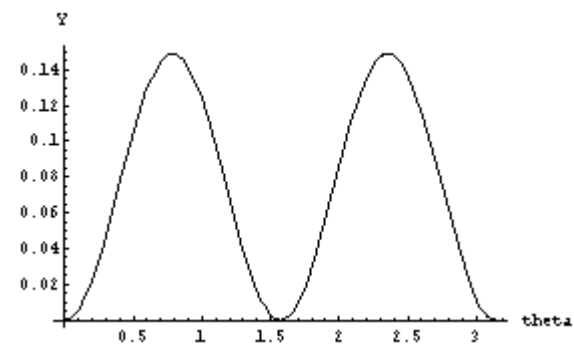
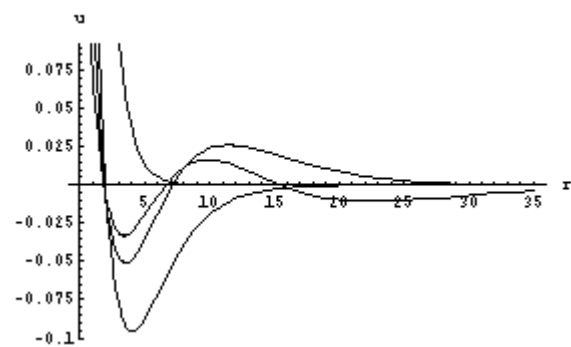
```

当我们需要对电子在原子核的库仑势中的本征波函数习性进行分析时，我们可以首先调入程序包Coulombp.m，然后调用程序包中定义的函数。例如通过运行下面的指令：

```

<< Coulombp.m
Plot[WaveR[1, r, 1, 0], WaveR[1, r, 2, 0], WaveR[1, r, 3, 0], WaveR[1, r, 4, 0],
  {r, 0, 35}, AxesLabel->"r", "u", Prolog->Thickness[0.001]]
Plot[Abs[WaveA[theta, Pi/2, 2, 1]]^2,
  {theta, 0, Pi}, AxesLabel->"theta", "Y", Prolog->Thickness[0.001]]
Plot3D[Abs[WaveF[1, r, theta, Pi/2, 3, 2, 2]]^2, {r, 0, 15}, {theta, 0, Pi}, Lighting-
  >True]

```



§ 8.2 求非相对论性薛定格方程本征能量限

1. 量纲分析

“自然”单位制

$$\hbar = c = 1$$

我们有如下量纲

$$\text{Dim}[\hbar] = \text{Dim}[c] = 1.$$

通过关系式

$$\text{Dim}[Et] = \text{Dim}[E]\text{Dim}[t] = \text{Dim}[\hbar] = 1,$$

我们可以知道，时间 t 的量纲与能量量纲互为倒数

$$\text{Dim}[t] = \frac{1}{\text{Dim}[E]} = \text{Dim}[E^{-1}].$$

根据爱因斯坦质能关系 (m 和 E_0 为静止的单粒子质量和能量)

$$E_0 = mc^2,$$

任何质量 m 的量纲与能量量纲相同

$$\text{Dim}[m] = \text{Dim}[E]$$

由于

$$\text{Dim}[p] = \text{Dim}[mc] = \text{Dim}[m] ,$$

任何动量 p 的量纲也与能量量纲一致。

$$\text{Dim}[p] = \text{Dim}[E] .$$

任何空间坐标 X 的量纲可由下式得出

$$\text{Dim}[px] = \text{Dim}[\hbar] = 1$$

则我们有坐标 X 的量纲

$$\text{Dim}[x] = \frac{1}{\text{Dim}[p]} = \text{Dim}[E^{-1}] .$$

根据以上分析，我们现在能够将任意物理量以能量单位表示出来。作为一个例子，我们可以求得薛定格波函数 Ψ 的量纲。在坐标空间表象中，薛定格波函数归一化可表示为

$$\int d^3x \Psi^*(x) \Psi(x) = 1 .$$

这说明在量纲上有

$$\text{Dim}[x^3 \Psi^2] = 1 ,$$

即有

$$\text{Dim}[\Psi^2] = \frac{1}{\text{Dim}[x^3]} ,$$

因此可得，

$$\text{Dim}[\Psi] = \text{Dim}[E^{3/2}] .$$

例：运用量纲分析的方法来推导 $1/\vec{p}^2$ 的傅利叶变换。

$$\int d^3 p \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}}{\vec{p}^2} .$$

积分中 $\vec{x}$ 是唯一的自由参数。由于积分含有坐标旋转不变的标量点乘 $\vec{p}\cdot\vec{x}$ ，积分结果将仅仅为空间坐标 $\vec{x}$ 的模 $|\vec{x}|$ 的函数。我们知道积分中涉及的变量量纲关系为

$$\text{Dim}\left[\frac{p^3}{p^2}\right] = \text{Dim}[p] = \text{Dim}[E] = \frac{1}{\text{Dim}[x]} .$$

因此，积分结果应当正比于 $|\vec{x}|$ 的倒数

$$\int d^3 p \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}}{\vec{p}^2} = \frac{A}{|\vec{x}|} .$$

将拉普拉斯算子 (Laplacian) $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ 作用在上式两边，我们能够很容易地定出比例常数A。根据关系式

$$\Delta \frac{1}{|\vec{x}|} = -4\pi\delta^{(3)}(\vec{x}),$$

以及积分式

$$\int d^3 p e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{x}),$$

通过拉普拉斯算符作用在 $1/\vec{p}^2$ 的傅利叶变换式可以得出

$$\Delta \int d^3 p \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}}{\vec{p}^2} = -\int d^3 p e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} = -(2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{x}) = \Delta \frac{A}{|\vec{x}|} = -4\pi A \delta^{(3)}(\vec{x}).$$

2. 求解薛定格方程能量本征值的方法

(1) 标度行为

讨论仅与径向坐标 $r \equiv |\vec{x}|$ 有关的中心力场势函数的情况，该势函数具有 $V(r) = ar^n$ 的形式。在空间坐标表象中，与时间无关的定态薛定格方程表示为

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2\mu} + ar^n \right) \Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}), \quad (8.2.1)$$

其中 μ 为两个粒子束缚态的约化质量，其定义为

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} .$$

在这里，我们引入一个任意选择的参数 K 来标度坐标 x 的量纲，即

$$x = K\rho, \quad (8.2.2)$$

由关系式 $\nabla^2 = \frac{\nabla_{\rho}^2}{K^2}$ 以及 $r^n = K^n \rho^n$,

可得出标度后的定态薛定格方程

$$\left(-\frac{\nabla_{\rho}^2}{2\mu K^2} + aK^n \rho^n \right) \Psi(K\vec{\rho}) = E\Psi(K\vec{\rho}) .$$

方程两边乘以 $2\mu\kappa^2$ ，则有

$$\left(-\nabla_{\rho}^2 + 2\mu a \kappa^{2+n} \rho^n\right)\Psi = 2\mu\kappa^2 E\Psi.$$

我们可以通过选取适当的 κ 值，使得方程中的 $2\mu a$ 因子消失

$$\kappa^{2+n} = \frac{1}{2\mu a},$$

由此可得

$$\kappa = \left(\frac{1}{2\mu a}\right)^{1/(2+n)}. \quad (8.2.3)$$

通过对参数 κ 的这种特殊选取，标度的薛定格方程形式变为

$$\left(-\nabla_{\rho}^2 + \rho^n\right)\Psi = \varepsilon\Psi, \quad (8.2.4)$$

其中 ε 是由求解被标度的薛定格方程所决定的某种无量纲数量。需要指出的是，现在被标度的薛定格方程也是无量纲的。

$$2\mu\kappa^2 E \equiv \varepsilon.$$

将方程 (8.2.3) 代入，我们即可得出能量本征值 E 与方程引入参数 a 、 μ 和 n 的关系：

$$E = \left[\frac{a^2}{(2\mu)^n}\right]^{1/(2+n)} \varepsilon. \quad (8.2.5)$$

在不对薛定格方程精确求解的情况下，讨论不同径向 r 幂次形式的中心力场势函数对应的能量本征值 E 的物理行为。

库仑势 ($n=-1$) 的情况下，由公式 (8.2.5) 得到： $E = 2\mu a^2 \varepsilon$ 。

上式显示能量本征值与约化质量和耦合常数平方成正比。由于薛定格方程引入的参数中唯有质量 μ 带能量量纲，所以能量本征值 E 必定与其成正比。然而，我们无法通过量纲分析推导出能量本征值 E 与耦合常数 a （精细结构常数）之间的关系。

线性势 ($n=1$) 的情况下，由公式 (8.2.5) 得到

$$E = \left(\frac{a^2}{2\mu} \right)^{1/3} \varepsilon. \quad (8.2.6)$$

对数势 ($n=0$) 的情况下，能量本征值可以从 ($n=0$) 时的公式 (8.2.5) 得到 $E = a\varepsilon$ 。

注意：此时能量本征值 E 是与质量无关的。这意味着甚至在约化质量 μ 取不同值时，激发态的能量本征值之差都是一样的。

在无需精确求解微分方程的前提下，我们找出了薛定格方程能量本征值与其所引入参数的函数依赖关系。由此，我们将能够通过求能量比的方法来检验数值求解的准确性。这个比值是与参数 ε 无关的，例如线性势中有

$$\frac{E_1}{E_2} = \left[\left(\frac{a_1}{a_2} \right)^2 \frac{\mu_2}{\mu_1} \right]^{1/3}.$$

借助于这种检验，我们将能对数值计算的精确度有一个认识。

(2) 变分方法 (上界逼近)

我们只需了解：对于一个具有本征值 E_k ($k=1, 2, \dots$) 的哈密顿量 $\hat{H}$ ，引入一组含变分参数 λ 的正交“试探”波函数 Ψ_k ，通过计算哈密顿算符在正交基 Ψ_k 上的矩阵元可以求出 E_k 的上限值 E_k^{upper} 。对所得的 $E_k^{upper}(\lambda)$ 作关于变分参数 λ 的最小化处理，即可使这一上限值逼近能量本征值的“真解”。为获得径向波函数激发态本征值上限，必须对相应的能量矩阵 (E_{ij}) 进行对角化，具体步骤如下：

(i) 选取一组相互正交的“试探”基 $|\Psi_i(\lambda)\rangle$ ，我们有 $\langle\Psi_i(\lambda)|\Psi_j(\lambda)\rangle = \delta_{ij}$ 。

(ii) 通过试探波函数确定哈密顿量 $\hat{H}$ 的矩阵元 $E_{ij}(\lambda) \equiv \langle\Psi_i(\lambda)|\hat{H}|\Psi_j(\lambda)\rangle$ 。

(iii) 求解其本征方程的根 $\det[E_{ij}(\lambda) - E^{upper}(\lambda)\delta_{ij}] = 0$ 。

(iv) 与任意选择的变分参数 λ 有关的方程根 $E^{upper}(\lambda)$ 就是能量上限。

(v) 求使 $E^{upper}(\lambda)$ 取最小值的参数 λ (即求解 $\lambda_{\min}$)，以改善能量上界值。通过下

面的极值条件方程求出 $\lambda_{\min}$ ：
$$\frac{\partial E^{upper}(\lambda)}{\partial \lambda} = 0$$
。

(vi) 将 $\lambda_{\min}$ 代入 $E(\lambda)$ ，即可得到 E_k 的最小上限，即在我们所选择希尔伯特 (Hilbert) 空间的最小上限值

$$E_k \leq E_k^{upper}(\lambda_{\min}).$$

3. 基态能量本征值问题

库仑势函数模型是基态问题的典型情况，体系的哈密顿量 $\hat{H}$ 可以很简单的表示为

$$\hat{H} = -\frac{\nabla^2}{2\mu} - \frac{\alpha}{r}, \quad (8.2.10)$$

其中 α 为电磁精细结构常数。首先，我们要选取一组合适的“试探”波函数。这里，我们将选用氢原子的基态本征波函数（当然也可以选取其他的正交基，如高斯函数作为试探函数）。

$$\Psi(r, \lambda) = N \exp\{-\lambda r\}, \quad \lambda^* = \lambda > 0,$$

其中 λ 为变分参数。 N 为归一化因子，它可以由下式确定

$$\int d^3x \Psi^* \Psi = 1 = N^2 \int d^3x \exp\{-2\lambda r\} = N^2 4\pi \int_0^\infty r^2 \exp\{-2\lambda r\} dr = 4\pi N^2 \frac{\Gamma(3)}{(2\lambda)^3}$$

上式计算中用到了如下公式

$$\int_0^\infty r^n \exp\{-\lambda r\} dr = \frac{\Gamma(n+1)}{\lambda^{n+1}}. \quad (8.2.11)$$

在 Mathematica V4.0 系统中，这一过程可表述为：

(* 积分 *)

$$\text{In}[1] := \int_0^{\infty} E^{-\lambda r} r^n dr$$

$$\text{Out}[1] = \text{If}[\text{Re}[n] > -1 \& \& \text{Re}[\lambda] > 0, \lambda^{-1-n} \text{Gamma}[1+n], \int_0^{\infty} e^{-\lambda r} r^n dr]$$

这一输出结果的含义是：如果 $\text{Re}[\lambda] > 0$ ，且 $\text{Re}[n] > -1$ ，则以上积分的结果为 $\lambda^{-1-n} \Gamma(1+n)$ ，否则将输出

$$\int_0^{\infty} \frac{r^n}{\exp\{\lambda r\}} dr,$$

这意味着Mathematica无法求解该问题。由此可得归一化因子

$$N = \frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{\pi}},$$

归一化的“试探”波函数为

$$\Psi(r, \lambda) = \frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\lambda r}$$

为保险起见，我们可以检验一下关系式两边的量纲。根据以前的讨论，我们知道关系式左边的量纲为 $\text{Dim}[E^{3/2}]$ 。为使指数运算 $\exp\{-\lambda r\}$ 有意义，乘积 λr 必须是无量纲的量，即

$\text{Dim}[\lambda r] = 1$ 。由此有 $\text{Dim}[\lambda] = \frac{1}{\text{Dim}[r]} = \text{Dim}[E]$ ，即

$$\text{Dim}[\Psi] = \text{Dim}[E^{3/2}] = \text{Dim}[\lambda^{3/2}].$$

In[2] := $4\pi \int_0^\infty r^2 E^{-2\lambda r} dr$ (* 积分 *)

Out[2] = $4\pi \text{ If}[\text{Re}[\lambda] > 0, \frac{1}{4\lambda^3}, \int_0^\infty e^{-2\lambda r} r^2 dr]$

完整的结果应是：

$$N^2 \frac{4\pi}{4\lambda^3} = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}}.$$

下一步，我们将借助引入的“试探”波函数求动能项的期望值。由于我们只讨论基态的能量本征值，而对基态量子数 $l=0$ ，此时在径向中心力场势情况下可采用拉普拉斯算子形式为

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}.$$

其期望值为

$$\begin{aligned} \int d^3x \Psi^*(r, \lambda) \Delta \Psi(r, \lambda) &= \frac{\lambda^3}{\pi} \int d^3x e^{-\lambda r} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) e^{-\lambda r} = \frac{\lambda^3}{\pi} 4\pi \int_0^\infty dr (r^2 \lambda^2 - 2r\lambda) e^{-2\lambda r} = 4\lambda^3 \left[\lambda^2 \frac{\Gamma(3)}{(2\lambda)^3} - 2\lambda \frac{\Gamma(2)}{(2\lambda)^2} \right] \\ &= 4\lambda^3 \left(-\frac{1}{4\lambda} \right) = -\lambda^2. \end{aligned}$$

我们可以看到这里的量纲检验仍然是正确的。我们在下式中省略了 Dim[...] 符号：

$$x^3 \Psi \frac{1}{x^2} \Psi \rightarrow E^{-3} E^{3/2} E^2 E^{3/2} = E^2 \rightarrow \lambda^2.$$

动能项的期望值为 $\left\langle \frac{\vec{p}^2}{2\mu} \right\rangle = \int d^3x \Psi^*(r, \lambda) \left(-\frac{\Delta}{2\mu} \right) \Psi(r, \lambda) = \frac{\lambda^2}{2\mu}.$

相应的 Mathematica V4.0 计算过程为

MATHEMATICA V4.0

In[3] := $\psi[r_ , \lambda_] := \frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{\pi}} E^{-\lambda r}$ (* 定义“试探”波函数 *)

In[4] := $g[r_ , \lambda_] := D[\psi[r, \lambda], \{r, 2\}] + \frac{2}{r} D[\psi[r, \lambda], \{r, 1\}]$ (* 轨道角动量为零的有效拉普拉斯算符 *)

In[5] := $4\pi \int_0^\infty r^2 \psi[r, \lambda] g[r, \lambda] dr$

Out[5] = $4\sqrt{\pi} \lambda^{3/2} \text{ If}[\text{Re}[\lambda] > 0, -\frac{\sqrt{\lambda}}{4\sqrt{\pi}}, \int_0^\infty e^{-r\lambda} r^2 \left(-\frac{2e^{-r\lambda} \lambda^{5/2}}{\sqrt{\pi} r} + \frac{e^{-r\lambda} \lambda^{7/2}}{\sqrt{\pi}} \right) dr]$

Mathematica 表达式 $D[\psi[r, \lambda], \{r, n\}]$ 功能为, 以 r 为变量对 $\Psi(r, \lambda)$ 求 n 次偏导。幂指数势函数 $V(r) = ar^n$ 的期望值为 $\int d^3x \Psi^*(r, \lambda) V(r) \Psi(r, \lambda) = \frac{\lambda^3}{\pi} 4\pi a \int_0^\infty r^{n+2} e^{-2\lambda r} dr = \frac{\lambda^3}{\pi} 4\pi a \frac{\Gamma(n+3)}{(2\lambda)^{n+3}}.$

即

$$\langle V(r) \rangle = \int d^3x \Psi^*(r, \lambda) V(r) \Psi(r, \lambda) = 4a\lambda^3 \frac{\Gamma(n+3)}{(2\lambda)^{n+3}}. \quad (8.2.13)$$

量纲分析要求

$$V = ar^n \rightarrow aE^{-n} \rightarrow E$$

即耦合常数 a 的量纲为

$$a \rightarrow E^{n+1}.$$

则方程 (8.2.13) 的量纲也是正确的, 即 $a\lambda^{-n} \rightarrow E^{n+1}E^{-n} = E$.

与之对应的 Mathematica V4.0 的指令为:

MATHEMATICA V4.0

In[6]:= $\int_0^\infty r^{n+2} E^{-2\lambda r} dr$ (* 积分 *)

Out[6]= $If[Re[\lambda] > 0 \& \& Re[n] > -3, 2^{-3-n} \lambda^{-3-n} Gamma[3+n], \int_0^\infty e^{-2r\lambda} r^{2+n} dr]$

结合方程 (8.2.12) 和 (8.2.13), 可得能量表示为 $E(\lambda) = \frac{\lambda^2}{2\mu} + \frac{a}{2} \frac{\Gamma(n+3)}{(2\lambda)^n}$.

对于任何 $\lambda > 0$ 的值, 这一能量解始终是能量值“真解”的上界: $E_{true} \leq E(\lambda)$ 。通过求可使 $E(\lambda)$ 取最小值的变分参数 λ 值, 即解出 λ_{min} , 就可以很容易地改进这一能量上限, 使其逼近真解。显然, λ_{min} 由 $\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = 0$ 给出。

对公式 (8.2.14) 求偏导, 可得 $\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{\lambda}{\mu} - an \frac{\Gamma(n+3)}{(2\lambda)^{n+1}} = 0$.

求解得到

$$\lambda_{\min} = \left[\frac{an\mu\Gamma(n+3)}{2^{n+1}} \right]^{1/(n+2)}. \quad (8.2.15)$$

得改进后的能量本征值上限

$$E_{\text{var}} = E(\lambda_{\min}) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu} \right)^{n/(n+2)} \left[\frac{an\Gamma(n+3)}{2^{n+1}} \right]^{2/(n+2)} \left(1 + \frac{2}{n} \right). \quad (8.2.16)$$

对应的 Mathematica V4.0 的程序为：

MATHEMATICA V4.0

In[7]:= e[λ_]:= λ²/(2μ)+a/2 Gamma[n+3]/(2λ)ⁿ (* 定义函数 E(λ) *)

In[8]:= D[e[λ], λ]

(* 对参数 λ 作微分 (注意:D[e[λ], {λ, 1}]等效于 D[e[λ], λ] *)

Out[8]= $\frac{1}{\mu} - 2^{-1-n} an \lambda^{-1-n} \text{Gamma}[3+n]$

In[9]:= Solve[λ/μ - 2⁻¹⁻ⁿ an λ⁻¹⁻ⁿ Gamma[3+n] == 0, λ] (* 解方程求 λ_{min} *)

Out[9]= $\left\{ \left\{ \lambda \rightarrow (2^{-1-n} an \mu \text{Gamma}[3+n])^{\frac{1}{2+n}} \right\} \right\}$

In[10]:= $e[(2^{-1-n} a n \mu \text{Gamma}[3+n])^{1/(2+n)}]$ (* 计算 $E(\lambda_{\min})$ *)

$$\text{Out}[10]= \frac{(2^{-1-n} a n \mu \text{Gamma}[3+n])^{\frac{2}{2+n}}}{2\mu} + 2^{-1-n} a \left((2^{-1-n} a n \mu \text{Gamma}[3+n])^{\frac{1}{2+n}} \right)^{-n} \text{Gamma}[3+n]$$

(* 注意: 指令 PowerExpand[expr] 的功能为将所有乘积和指数作幂次展开。% 代表 Mathematica 输出的最后的一个表达式, 在此即为上面最后一个表达式, 即 Out[11] }。*)

In[11]:= PowerExpand[%]

$$\text{Out}[11]= 2^{\frac{(-4-3n)}{2+n}} a^{\frac{2}{2+n}} n^{\frac{2}{2+n}} \mu^{-\frac{n}{2+n}} \text{Gamma}[3+n]^{\frac{2}{2+n}} + 2^{\frac{(-2-2n)}{2+n}} a^{\frac{2}{2+n}} n^{-\frac{n}{2+n}} \mu^{-\frac{n}{2+n}} \text{Gamma}[3+n]^{\frac{2}{2+n}}$$

通过仔细的比较, 输出 Out[11] 给出的结果与公式 (8.2.16) 是一致的。下面我们讨论一些典型的势函数上。

库仑势: 将 $a = -\alpha$ 和 $n = -1$ 代入, 可得 $E_{\text{true}} \leq -\frac{\alpha^2 \mu}{2}$ 。

表达式的右边正好是氢原子基态能量, 即等号是严格成立的。这是由于我们恰好选取氢原子基态波函数作为“试探”波函数引来的。

对于 $\alpha = 1$ 和 $\mu = 1$ 情况, 能量数值解为 $E = -0.5$ 。这一处理的 Mathematica V4.0 表述式为

MATHEMATICA V4.0

In[13]:= e[λ_, n_, a_, μ_] := λ²/(2μ) + a/2 Gamma[n + 3]/(2λ)ⁿ

(* 定义需要最小化的函数 *)

In[14]:= FindMinimum[e[λ, -1, -1, 1], {λ, 0.5}]

(* 以变分参数 λ = 0.5 为起始点, 求最小值 *)

Out[14]= {-0.5, {λ → 1.}}

(* 这可以理解为 λ_{min} = 1 时, 能量最小值 E_{min} = -0.5 *)

线性势情况, 即 $V(r) = ar$, 我们将 $n = 1$ 代入关系式 (8.2.16), 得到

$$E_{true} \leq E_{var} = \left(\frac{3}{2}\right)^{5/3} \left(\frac{a^2}{\mu}\right)^{1/3}.$$

即

$$E_{true} \leq \frac{3^{5/3}}{2^{4/3}} \left(\frac{a^2}{2\mu}\right)^{1/3} = 2.4764 \left(\frac{a^2}{2\mu}\right)^{1/3}. \quad (8.2.17)$$

而基态能量的“真解” E_{true} 可由 Airy 函数的第一个零点给出,

$$E_{true} = 2.3381 \left(\frac{a^2}{2\mu}\right)^{1/3}.$$

比较两种结果, 可以看到我们求得的原始上限 E_{var} 与真值的相对误差非常小。

$$\frac{E_{\text{var}} - E_{\text{true}}}{E_{\text{true}}} \cong 6\% .$$

由此我们在不具体求解薛定格方程的情况下，解析地推导出线性势基态本征能量，其数值结果与“真解”有很好的近似。

MATHEMATICA V4.0

In[15]:= e[λ_, n_, a_, μ_] := λ^{2/(2μ)} a/2 Gamma[n+3]/(2λ)ⁿ

(* 定义能量函数 *)

In[16]:= FindMinimum[e[λ, 1, 1, 1], {λ, 0.5}]

(* 以变分参数 λ = 0.5 为起始点，求最小值。 *)

Out[16]= {1.96556, {λ -> 1.14471}}

将 $n = a = 1$ 代入公式 (8.2.15), (8.2.16) 和 (8.2.17), 可以对以上结果进行检验。通常将计算结果用绘图显示出来, 这样有助于进行比较。令 $2\mu = 1$, 我们分别绘制函数 $E_{\text{true}} = 2.3381a^{2/3}$ 和 $E_{\text{var}} = 2.4764a^{2/3}$, 然后借助 Mathematica 的 Show 指令将两个图形合在一起进行比较。

定义函数

```
In[17]:= etrue[a_] := 2.3381 a^(2/3)
```

```
In[18]:= eupper[a_] := 2.4764 a^(2/3)
```

```
In[19]:= plot1=Plot[etrue[a], {a, 0, 3}, AxesLabel->{"a", "E"}, TextStyle->
{FontSlant->"Italic", FontSize->14}] (* 绘制  $E_{true}$  (plot1) *)
```

(* AxesLabel: 定义坐标轴的表述; TextStyle 定义字型和字体大小。*)

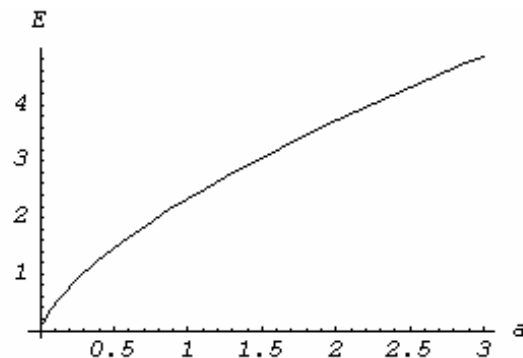


图8.2.2 线性势基态能量真值 E_{true} 。

```
In[20]:= plot2=Plot[eupper[a], {a, 0, 3}, AxesLabel->{"a", "E"}, TextStyle->
{FontSlant ->" Italic", FontSize->14}] (* 绘制  $E_{var}$  (plot2)
```

*)

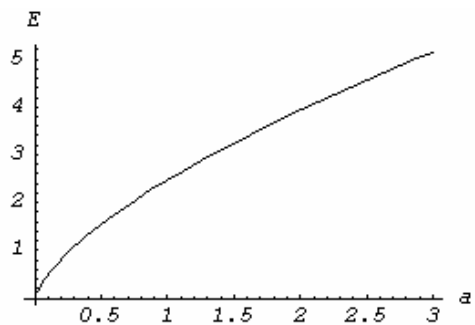


图8.2.3 线性势基态的变分上限能量 E_{var} 。

In[21]:= Show[plot1,plot2] (* 将{plot1}与{plot2}合并绘制 *)

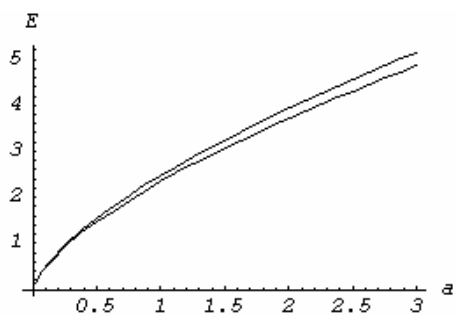


图8.2.4 线性势基态能量真值和变分上限。

4. 径向激发态能量本征值问题

我们求解一个线性势束缚系统的基态和第一激发态能量，以演示求解这类问题的一般方法。首先，需要选取一组正交基（“试验”波函数）。对于基态，我们再次选择氢原子本征函数

$$\Psi_0(r, \lambda) = \frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\lambda r},$$

而对于第一激发态，我们选用

$$\Psi_1(r, \lambda) = \frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{3\pi}} (3 - 2\lambda r) e^{-\lambda r}, \quad (8.2.18)$$

激发态的波函数是有节点的，我们选取的“试验”函数必须反映这一特性。第一激发态有一个节点，因此“试验”函数必须有一个零点，如等式(8.2.18)所示。第一激发态的“试验”波函数要求与基态本征函数相互正交

$$\langle \Psi_0 | \Psi_1 \rangle = 0.$$

运用 Mathematica V3.0 语言系统直接检验其正交归一性：

MATHEMATICA

```
In[22]:= psi0[lambda_, r_] := Sqrt[lambda^3/Pi] Exp[-lambda r]
(* 定义基态“试验”函数  $\Psi_0$  *)
```

In[23]:= psi1[lambda_, r_] := Sqrt[lambda^3/(3 Pi)] (3-2 lambda r) Exp[-lambda r]
 (* 定义第一激发态“试验”波函数 Ψ_1 *)

In[24]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi0[lambda, r]^2, {r, 0, Infinity}]

Out[24]:= $4\pi \frac{1}{4\pi}$ (* 检验 Ψ_0 的归一性 *)

In[25]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi1[lambda, r]^2, {r, 0, Infinity}]

Out[25]:= $4\pi \frac{1}{4\pi}$ (* 检验 Ψ_1 的归一性 *)

In[26]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi0[lambda, r] psi1[lambda, r], {r, 0, Infinity}]

Out[26]= 4 Pi 0 (* 检验波函数 Ψ_0 和 Ψ_1 的正交性 *)

In[27]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi0[lambda, r] a r psi0[lambda, r], {r, 0, Infinity}
 (* 线性势期望值 $V_{00} = \langle \Psi_0 | ar | \Psi_0 \rangle$ *)

Out[27]= $4 \pi \frac{3a}{8 \lambda \pi}$

In[28]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi0[lambda, r] a r psi1[lambda, r], {r, 0, Infinity}
 (* 线性势矩阵元 $V_{01} = V_{10} = \langle \Psi_0 | ar | \Psi_1 \rangle$ *)

Out[28]= $4 \pi \left(-\frac{\text{Sqrt}[3] a}{8 \lambda \pi} \right)$

In[29]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi1[lambda,r] a r psi1[lambda,r], {r,0,Infinity}]

(* 线性势期望值 $V_{11} = \langle \Psi_1 | ar | \Psi_1 \rangle$ *)

$$\text{Out}[29] = 4 \text{ Pi } \frac{5 a}{8 \text{ lambda } \text{ Pi}}$$

In[30]:= laplacepsi0[lambda_, r_] := D[psi0[lambda, r], {r, 2}] + 2/r

D[psi0[lambda, r], r] (* 定义基态波函数 Ψ_0 的拉普拉斯量 *)

In[31]:= laplacepsi1[lambda_, r_] := D[psi1[lambda, r], {r, 2}] + 2/r

D[psi1[lambda, r], r] (* 定义第一激发态 Ψ_1 的拉普拉斯量 *)

In[32]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi0[lambda, r] (-laplacepsi0[lambda, r]/(2 mu)),

{r, 0, Infinity}] (* 动能项期望值 $T_{00} = \langle \Psi_0 | -\frac{\nabla^2}{2\mu} | \Psi_0 \rangle$ *)

$$\text{Out}[32] = 4 \text{ Pi } \frac{\text{lambda}^2}{8 \text{ mu } \text{ Pi}}$$

In[33]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi0[lambda, r] (-laplacepsi1[lambda, r]/(2 mu)),

{r, 0, Infinity}] (* 动能项矩阵元 $T_{01} = T_{10} = \langle \Psi_0 | -\frac{\nabla^2}{2\mu} | \Psi_1 \rangle$ *)

$$\text{Out}[33] = 4 \text{ Pi } \frac{\text{lambda}^2}{4 \text{ Sqrt}[3] \text{ mu } \text{ Pi}}$$

In[34]:= 4 Pi Integrate[r^2 psi1[lambda, r] (-laplacepsi1[lambda, r]/(2 mu)),

{r, 0, Infinity}] (* 动能项期望值 $T_{11} = \langle \Psi_1 | -\frac{\nabla^2}{2\mu} | \Psi_1 \rangle$ *)

$$\text{Out}[34]= 4 \text{ Pi } \frac{7 \text{ lambda}^2}{24 \text{ mu } \text{ Pi}}$$

运用 Mathematica 语言，分别以解析和数值两种方式求能量本征值：

MATHEMATICA

(* 能量矩阵元：*)

In[35]:= e00[lambda_, mu_, a_] := lambda^2/(2 mu)+3 a/(2 lambda)

In[36]:= e11[lambda_, mu_, a_] := 7 lambda^2/(6 mu)+ 5 a/(2 lambda)

In[37]:= e10[lambda_, mu_, a_] := lambda^2/(Sqrt[3] mu)- Sqrt[3] a/(2 lambda)

In[38]:= ematrix[lambda_, mu_, a_] := {{e00[lambda, mu, a], e10[lambda, mu, a]},
 {e10[lambda, mu, a], e11[lambda, mu, a] }}

(* 定义以参数 λ 、 μ 和 a 为自变量的能量矩阵元 $E_{ij}(\lambda)$ *)

In[39]:= eeigen[lambda_, mu_, a_] := Eigenvalues[ematrix[lambda, mu, a]]

(* 定义以参数 λ 、 μ 和 a 为自变量的能量本征值 $E(\lambda)$ *)

In[40]:= eeigen[lambda, mu, a] (* 解析推导本征值 *)

```
Out[40]= {(5*lambda^4*mu + 12*a*lambda*mu^ - 2*lambda*mu*Sqrt[4*lambda^6 -
6*a*lambda^3*mu + 9*a^2*mu^2])/(6*lambda^2*mu^2), (5*lambda^4*mu +
12*a*lambda*mu^2 + 2*lambda*mu*Sqrt[4*lambda^6 - 6*a*lambda^*mu +
9*a^2*mu^2])/(6*lambda^2*mu^2) }
```

```
In[41]:= FullSimplify[%]      (* 化简上式 *)
```

```
Out[41]= {(5*lambda^3 + 12*a*mu - 2*Sqrt[4*lambda^6 - 6*a*lambda^3*mu +
9*a^2*mu^2])/(6*lambda*mu), (5*lambda^3 + 2*(6*a*mu +
Sqrt[4*lambda^6 - 6*a*lambda^3*mu + 9*a^2*mu^2]))/(6*lambda*mu)}
```

```
In[42]:= eeigen[1, 1/2, 1]
```

(* 在 $\lambda=1$ (GeV)、 $\mu=0.5$ (GeV) 及 $a=1(\text{GeV})^2$ 条件下, 数值求解本征值 E *)

```
Out[42]= {(11 - Sqrt[13])/3, (11 + Sqrt[13])/3}
```

```
In[43]:= N[%]      (* 数值化 Mathematica 指令 N[expr]可求表达式 expr 的数值 *)
```

```
Out[43]= {2.46482, 4.86852}
```

则能量本征值的变分上限分别为

$$E_{upper}(1S) = 2.46482 \text{ GeV},$$

$$E_{upper}(2S) = 4.86852 \text{ GeV},$$

其相应的**真值解**为

$$E_{true}(1S) = 2.33811 \text{ GeV}$$

$$E_{true}(2S) = 4.08795 \text{ GeV}$$

对于**基态** (以 1S 表示), 我们所得的变分上限值 E_{upper} 的相对误差为

$$\frac{E_{upper}(1S) - E_{true}(1S)}{E_{true}(1S)} = 5.4\%$$

这一结果比前面给出的 6% 相对误差稍好一些。由此可以看出, 通过增加矩阵的大小 (此处是由 1×1 变成 2×2), 可以提高上限值的近似程度。对于**第一激发态** (以 2S 表示), 变分上限值 E_{upper} 的相对误差为

$$\frac{E_{upper}(2S) - E_{true}(2S)}{E_{true}(2S)} = 19.1\%$$

这一误差值稍大了一些, 我们可以运用方程 (8.2.8) 及 (8.2.9), 来改进这一结果。这样我们就能找到覆盖在所选的这组“**试验**”波函数上的能量本征值最小值。

但是, 改变变分参数 λ 往往会破坏来自于不同激发态“**试验**”波函数的正交性。原则上, 特征方程并非由方程 (8.2.7) 给出。考虑到这一因素, 下面我们将仅限于基态 1S 的讨论, 因为基态不涉及正交性破坏的问题。

运用最小化过程，通过最小化相应的能量矩阵 E_{ij} 本征值 E_λ ，我们能够优化前面得到的线性势基态能量上限。借助 Mathematica 指令 `Part[expr, i]` 功能：将表达式 `expr` 的第 `i` 部分取出返回），这样就将本征值从解析结果中提取出来。

MATHEMATICA

```
In[44]:= e00eigen[lambda_] := Part[Eigenvalues[ematrix[lambda, 1/2, 1]], 1]
```

(* 在 $\mu = 0.5 \text{ GeV}$ 及 $a = 1 \text{ GeV}^2$ 条件下，定义以 λ 为自变量的基态本征值 *)

```
In[45]:= e00eigen[lambda] (* 解析计算基态能量本征值 *)
```

```
Out[45]= (6*lambda + 5*lambda^4 - lambda*Sqrt[9 - 12*lambda^3 +  
16*lambda^6])/(3*lambda^2)
```

```
In[46]:= FindMinimum[%, {lambda, 0.5}]
```

(* 寻找 1S-态能量的最小值（以 $\lambda = 0.5 \text{ GeV}$ 为起始点）*)

(* 虽然我们希望能够用 Mathematica 指令 `FindMinimum[e00eigen[lambda], {lambda, 0.5}]` 求得正确的最小值，但实际运行显示 Mathematica 无法同步实现计算本征值、抽取矩阵元相关部分并求解最小值。因此，在实际运用中，我们是将计算过程仔细地划分成几部分来进行的。*)

```
Out[46]= {2.4322, {lambda -> 0.665633}}
```

通过对变分参数最小化后，得到改进的新结果为 $E_{\text{var}}(1S) = 2.43220 \text{ GeV}$

此时参数为 $\lambda_{\text{min}} = 0.665633 \text{ GeV}$ 。

显然，我们已经成功地减小了相对误差。

$$\frac{E_{\text{var}}(1S) - E_{\text{true}}(1S)}{E_{\text{true}}(1S)} = 3.9\% .$$

正如前面所说，最小化过程一般将导致基态和激发态具有不同的变分参数值：

$\lambda_i \neq \lambda_j$ 。由此，所有这些态一般将不再正交。即 $\langle \Psi_i(\lambda_i) | \Psi_j(\lambda_j) \rangle \neq \delta_{ij}$ 。

此时，本征值问题的特征方程 (8.2.7) 将变为

$$\det[\langle \Psi_i(\lambda_i) | \hat{H} | \Psi_j(\lambda_j) \rangle - E^{\text{upper}} \langle \Psi_i(\lambda_i) | \Psi_j(\lambda_j) \rangle] = 0 .$$

我们将讨论如何通过扩大矩阵大小，来进一步提高薛定格能级上限的精确度。

5. 勒盖尔(Laguerre)上限

从前面的讨论可以看出，精确地求解能量上限的关键步骤是选择一组合适的“试探”波函数。我们这里引入一组勒盖尔多项式 $L_k^{(\gamma)}$ ，以提高“试探”波函数的性能。并进一步引入两个变分参数：含质量量纲的参数 λ 及无量纲的参数 β ；以及选择可以得到含角动量 l 及其投影 m 的“试探”波函数 $\psi_{k,lm}(\vec{x})$ ，其相应的坐标空间表述为

$$\psi_{k,lm}(\vec{x}) = N |\vec{x}|^{l+\beta-1} \exp(-\lambda |\vec{x}|) L_k^{(\gamma)}(2\lambda |\vec{x}|) Y_{lm}(\Omega) . \quad (8.2.19)$$

波函数的归一化条件要求变分参数 λ 数值为正：即 $\lambda > 0$ 。这里 $Y_{lm}(\Omega)$ 标识在与立体角 Ω 内的角动量为 l ，其投影为 m 的球谐函数，其正交关系约定为

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\Omega) Y_{l'm'}(\Omega) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} .$$

(8.2.19) 式所定义的波函数正交归一，不但确定了归一化常数 N ，还对参数 γ 的取值作出限制： $\gamma = 2l + 2\beta$ 。由此可得

$$\psi_{k,lm}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{(2\lambda)^{2l+2\beta+1} k!}{\Gamma(2l+2\beta+k+1)}} |\vec{x}|^{l+\beta-1} \exp(-\lambda|\vec{x}|) L_k^{(2l+2\beta)}(2\lambda|\vec{x}|) Y_{lm}(\Omega).$$

它满足的正交归一化条件为

$$\int d^3x \psi_{k,lm}^*(\vec{x}) \psi_{k',l'm'}(\vec{x}) = \delta_{kk'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

很显然，正交归一化同时也对第二个变分参数 β 作出限制 $2\beta > -1$ ，即其取值域为 $\beta > -\frac{1}{2}$ 。为便于讨论，我们做以下化简：质量标度 $m_1 = m_2 = 1\text{GeV}$ ，变分参数 $\lambda = 1\text{GeV}$ 及 $\beta = 1$ 。为表述求解的一般过程以及便于比较，我们仍将讨论线性势的情况 $V = ar$ ，并取 $a = 1\text{GeV}^2$ 。这里的计算至少在矩阵大小扩大到 4×4 阶时，所有计算仍能够解析求解（手工推导）。下面将演示运用 Mathematica 语言进行计算的过程：

- 定义所选取的“试探”波函数 $\psi_{k,lm}(\vec{x})$ ；
- 计算拉普拉斯算符（动能项）的矩阵元；
- 计算径向坐标 r （势能项）的矩阵元；
- 确定所得的总能量矩阵 $E_{ij}(\lambda)$ 的本征值 $E(\lambda)$ ；
- 比较不同矩阵大小对应的能量本征值，以期观测到收敛行为。

MATHEMATICA

```
In[47]:= psix[k_, l_, m_, r_] := Sqrt[2^(2 l+3) k!/Gamma[2 l+3+k]] r^l  
Exp[-r]*LaguerreL[k, 2 l+2, 2 r]*SphericalHarmonicY[l, m, theta, phi]
```

(* 定义“试探”波函数 $\psi_{k,lm}(\vec{x})$ *)

```
In[48]:= psi[k_, r_] := psix[k, 0, 0, r]
```

(* 由于我们仅讨论 S-波情况, 可使“试探”波函数有 $l = m = 0$ *)

```
In[49]:= delta[k_, r_] := D[psi[k, r], {r, 2}]+2/r D[psi[k, r], {r, 1}]
```

(* 定义拉普拉斯算符作用在 $l = 0$ (S-波) 态上的 $\Delta\psi_k(r)$ *)

```
In[50]:= intks[k_, s_, r_] := psi[s, r] delta[k, r] (* 定义积分  $\int_{\psi_s(r)\Delta\psi_k(r)}$  *)
```

```
In[51]:= kinen[k_, s_] := -4 Pi Integrate[r^2 intks[k, s, r], {r, 0, Infinity}]
```

(* 动能算符 $T = -\Delta$ 的矩阵元 $\int_0^\infty dr r^2 \psi_s(r)(-\Delta\psi_k(r))$ (注: 由于已取两粒子质量

为 $m_1 = m_2 = 1\text{GeV}$, 约化质量 μ 也将等于 $1/2\text{GeV}$) *)

```
In[52]:= poten[k_, s_] := 4 Pi Integrate[r^3 psi[s, r] psi[k, r], {r, 0, Infinity}]
```

(* 势能算符 $V(r) = r$ 的矩阵元 $\int_0^\infty dr r^2 \psi_s(r)r\psi_k(r)$ *)

```
In[53]:= toten[k_, s_] := kinen[k, s]+poten[k, s]
```

(* 总能量矩阵元 *)

(* 下面我们将用 Table 指令来构造矩阵。因为矩阵指标是从 0 开始计数的，我们需要重新定义矩阵，以使 $x=1$ 时给出 1×1 矩阵等等。*)

```
In[54]:= totenmat[x_] := Table[toten[k, s], {k, 0, x-1}, {s, 0, x-1}]
```

(* 借助指令 Eigenvalues[M]，定义函数 eeigen[x]。这一指令将给出 $X \times X$ 阶矩阵 M 的本征值，亦即对任意的 $X \times X$ 阶矩阵对角化。*)

```
In[55]:= eeigen[x_] := Eigenvalues[totenmat[x]]
```

```
In[56]:= eeigen[1] (*  $1 \times 1$  能量矩阵的本征值 *)
```

```
Out[56]=  $\left\{\frac{5}{2}\right\}$ 
```

```
In[57]:= eeigen[2] (*  $2 \times 2$  能量矩阵的本征值 *)
```

```
Out[57]=  $\left\{\frac{1}{3}(11-\sqrt{13}), \frac{1}{3}(11+\sqrt{13})\right\}$ 
```

```
In[58]:= N[%] (* 运用N[%] 指令对上式输出进行数值化处理 *)
```

```
Out[58]= {2.46482, 4.86852} (* 数值化的基态和第一激发态能量 *)
```

```
In[59]:= eeigen[3] (*  $3 \times 3$  能量矩阵的本征值 *)
```

```
Out[59]=  $\left\{\frac{9}{2}, 5-\sqrt{7}, 5+\sqrt{7}\right\}$ 
```

```

In[60]:= N[%]          (* 运用N[%] 指令对上式输出进行近似数值计算 *)
Out[60]= {2.35425, 4.5, 7.64575}      (* 数值化的基态和第一、第二激发态能量 *)
(* 通常, 一个5×5矩阵的本征值是无法解析求解的。我们来进行数值求解 *)
In[61]:= N[eeigen[5]]      (* 求基态和前四个激发态的能量的近似数值 *)
Out[61]= {2.34136, 4.13334, 5.72535, 8.11424, 15.519}
In[62]:= N[eeigen[10]]     (* 注: 10×10 能量矩阵本征值的计算将耗费一定机时 *)
Out[62]= {2.33812, 4.08858, 5.53209, 6.83859, 8.14892, 9.91409, 12.195, 14.096, 17.146,
          49.7026}          (* 基态和前九个径向激发态的能量 *)

```

在表 8.2.1 中, 我们对基态、激发态能级上限精确度与能量矩阵大小的关系进行了一个对照比较。

表 8.2.1 不同大小矩阵对应的能量本征值相对误差的比较

矩阵大小	1S 态	2S 态
1×1	6%	—
2×2	5%	19%
3×3	0.7%	10%
5×5	0.1%	1%
10×10	$4 \times 10^{-4}\%$	$2 \times 10^{-2}\%$

可见，这样的处理对精度的提高极为显著。对不同于幂指数 $V = r^n$ 的势函数 $V(r)$ ，以及不同于非相对论 $\vec{p}^2/2m$ 的微分算符都适用。因此，我们可以用这一方法来求解更为复杂的哈密顿算符的能量本征值问题，如处理包含平方根相对论动能算符 $\sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$ 的准相对论过程。另一方面，由于直到 4×4 阶能量矩阵 E 是能够解析对角化的，这一特性使我们能够对纯数值计算给出的结果精度进行控制。但是，我们需要牢记此处计算得出的数值结果，仅是表示能量本征值真实解的上限： $E_{true} \leq E(\lambda)$ 。

小结：运用 Mathematica 语言和一些基本物理原理简便地处理束缚态问题，并且由此计算给出的数值结果具有较好的精度。计算中并未真正涉及相关波函数的确定问题。然而，我们的这种处理和计算方法说明：只要矩阵尺度足够大，即可实现对于波函数任意精度的逼近。另一方面，对于小尺度矩阵而言，一般来说即使能级计算给出的结果相当准确，我们也完全不能相信所选取的波函数。

§ 8.3 求解薛定格方程束缚态问题

存在着许多非相对论势作用下的薛定格方程却难以求得其解析解。如夸克在束缚态下通过球对称势进行的相互作用。对于有球对称性的势函数 $(V(r), r = |\vec{r}|)$ ，其中 $\vec{r}$ 为两体的相对坐标) 的两体问题的薛定格方程，在自然单位制下 ($\hbar = c = 1$)，其定态薛定格方程可以通过波函数分离变量的表示，其径向微分方程为

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr^2} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \left[2\mu(V(r) - E) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0.$$

引入变换 $R_{n,l}(r) = \frac{y_{n,l}(r)}{r}$,

从而得到一个一般的导出波函数 $y_{n,l}(r)$ 的微分方程

$$\left[\frac{1}{2\mu} \left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] y_{n,l}(r) = E_{n,l} y_{n,l}(r).$$

其中激发态主量子数为 n ，轨道角动量量子数为 l ($l=0, 1, 2, \dots$)， $E_{n,l}$ 为能量本征值， $n=0, 1, 2, \dots$ 也等于对应束缚态波函数在 $r \in (0, \infty)$ 区间的节点数，这些节点位置也对应径向激发态。非相对论两体问题薛定格方程的导出波函数 $y_{n,l}(r)$ 应当具有如下归一化条件：

上面方程可以写为更方便处理的形式：

$$y_{n,l}''(r) = [V_{\text{eff}}(r) - \varepsilon_{n,l}] y_{n,l}(r) ,$$

其中 $V_{\text{eff}}(r) = 2\mu V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}$ 为有效势。对应的标度能量本征值定义为：

$$\varepsilon_{n,l} \equiv 2\mu E_{n,l} .$$

讨论：为了使能量本征值 E 有下界，势函数 $V(r)$ 至少应满足如下条件： $r^2 V(r)$ 要是解析、非奇异的函数（即 $V(r)$ 要比 $-1/r^2$ 的奇异性小）。

微分方程可归一化的通解可以用如下的展开形式给出： $y(r) \propto r^{l+1} [1 + O(r)]$ 。

因此，未归一化的波函数 $y(r)$ 在 $r \rightarrow 0$ 时的渐近值为： $\lim_{r \rightarrow 0} y(r) = r^{l+1}$ 。

● 归一化条件要求：波函数在 $r \rightarrow \infty$ 时， $y(r) \rightarrow 0$ 。

● 定义的 ε 的值由低至高变化，进行一次渐近行为的扫描，在其中寻找在 $r \rightarrow \infty$ 时，满足 $y(r) \rightarrow 0$ 条件的 ε 值。

● 我们不失一般性地假定在原点附近 y 为正值，即 $y(0+) \geq 0$ 。分析得到导出波函数 $y(r)$ 的渐进行为如下：

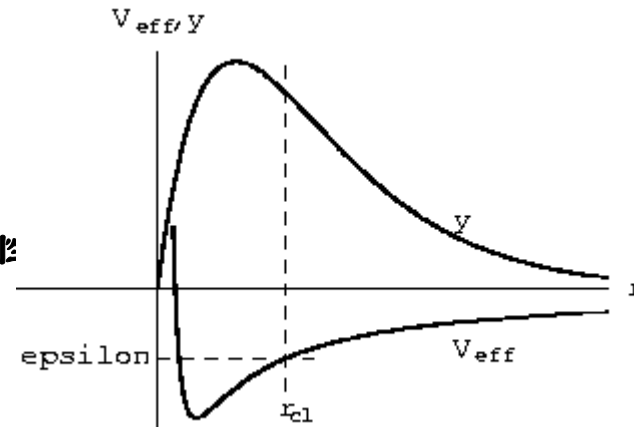
- (1) 对于足够小的 ε , $V_{\text{eff}} - \varepsilon$ 显然为正, 故当 $r \rightarrow \infty$ 时, $y(r) \rightarrow +\infty$ 。
- (2) ε 值增大, $y(r)$ 在 $r \rightarrow \infty$ 时的发散程度应当减弱。
- (3) ε 值继续增大, 在 r 的某些取值范围内 $V_{\text{eff}} - \varepsilon$ 变为负值。如果这个范围足够大, 则有可能在 ε 取某个值时, 使得当 $r \rightarrow \infty$, $y(r) \rightarrow 0$ (见图 8.3.1)。这就找到了在给定 l 值时的最低束缚态本征能量 $E_{0,l}$ 的值。
- (4) ε 值继续增大, $y(r)$ 将会在某处跨越 0 值, 并且具有 $r \rightarrow \infty$ 时, $y(r) \rightarrow -\infty$ 的渐进性质。
- (5) 进一步增大 ε , 对于某个特定的 ε 值, 当 $r \rightarrow \infty$ 时, $y(r) \rightarrow 0-$, 则第一径向激发态能量本征值 $E_{1,l}$ 可以确定下来。

我们将该扫描计算流程具体总结如下: 微分方程的积分从原点开始。如果势函数在原点奇异的时候, 则从距离原点很近的一点 $r = \delta$ 开始。考虑到边界条件:

$$\begin{aligned} y(\delta) &= \delta^{l+1} \\ y'(\delta) &= (l+1)\delta^l \end{aligned} \quad , \quad (8.3.5)$$

首先，我们注意到存在一个经典的转折点 r_{cl} ，使得对所有的 $r > r_{cl}$ ，我们有 $V_{eff}(r) > \varepsilon_{n,l}$ ，其中 r_{cl} 为满足方程 $V_{eff}(r) = \varepsilon_{n,l}$ 的最大 r 值。第二，我们还需注意对于所有 $r > r_{cl}$ ， $\text{sign}[y''(r)] = \text{sign}[y(r)]$ 。这意味着波函数为正(负)值的时候，其曲线呈凹(凸)特性。因此对于任意点 $r_> > r_{cl}$ ， $y(r_>) > 0$ 和 $y'(r_>) > 0$ ，则意味着 $y(r) \rightarrow +\infty$ (对 $r \rightarrow \infty$)；而 $y(r_>) < 0$ 和 $y'(r_>) < 0$ ，则意味着 $y(r) \rightarrow -\infty$ (对 $r \rightarrow \infty$)。显然在这两种情况下积分过程均可以终止。

有效势 V_{eff} 与导出基态波函数 $y(r)$ 的数值特性



在积分过程中激发态等级可以通过本征值理论确定。即激发态波函数的节点数等于其激发等级数。

由此可以知道基态波函数无节点($n=0$), 而对第 n 级激发态波函数则对应着 n 个节点数($n=1,2,\dots$)。

为了能定位一个所需的束缚态, 可以为能量 ε 确定一个范围, 即确定大致的下界 E_L 和上界 E_U 。

数值积分采用龙格-库塔(Runge-Kutta)方法, 由 $r = \delta$ 开始积分, 对应的边界条件采用(8.3.5)式, 初值取算术平均值 $(E_L + E_U)/2$ 。积分过程中在预先设定的区间 (E_L, E_U) 内测定节点数 n , 并且在迭代的过程中适当的改变 E_L 和 E_U 的值。如果 E_L 与 E_U 取值不当, ε 将趋近于与真实的能量本征值最接近的一个边界。而为了使 (E_L, E_U) 包含能量本征值, 就需将对应的边界值更改。

Schroedinger.m 通过如下方法确定 r_{cl} :

在 r 最大的点附近找到有效势的局部最小值, 为便于数值计算, 程序给极小值加上一个步长 h , 以此为设定一个上界。当然, 对于某些势函数, 如某些保守场的势, 局部极小值可以以解析的形式给出。对于所有的纯幂次势, 这个局部极小值可以得到解析的表示。例如, 对于一些球对称的势函数 $V(r) = r^k$, $k \in N$, 其有效势的

极小值存在于
$$r = \left[\frac{l(l+1)}{k\mu} \right]^{1/(k+2)},$$

对更加复杂的势函数, 局部极小值则需用数值方法给出。这一工作是由 xwmill 模块完成; 后面的宗量包括电子的激发态量子数 l , 用于数值积分的步长 h , 还有包括搜索最小值的步长 weit 以及搜寻时的初值 xrat。其中 l, h 是在调用 schroe 的过程中获得的, 过程在调用 xwmill 时, 将 weit 值定为 0.5, xrat 值猜测为 20 (这两个值在搜寻极小值时是相当好的起始值, 但也可以在程序模块中 schroe 中加以更改)。Schroedinger.m 程序中采用的是 4 阶的

龙格-库塔方法. 对于程序中的微分方程： $y''_{n,l}(r) = [V_{eff}(r) - \varepsilon_{n,l}]y_{n,l}(r)$ ，**则将其变换为：** $z' = f(x, y, z)$ ， $y' = z$ ， $y(a) = y_0$ ， $z(a) = y'(a) = z_0$ **进行数值积分。**

输入： schroedinger.m

输出： 定义及使用方法说明

输入： 势函数 $v1[r_]$ (例如，谐振子势， $v1[r_] := r^2$)

输入： schroe[0, 20, 2, 1, 0.01, 1, 1]

上述变量分别对应：

能量本征值 ε 下限值 E_L 在选择能量单位下的数值 ($=0$);

能量本征值 ε 上限值 E_U 在选择能量单位下的数值 ($=20$);

节点数 n = 径向激发态数 ($=2$);

角动量量子数 l = 轨道激发态 ($=1$);

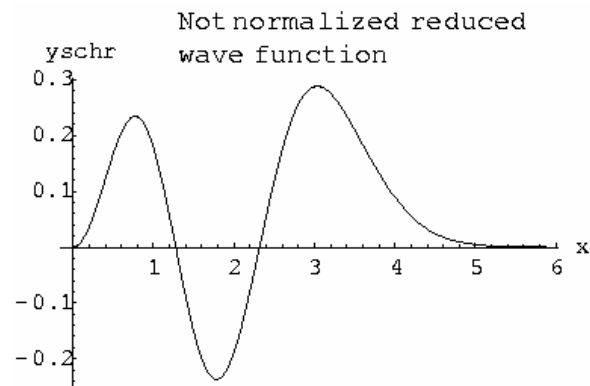
积分步长 h 在选择能量单位下的数值 ($=0.01$);

质量 m_1, m_2 在选择能量单位下的数值 ($m_1 = m_2 = 1$)。

输出： 能量本征值在选择能量单位下的数值, 等等。

$E = 13.$, $L = 1$, $N = 2$, Integration steps = 589, $h = 0.01$, $del = 0.001$, $el = 0$, $eu = 20$,
 Largest x , upper integration limit, $XMAX = 5.881$,
 Smallest x , lower integration limit, $XMIN = del = 0.001$,
 The not normalized reduced wave function is $yschr[x]$.
 The normalization factor is given by:
 $1/N \text{Integrate}[yschr[x]^2, \{x, del, xmax\}]$

上面则是示例产生的一个数值结果的输出。如果需要，还可以给出未归一化的导出波函数 y （程序中称为 $yachr$ ）随 r （程序中称为 x ）变化的图。其结果如下：



导出波函数 y （图中称为 $yachr$ ）随 r （ x ）变化图

我们现在可以用 Mathematica 内部函数计算诸如矩阵元 $\langle 1/r \rangle$ 。

Input : `NIntegrate[1/r yschr[r]^2, {r, del, xmax}] /`
`NIntegrate[yschr[r]^2, {r, del, xmax}]`

Output : 0.625982

n	ℓ	$E_{n,\ell}[\text{GeV}]$	$\langle 1/r \rangle [\text{GeV}]$	$\langle 1/r^2 \rangle [\text{GeV}^2]$	$[y(0)]^2 [\text{GeV}]$	$[y'(0)]^2 [\text{GeV}^3]$
0	0	2.999997	1.1284	1.9977	0.0000	2.2567
1	0	7.000003	0.9403	1.9966	0.0000	3.3851
2	0	10.999999	0.8369	1.9958	0.0000	4.2314
0	1	4.999995	0.7523	0.6667	0.0000	0.0000
1	1	9.000001	0.6770	0.6667	0.0000	0.0000
2	1	12.999997	0.6260	0.6667	0.0000	0.0000
0	2	7.000003	0.6018	0.4000	0.0000	0.0000
1	2	10.999999	0.5588	0.4000	0.0000	0.0000
2	2	15.000005	0.5266	0.4000	0.0000	0.0000

简谐振子势 $V(r)=r^2$ 下的能量本征值，在原点的动量、波函数和误差。选择的参数为 $m_1=m_2=1\text{GeV}$ ， $\hbar=0.01\text{GeV}^{-1}$ ， $E_L=0\text{GeV}$ 和 $E_U=20\text{GeV}$ 。准确的能量为 $E_{n,l}=4n+2l+3\text{GeV}$ ；计算值的误差仅仅是由于我们数值计算方法的精度与 $\hbar$ 的关联上。

State	1S		2S		2P	
h [GeV ⁻¹]	0.1	0.05	0.1	0.05	0.1	0.05
$-E_{n,\ell}$ [GeV]	0.249973 (0.25)	0.249996	0.062496 (0.0625)	0.062496	0.062504 (0.0625)	0.062504
$\langle 1/r \rangle$ [GeV]	0.4999 (0.5)	0.4999	0.1250 (0.125)	0.1250	0.1250 (0.125)	0.1250
$\langle 1/r^2 \rangle$ [GeV ²]	0.4947 (0.5)	0.4974	0.06185 (0.0625)	0.06221	0.02082 (0.02083)	0.02082
$[y'(0)]^2$ [GeV ³]	0.4897 (0.5)	0.4949	0.06123 (0.0625)	0.06190	$2 \cdot 10^{-6}$ (0)	$4 \cdot 10^{-7}$

库仑势 $V(r)=1/r$ 下的能量本征值，动量、在原点的 1S，2S 和 2P 态的波函数和误差等作为步长 h 的函数变化表。起点 δ 由 $\delta = h/10$ 计算得到。选择的参数数值为 $m_1 = m_2 = 1\text{GeV}$ ， $h = 0.01\text{GeV}^{-1}$ ， $E_L = -1\text{GeV}$ 和 $E_U = +1\text{GeV}$ 。对应的准确结果在括号内给出

The End