第九章近似方法

量子力学中，大部分定态问题都难以精确求解。比如一个很简单的强关联模型，*Hubbard*或者*t-J*模型，甚至更简单的*Heisenberg*模型，都无法精确求解。这些问题的求解一般有种方法，一是发展各种近似理论，如*Slave-boson*，*Gutzwiller projection approximation*等(都是平均场(Mean-field approximation)做法)，然后考虑各种修正；另一种是发展纯的数值方法，如严格对角化(*ED*)，量子*Monte Carlo* (*QMC*)，密度矩阵重整化群(*DMRG*)等。本章介绍两种常用的方法，微扰论和变分法。

9.1 不含时微扰

本节介绍定态微扰论近似方法。我们需要求解的本征值方程为

$$\hat{H}\left|\psi_n\right\rangle = E_n\left|\psi_n\right\rangle$$

但由于$\hat{H}$的复杂性，无法直接精确求解。此方法的要旨是，从一般难以精确求解的哈密顿量$\hat{H}$中，划分出其中数值较小(可用估值办法或视其中所含参数的数值)而又妨碍对$\hat{H}$精确求解的部分$\hat{H}'$，即有

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \qquad \hat{H}' \ll \hat{H}_0$$

划分出$\hat{H}'$后剩下的$\hat{H}_0$应能精确求解。

$$\hat{H}_0\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)}\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$$

其中上标"$^{(0)}$"表示未受扰动的结果(或者说零级近似的结果)。然后，以$\hat{H}_0$的本征态和本征值为基础和出发点，即选取H_0表象，以逐级近似的方法考虑$\hat{H}'$的影响，给出$\hat{H}$的本征态和本征值的逐级近似解。方法区分为非简并微扰论和简并微扰论两部分。

由于$\hat{H}'$是小量，写为$\hat{H}' = \lambda\hat{W}$，其中$\lambda \ll 1$。我们将$\left|\psi_n\right\rangle$按基矢$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$展开

$$\left|\psi_n\right\rangle = \sum_k C_{kn}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \qquad C_{kn} = \left\langle\psi_k^{(0)}|\psi_n\right\rangle$$

代入薛定谔方程有

$$\begin{aligned}
\left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{W}\right)\sum_k C_{kn}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle &= E_n\sum_k C_{kn}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \\
\lambda\sum_k C_{kn}\hat{W}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle &= \sum_k C_{kn}\left(E_n - E_k^{(0)}\right)\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \\
\lambda\sum_k C_{kn}\left\langle\psi_m^{(0)}\right|\hat{W}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle &= \sum_k C_{kn}\left(E_n - E_k^{(0)}\right)\left\langle\psi_m^{(0)}|\psi_k^{(0)}\right\rangle
\end{aligned}$$

$$\lambda \sum_k C_{kn} W_{mk} = C_{mn} \left(E_n - E_m^{(0)} \right)$$

其中$W_{mk} = \left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{W} \middle| \psi_k^{(0)} \right\rangle$，或者也可直接用$H'_{mk} = \left\langle \psi_m^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_k^{(0)} \right\rangle$。因此上式实际上是给出了关于系数$C_{mn}$的一线性联立方程组。到目前为止，我们并没有作任何近似，上面的表达式都是严格成立的。

1. 非简并微扰

对能级和波函数作近似，假定可以按照小量λ展开

$$\begin{aligned} C_{kn} &= C_{kn}^{(0)} + \lambda C_{kn}^{(1)} + \lambda^2 C_{kn}^{(2)} + ... \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + ... \end{aligned}$$

代入上面的联立方程组得到，并且注意到$C_{kn}^{(0)} = \delta_{kn}$

$$\begin{aligned} & \left(C_{mn}^{(0)} + \lambda C_{mn}^{(1)} + \lambda^2 C_{mn}^{(2)} + ... \right) \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + ... - E_m^{(0)} \right) \\ = & \ \lambda \sum_k \left(C_{kn}^{(0)} + \lambda C_{kn}^{(1)} + \lambda^2 C_{kn}^{(2)} + ... \right) W_{mk} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 0 = & \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) C_{mn}^{(0)} + \lambda \left[C_{mn}^{(0)} E_n^{(1)} + C_{mn}^{(1)} \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) - \sum_k C_{kn}^{(0)} W_{mk} \right] \\ & + \lambda^2 \left[C_{mn}^{(0)} E_n^{(2)} + C_{mn}^{(1)} E_n^{(1)} + C_{mn}^{(2)} \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) - \sum_k C_{kn}^{(1)} W_{mk} \right] + ... \end{aligned}$$

1) λ的零级近似解

$$\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) \delta_{mn} = 0$$

显然，回到H_0的解。

2) λ的一级近似解

$$0 = C_{mn}^{(0)} E_n^{(1)} + C_{mn}^{(1)} \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) - \sum_k C_{kn}^{(0)} W_{mk} = \delta_{mn} E_n^{(1)} + C_{mn}^{(1)} \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) - \sum_k \delta_{kn} W_{mk}$$

$$\delta_{mn} E_n^{(1)} + C_{mn}^{(1)} \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) - W_{mn} = 0$$

当$m \neq n$时，

$$C_{mn}^{(1)} = \frac{W_{mn}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)}$$

当$m = n$时，

$$E_n^{(1)} = W_{nn}$$

即

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda W_{nn} = E_n^{(0)} + H'_{nn} \\ |\psi_n\rangle &= \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda \sum_m C_{mn}^{(1)} \left| \psi_m^{(0)} \right\rangle = \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} C_{mn}^{(1)} \left| \psi_m^{(0)} \right\rangle + \lambda C_{nn}^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \end{aligned}$$

现在还剩下$C_{nn}^{(1)}$未知，其选择要求在不含有一级小项的情形下$|\psi_n\rangle$能够归一化，即

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \left\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left(C_{nn}^{(1)} + cc\right) + O\left(\lambda^2\right) = 1 + O\left(\lambda^2\right)$$

可见$C_{nn}^{(1)}$只能是个纯虚数，因此作为相因子，可以吸收掉，或者直接取为0。因此一级修正的结果表述为

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + H'_{nn} \\ |\psi_n\rangle &= \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \sum_m{}' \frac{H'_{mn}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \end{aligned}$$

其中$H'_{mn} = \left\langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\right\rangle$，求和号上的撇记号表示求和指标$m \neq n$。结果表明，在一级微扰论近似下，能量的修正为$H'$在未受扰动态$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$中的平均值，而扰动后的态$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$中别的态$\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle(m \neq n)$也将混入，混入的几率幅正比于$H'$在$\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle$中的平均值、反比于$\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)$值。能量和波函数的公式都只准确到含$\lambda$ 的一阶项。我们可以从另一个角度理解非简并微扰。由于微扰，不同能级的波函数发生交叠，因此新的波函数中就包含了其它能级的波函数成分，一方面，扰动越强，交叠可能越大，别的能级成分进入$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$的可能越大；另一方面，能级的能量差越大，交叠的可能就小。而自己本身能级的微扰，扰动波函数最多改变位相，只要调整原来波函数的位相就可以了。

当然，上面的结果都是建立在扰动不大，即所谓微扰的基础上的。否则，扰动后的波函数用未微扰基矢展开就不是一个合适的方法。也就是说，对$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$的一级修正的$\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle$态前的系数的数值应当远小于1。于是，可得上述微扰论适用的条件

$$|H'_{mn}| \ll \left|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right|$$

也就是说，扰动(实际表示不同能级的跃迁)要远小于能级差，能级仍旧能够基本保持原来的值，只是在原来值附近发生小的移动。从这里可以看出为什么要求非简并，实际如果是简并态，微扰作用会使原来的简并态发生去简并，能级分裂，波函数重组。

最后，我们给出力学量$\hat{F}$矩阵元的一级近似

$$\begin{aligned} F_{nm} &= \left\langle\psi_n|\hat{F}|\psi_m\right\rangle = \left(\left\langle\psi_n^{(0)}\right| + \sum_{k\neq n}{}' \frac{(H'_{kn})^*}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)}\left\langle\psi_k^{(0)}\right|\right)\hat{F}\left(\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle + \sum_{k'\neq m}{}' \frac{H'_{k'm}}{\left(E_m^{(0)} - E_{k'}^{(0)}\right)}\left|\psi_{k'}^{(0)}\right\rangle\right) \\ &= F_{nm}^{(0)} + \sum_{k\neq n}{}' \frac{H'_{nk}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} F_{km}^{(0)} + \sum_{k\neq m}{}' \frac{H'_{km}}{\left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} F_{nk}^{(0)} \end{aligned}$$

3) λ的二级近似解

通常，波函数只作到一阶微扰近似，但有时能量的一阶修正为零或很小(如禁戒等情况)，这时能量要作到二阶微扰近似。即要求

$$\delta_{mn}E_n^{(2)} + C_{mn}^{(1)}E_n^{(1)} + C_{mn}^{(2)}\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right) - \sum_k C_{kn}^{(1)}W_{mk} = 0$$

当$m = n$时，

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_k C_{kn}^{(1)}W_{nk} - C_{nn}^{(1)}E_n^{(1)} = \sum_k \frac{W_{kn}W_{nk}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} - \frac{W_{nn}W_{nn}}{\left(E_n^{(0)} - E_n^{(0)}\right)} \\ &= \sum_k{}' \frac{W_{kn}W_{nk}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} = \sum_k{}' \frac{|W_{nk}|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} \end{aligned}$$

即得到能量修正到二级的结果

$$\begin{aligned} E &= E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2 E_n^{(2)} \\ &= E_n^{(0)}+H'_{nn}+\sum_k{}' \frac{\left|H'_{nk}\right|^2}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)} \end{aligned}$$

注意，基态能级的二阶修正必定是负值(Why？从上式看得很明白)。

Example 1: 用微扰办法求解一维谐振子，$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，$H'=\frac{1}{2}\epsilon m\omega^2x^2$，$\epsilon\ll 1$。

*解：*显然，此问题是可以严格解的，只要令$\omega'=\sqrt{1+\epsilon}\omega$即可，对应的能级和波函数分别为

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\sqrt{1+\epsilon} \\ |\psi_n\rangle &= \left(\frac{m\omega'}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2} H_n\left(\xi'\right)e^{-\xi'^2/2} \end{aligned}$$

其中$\xi=\alpha x$，$\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$，$\alpha'=\sqrt{m\omega'/\hbar}=\sqrt{m\omega/\hbar}\left(1+\epsilon\right)^{1/4}$，$\xi'=\alpha' x=\left(1+\epsilon\right)^{1/4}\xi$。

现在用微扰的办法求，我们知道

$$\xi=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(A+A^+\right) \qquad x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(A+A^+\right)$$

$$H'=\frac{1}{2}\epsilon m\omega^2x^2=\frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega\left(\alpha x\right)^2=\frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega\xi^2=\frac{1}{4}\epsilon\hbar\omega\left(A^2+A^{+2}+2A^+A+1\right)$$

所以，微扰矩阵元为

$$\begin{aligned} H'_{kn} &= \langle k|H'|n\rangle=\frac{1}{4}\epsilon\hbar\omega\langle k|\left(A^2+A^{+2}+2A^+A+1\right)|n\rangle \\ &= \frac{1}{4}\epsilon\hbar\omega\left[\sqrt{\left(n+1\right)\left(n+2\right)}\delta_{n+2,k}+\sqrt{n\left(n-1\right)}\delta_{n-2,k}+\left(2n+1\right)\delta_{n,k}\right] \end{aligned}$$

一级修正:

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}=\frac{1}{4}\epsilon\hbar\omega\langle n|\left(A^2+A^{+2}+2A^+A+1\right)|n\rangle=\frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle &= \sum_k{}' \frac{H'_{kn}}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \\ &= \frac{1}{4}\epsilon\hbar\omega\sum_k{}' \frac{\sqrt{\left(n+1\right)\left(n+2\right)}\delta_{n+2,k}+\sqrt{n\left(n-1\right)}\delta_{n-2,k}}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \\ &= \frac{\epsilon}{8}\left[\sqrt{n\left(n-1\right)}\left|\psi_{n-2}^{(0)}\right\rangle-\sqrt{\left(n+1\right)\left(n+2\right)}\left|\psi_{n+2}^{(0)}\right\rangle\right] \end{aligned}$$

可见，以及近似下的能量和波函数表示为

$$\begin{aligned} E &= E_n^{(0)}+E_n^{(1)}=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)=\left(1+\frac{1}{2}\epsilon\right)\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \\ |\psi_n\rangle &= \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle+\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle=\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle+\frac{\epsilon}{8}\left[\sqrt{n\left(n-1\right)}\left|\psi_{n-2}^{(0)}\right\rangle-\sqrt{\left(n+1\right)\left(n+2\right)}\left|\psi_{n+2}^{(0)}\right\rangle\right] \end{aligned}$$

这种标记意味着当$n<0$时，$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle=0$。

二级近似

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_k{}' \frac{\left|H'_{nk}\right|^2}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)} \\
&= \frac{\epsilon^2\hbar^2\omega^2}{16}\sum_k{}' \frac{\left[\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n+2,k}+\sqrt{n(n-1)}\delta_{n-2,k}+(2n+1)\delta_{n,k}\right]^2}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)} \\
&= \frac{\epsilon^2\hbar^2\omega^2}{16}\left[\frac{(n+1)(n+2)}{-2\hbar\omega}+\frac{n(n-1)}{2\hbar\omega}\right] = -\frac{\epsilon^2\hbar\omega}{4}\left(n+\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

我们可以对比严格计算的结果，把能量展开到二级小量

$$E=\left(1+\frac{1}{2}\epsilon-\frac{1}{4}\epsilon^2\right)\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

把波函数展开到一级小量

$$\begin{aligned}
\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle &= \epsilon\frac{\partial}{\partial\epsilon}\left|\psi_n\right\rangle\Big|_{\epsilon=0} = \epsilon\left\{\frac{\partial}{\partial\epsilon}\left[\left(\frac{m\omega'}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}H_n(\xi')\,e^{-\xi'^2/2}\right]\right\}\Big|_{\epsilon=0} \\
&= \epsilon\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}\left[\frac{1}{8}H_n(\xi)+\frac{1}{4}\xi H_n'(\xi)-H_n(\xi)\frac{\xi^2}{4}\right]e^{-\xi^2/2} \\
&= \epsilon\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}\left[\frac{1}{8}H_n(\xi)+\frac{n}{2}\xi H_{n-1}-H_n(\xi)\frac{\xi^2}{4}\right]e^{-\xi^2/2} \\
&= \epsilon\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}\left\{\begin{array}{c}\frac{1}{8}H_n(\xi)+\frac{n}{2}\left[\frac{H_n}{2}+(n-1)H_{n-2}\right] \\ -\frac{1}{4}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}H_{n+2}+(n+1)H_n\right)+n\left(\frac{1}{2}H_n+(n-1)H_{n-2}\right)\right]\end{array}\right\}e^{-\xi^2/2} \\
&= \epsilon\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}\left\{\frac{n(n-1)}{4}H_{n-2}-\frac{1}{16}H_{n+2}\right\}e^{-\xi^2/2} \\
&= \frac{1}{8}\epsilon\left(\sqrt{n(n-1)}\left|\psi_{n-2}\right\rangle-\sqrt{(n+1)(n+2)}\left|\psi_{n+2}^{(0)}\right\rangle\right)
\end{aligned}$$

其中用到一维谐振子的递推公式

$$\frac{dH_n}{d\xi}=2nH_{n-1}\qquad 2\xi H_n=H_{n+1}+2nH_{n-1}$$

两者的结果显然是一致的。

Example 2: 用微扰办法求解一维谐振子，$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，$V=\epsilon x$，$\epsilon\ll 1$。

*解：*先做微扰解，$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(A+A^+\right)$，$V=\epsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(A+A^+\right)=\lambda\left(A+A^+\right)$，其中$\lambda=\epsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\ll 1$。

$$V_{kn}=\lambda\left\langle k\right|\left(A+A^+\right)\left|n\right\rangle=\lambda\left(\sqrt{n}\delta_{n-1,k}+\sqrt{n+1}\delta_{n+1,k}\right)$$

$$\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= V_{nn}=0 \\
E_n^{(2)} &= \sum_k{}'\frac{\left|V_{nk}\right|^2}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}=\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}(-n+n+1)=\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}
\end{aligned}$$

$$\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle=\sum_k{}'\frac{V_{kn}}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle=\frac{\lambda}{\hbar\omega}\left(\sqrt{n}\left|\psi_{n-1}^{(0)}\right\rangle-\sqrt{n+1}\left|\psi_{n+1}^{(0)}\right\rangle\right)$$

这种标记意味着当$n<0$时，$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle=0$。

严格解：

$$\begin{aligned}H &= \frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2+\epsilon x=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(x+\frac{\epsilon}{m\omega^2}\right)^2-\frac{\epsilon^2}{2m\omega^2}\\ &= \frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(x+\frac{\lambda}{\omega}\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}\right)^2-\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\end{aligned}$$

因此解为

$$\begin{aligned}E &= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\\ |\psi_n\rangle &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}H_n\left(\xi'\right)e^{-\xi'^2/2}\end{aligned}$$

其中$\xi'=\alpha x'=\alpha\left(x+\frac{\lambda}{\omega}\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}\right)=\xi+\sqrt{2}\frac{\lambda}{\hbar\omega}$，展开到一级近似为

$$\begin{aligned}\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle &= \lambda\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}\left.\left\{\frac{\partial}{\partial\lambda}\left[H_n\left(\xi'\right)e^{-\xi'^2/2}\right]\right\}\right|_{\lambda=0}\\ &= \lambda\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}\sqrt{2}\frac{1}{\hbar\omega}\left[H_n'-\xi H_n\right]e^{-\xi^2/2}\\ &= \frac{\lambda}{\hbar\omega}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}\sqrt{2}\left(nH_{n-1}-\frac{1}{2}H_{n+1}\right)e^{-\xi^2/2}\\ &= \frac{\lambda}{\hbar\omega}\left(\sqrt{n}\left|\psi_{n-1}^{(0)}\right\rangle-\sqrt{n+1}\left|\psi_{n+1}^{(0)}\right\rangle\right)\end{aligned}$$

2. 简并微扰

从前面非简并微扰论的结果知道，如果出现简并的情况，能量的二级修正和波函数的一级近似都会出现发散的情况，显然是非物理的。因此对于简并的情况，我们要另作处理。实际上，即使不是简并态，但如果$|H'_{mn}|\ll\left|E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\right|$这个条件不能满足，非简并微扰论的结果也会出现问题。

由于微扰，原来简并的能级将会发生分裂，出现去简并的情况。当然，微扰未必能够去除所有的简并。如果出现去简并的情况，我们要找的是分裂后的能级和波函数。

现在，假定扰动的态为H_0的第n个能级，其简并度为f_n，下面构造关于这种存在简并情况的一阶微扰论，整个办法的核心部分是在f_n个简并态子空间中，写出微扰项的厄米$f_n\times f_n$维矩阵，将它对角化找出它的f_n个本征值和本征态。这f_n个本征值即为一阶近似的下的能量修正，而这f_n个本征态将构成零级近似态矢。

记H_0的第n个能级简并的量子数为$\nu\,(\nu=1,2,...,f_n)$，为了清楚起见，先假定其它能级不简并。实际上其它能级是否简并不影响能量的一级近似和波函数的零级近似。未微扰前

$$H_0\left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle=E_n^{(0)}\left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle$$

正交归一条件为

$$\left\langle(n\mu)^{(0)}\,|\,(n\nu)^{(0)}\right\rangle=\delta_{\mu\nu}\qquad\qquad \left\langle m^{(0)}|\,(n\nu)^{(0)}\right\rangle=0\quad(m\neq n)$$

完备性条件为

$$\sum_{\nu}\left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle\left\langle(n\nu)^{(0)}\right|+\sum_{m\neq n}\left|m^{(0)}\right\rangle\left\langle m^{(0)}\right|=1$$

微扰后的能量本征值方程为

$$\begin{aligned}H\left|n\right\rangle &= \left(H_0+\lambda W\right)\left|n\right\rangle=E_n\left|n\right\rangle\\ \left|n\right\rangle &= \sum_{\nu}C_{n\nu}\left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle+\sum_{m\neq n}C_m\left|m^{(0)}\right\rangle\end{aligned}$$

其中$|n\rangle$是微扰后的本征函数。上式右边第一个求和是在简并态子空间内进行，而第二个求和是对此子空间之外所有态进行。$C_{n\nu}=\left\langle(n\nu)^{(0)}\left|n\right.\right\rangle$，$C_m=\langle m^{(0)}|n\rangle$，是$|n\rangle$态在$H_0$表象中的表示。

左乘$\left\langle(n\mu)^{(0)}\right|$

$$\begin{aligned}E_n\left\langle(n\mu)^{(0)}\left|n\right.\right\rangle &= \left\langle(n\mu)^{(0)}\right|\left(H_0+\lambda W\right)\left|n\right\rangle=\sum_{\nu}\left\langle(n\mu)^{(0)}\right|\left(H_0+\lambda W\right)\left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle\left\langle(n\nu)^{(0)}\left|n\right.\right\rangle\\ &\quad+\sum_{m\neq n}\left\langle(n\mu)^{(0)}\right|\left(H_0+\lambda W\right)\left|m^{(0)}\right\rangle\left\langle m^{(0)}|n\right\rangle\\ E_nC_{n\mu} &= E_n^{(0)}C_{n\mu}+\lambda\sum_{\nu}W_{n\mu,n\nu}C_{n\nu}+\lambda\sum_{m\neq n}W_{n\mu,m}C_m\end{aligned}$$

其中$W_{n\mu,n\nu}=\left\langle(n\mu)^{(0)}\left|W\right|(n\nu)^{(0)}\right\rangle$，$W_{n\mu,m}=\left\langle m^{(0)}|W|\left(n\nu\right)^{(0)}\right\rangle$。

左乘$\langle m^{(0)}|$

$$\begin{aligned}E_n\left\langle m^{(0)}|n\right\rangle &= \left\langle m^{(0)}\right|\left(H_0+\lambda W\right)\left|n\right\rangle=\sum_{\nu}\left\langle m^{(0)}\right|\left(H_0+\lambda W\right)\left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle\left\langle(n\nu)^{(0)}\left|n\right.\right\rangle\\ &\quad+\sum_{k\neq n}\left\langle m^{(0)}\right|\left(H_0+\lambda W\right)\left|k^{(0)}\right\rangle\left\langle k^{(0)}|n\right\rangle\\ E_nC_m &= E_m^{(0)}C_m+\lambda\sum_{\nu}W_{m,n\nu}C_{n\nu}+\lambda\sum_{k\neq n}W_{mk}C_k\end{aligned}$$

因此同样区分简并子空间内和子空间外后，得到

$$\begin{aligned}\left(E_n-E_n^{(0)}\right)C_{n\mu} &= \lambda\sum_{\nu}W_{n\mu,n\nu}C_{n\nu}+\lambda\sum_{m\neq n}W_{n\mu,m}C_m\\ \left(E_n-E_m^{(0)}\right)C_m &= \lambda\sum_{\nu}W_{m,n\nu}C_{n\nu}+\lambda\sum_{k\neq n}W_{mk}C_k\end{aligned}$$

现在用微扰方程求解上式，令

$$\begin{aligned}E_n &= E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2E_n^{(2)}+...\\ C_{n\mu} &= C_{n\mu}^{(0)}+\lambda C_{n\mu}^{(1)}+\lambda^2C_{n\mu}^{(2)}+...\end{aligned}$$

1) 波函数零级近似，能量一级近似

$$\begin{aligned}E_n &= E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}\\ C_{n\mu} &= C_{n\mu}^{(0)}\qquad C_m=0\end{aligned}$$

代回方程式得到

$$|n\rangle = \sum_{\nu} C_{n\nu}^{(0)} \left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle$$

$$E_n^{(1)} C_{n\mu}^{(0)} = \sum_{\nu} W_{n\mu,n\nu} C_{n\nu}^{(0)}$$

这里关于未知能移$E_n^{(1)}$和未知矢量的方程是f_n个齐次联立代数方程组，实质是微扰H'在这个f_n维简并子空间中的本征方程：本征值为$E_n^{(1)}$，本征矢量为$\left\{C_\nu^{(0)},\ (\nu = 1, 2, ..., f_n)\right\}$。上面本征方程若有非零解$\left\{C_\nu^{(0)}\right\}$，系数行列式必须为零，由此即求得本征值$E_n^{(1)}$的方程：

$$\sum_{\nu=1}^{f_n} \left(E_n^{(1)} \delta_{\mu\nu} - W_{n\mu,n\nu}\right) C_{n\nu}^{(0)} = 0$$

方程有解的条件是

$$\det \left|E_n^{(1)} \delta_{\mu\nu} - W_{\mu\nu}\right| = 0$$

这个方程也常称之为关于简并能级一阶修正量的久期方程。由于矩阵元全体组成了f_n维的厄米矩阵，它有f_n个本征值均是实数，每一个本征值对应一个本征矢，重新记为$E_{n\mu}^{(1)}$和$|n\mu\rangle$ $(\mu = 1, 2, ..., f_n)$，若它们彼此均不相等，说明在H'扰动下n能级f_n重简并完全被解除，否则只是部分地被解除。

因此在这个近似下，波函数和能量为

$$\begin{aligned} |n\mu\rangle &= \sum_{\nu} C_{n\mu\nu}^{(0)} \left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle \\ E_n &= E_n^{(0)} + E_{n\mu}^{(1)} \end{aligned}$$

其中$E_{n\mu}^{(1)}$和$C_{n\mu\nu}^{(0)}$由本征值方程决定

$$\sum_{\nu=1}^{f_n} \left(E_n^{(1)} \delta_{\mu\nu} - H'_{\mu\nu}\right) C_{n\nu}^{(0)} = 0$$

省略n指标

$$\sum_{\nu=1}^{f_n} \left(E^{(1)} \delta_{\mu\nu} - H'_{\mu\nu}\right) C_{\nu}^{(0)} = 0$$

可见，对于简并微扰的波函数零级近似和能量一级近似，实际上是在f_n简并子空间中求解H'的本征值问题，通过通过对H'对角化求出能级的一级修正和零级近似波函数。

Example 3: 氢原子的*Stark*效应：把原子置于外电场中，则它发射的光谱线会发生分裂，此即*Stark*效应。计算氢原子光谱的*Lyman*线系的第一条谱线的*Stark*分裂。

*解：*在不考虑自旋的时候，氢原子基态$(n = 1)$是非简并的，但第一激发态$(n = 2)$是四重简并的。对应的能量为$E_2 = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{2^2}$。对应的四个零级波函数为$|2lm\rangle$，按顺序写为

$$|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21\bar{1}\rangle$$

假定沿$z-$轴方向加均匀电场ε，则电子$(-e)$受到的相互作用为

$$H' = e\varepsilon z = e\varepsilon r\cos\theta \ll \frac{e^2}{a}$$

现在计算矩阵元$H'_{\mu\nu}$。由于H'关于z是奇宇称的，并且只与r和θ有关，所以不改变磁量子数m，因此不为零的矩阵元只有2个，即$H'_{200,210}$和$H'_{210,200}$。*[因为m不变，所以，$m=1$和$m=0$的态之间的跃迁是不允许的，同时$H'_{2lm,2lm}=\langle 2lm|H'|2lm\rangle=\int ||2lm\rangle|^2 H'd\tau$，其中$||2lm\rangle|^2$关于$z$是偶宇称的，所以这种积分的结果必为0。这表明这种微扰有如下的选择定则：$\Delta m=0$，$\Delta l=\pm1$，只有满足这种约束的跃迁才是允许的。书上直接给了公式*

$$\cos\theta Y_{lm}=\sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m}+\sqrt{\frac{l^2-m^2}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m}$$

]

$$\begin{aligned}
H'_{200,210} &= H'_{210,200}=e\varepsilon\langle 200|r\cos\theta|210\rangle \\
&= e\varepsilon\int\left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{1}{\sqrt{2}a^{3/2}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a}\right]r\cos\theta\left[\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}}\frac{r}{a}e^{-r/2a}\right]r^2\sin\theta d\theta d\varphi dr \\
&= \frac{e\varepsilon}{8a^4}\int r^4\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-r/a}dr\int\sin\theta\cos^2\theta d\theta=3ae\varepsilon
\end{aligned}$$

$[\int_0^\infty x^n e^{-x}dx=n!]$

因此，H'的本征值方程为

$$\begin{pmatrix} E^{(1)} & -3ae\varepsilon & 0 & 0 \\ -3ae\varepsilon & E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E^{(1)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1^{(0)} \\ C_2^{(0)} \\ C_3^{(0)} \\ C_4^{(0)} \end{pmatrix}=0$$

解得$E^{(1)}$为$3ae\varepsilon,-3ae\varepsilon,0,0$，对应的系数为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\0\end{pmatrix}\qquad\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\\0\\0\end{pmatrix}\qquad\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}\qquad\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

即零级近似的波函数和一级近似的能量分别为

$$\begin{array}{lll}
E_2=E_2^{(0)}(\text{二重}), & E_2^{(0)}+3ae\varepsilon, & E_2^{(0)}-3ae\varepsilon \\
|211\rangle,|21\bar{1}\rangle, & \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle+|210\rangle) & \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle-|210\rangle)
\end{array}$$

因此在电场作用下，原来四重简并的能级发生分裂，变成三个能级，能级简并度并没有完全解除。

我们可以直接利用对称性来判断结果是否合理，s轨道是球对称的，p轨道是"哑铃状"分布的，加上$z-$轴电场后，显然对于$|Y_{1\pm1}|^2$这两个情况，简并性并没有解除。

2) 波函数一级近似，能量二级近似

在一些情况下，由于选择定则的约束，第n能级各简并态之间的矩阵元都非常小(甚至为零)，这种情况下，我们需要作进一步近似，考虑子空间之外的矩阵元$H'_{m,n\nu}$。上面我们推导是曾经得到两个方程，其中第二个是考虑子空间外的修正

$$\left(E_n-E_m^{(0)}\right)C_m=\sum_\nu H'_{m,n\nu}C_{n\nu}+\sum_{k\neq n}H'_{mk}C_k$$

因为$C_m = \langle m^{(0)}|n\rangle$是一个小量，保留到一级小量，上式可以写成

$$\begin{aligned}\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right) C_m &= \sum_\nu H'_{m,n\nu} C_{n\nu} \\ C_m &= \sum_\nu \frac{H'_{m,n\nu}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} C_{n\nu}\end{aligned}$$

再加上子空间内的修正

$$\left(E_n - E_n^{(0)}\right) C_{n\mu} = \sum_\nu H'_{n\mu,n\nu} C_{n\nu} + \sum_{m\neq n} H'_{n\mu,m} C_m$$

$$\left(E_n - E_n^{(0)}\right) C_{n\mu} = \sum_\nu H'_{n\mu,n\nu} C_{n\nu} + \sum_{m\neq n}\sum_\nu H'_{n\mu,m} \frac{H'_{m,n\nu}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} C_{n\nu}$$

$$\sum_\nu C_{n\nu} \left\{\left[H'_{n\mu,n\nu} + \sum_{m\neq n} \frac{H'_{n\mu,m} H'_{m,n\nu}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)}\right] - \delta_{\mu\nu}\left(E_n - E_n^{(0)}\right)\right\} = 0$$

这时，波函数表示为

$$|n\rangle = \sum_\nu C_{n\nu} \left|(n\nu)^{(0)}\right\rangle + \sum_{m\neq n}\left(\sum_\nu \frac{H'_{m,n\nu}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} C_{n\nu}\right)\left|m^{(0)}\right\rangle$$

Example 4: 转动惯量为I、电偶极矩为D的空间转子绕固定点o转动，体系的*Hamiltonian*为$H_0 = \frac{L^2}{2I}$，如果z方向存在均匀弱电场ε，电偶极矩同电场的作用$H' = -\vec{D}\cdot\vec{\varepsilon} = -D\varepsilon\cos\theta$可视为微扰，计算能量的二级近似。

解：对于H_0，可知

$$E_l^{(0)} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} \qquad \psi_{lm}^{(0)} = Y_{lm}$$

所以定态能量$E_l^{(0)}$是$(2l+1)$重简并的，对应于$m = 0, \pm1, ..., \pm l$。

我们先计算能量的一级近似，利用公式

$$\cos\theta Y_{lm} = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1m} + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)}} Y_{l-1m}$$

因为H'与φ无关，所以m保持不变。选择定则给出约束条件$\Delta m = 0$，$\Delta l = \pm1$。简并子空间内矩阵元$H'_{\mu\nu} = \langle l\mu|H'|l\nu\rangle \equiv 0$，$(\mu, \nu = 0, \pm1, ..., \pm l)$。代入能量一级近似可知，$E_l^{(1)} = 0$。表明在一级近似下，能级不发生分裂，需要进一步考虑能量的二级修正。

代入二级近似公式，

$$\sum_\nu C_{l\nu}\left\{\left[H'_{l\mu,l\nu} + \sum_{k\neq l} \frac{H'_{l\mu,k} H'_{k,l\nu}}{\left(E_l^{(0)} - E_l^{(0)}\right)}\right] - \delta_{\mu\nu}\left(E_l - E_l^{(0)}\right)\right\} = 0$$

$$E_l - E_l^{(0)} = E_l^{(2)} = \sum_{k\neq l} \frac{H'_{l\nu,k} H'_{k,l\nu}}{\left(E_l^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} = \sum_{k\neq l} \frac{\left|H'_{l\nu,k}\right|^2}{\left(E_l^{(0)} - E_k^{(0)}\right)}$$

指标ν的存在表明了微扰造成的跃迁只能在相同的m间进行，所以问题实际上退化为一系列的非简并二级微扰情况，得到

$$\begin{aligned} H'_{lk} &= \langle lm|H'|km\rangle = -D\varepsilon\left\langle lm\right|\cos\theta\left|km\right\rangle \\ &= -D\varepsilon\left[\sqrt{\frac{l^2-m^2}{(2l-1)(2l+1)}}\delta_{l-1,k}+\sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}\delta_{l+1,k}\right] \end{aligned}$$

$$E_l^{(2)}=\sum_{k\neq l}\frac{\left|H'_{l\nu,k}\right|^2}{\left(E_l^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}=\frac{D^2\varepsilon^2 I}{(2l+1)\hbar^2}\left[\frac{l^2-m^2}{(2l-1)\,l}-\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+3)(l+1)}\right]$$

最后要注意到m的限制条件，上面的公式本来要求$m\leq l-1$，但$m=l$时，公式中第一项实际为0，因此可以推广到$m\leq l$。

9.2 变分法

另外一种常用近似方法为变分法，前面已经作过介绍。现在我们再稍作探讨。书上讲到了(自己看)变分原理与薛定谔方程是等价的。实际上这类似于*Newton*力学和*Lagrange*的做法是一致的。

变分方法求基态波函数和能量的具体步骤：

1) 提出归一化的试探解$\psi(c_1,c_2,...)$。不同的试探波函数得到的结果是不同的，所以能够找出尽量接近真实情况的试探波函数是这个方法的本质所在；试探波函数的选择要靠对物理的分析和经验。

2) 计算在该试探波函数下的能量平均值$\langle H\rangle$；

3) 对$\langle H\rangle$求极值确定变分参数。$\sum_i\frac{\partial}{\partial c_i}\langle H\rangle\,\delta c_i=0$，即要求$\frac{\partial}{\partial c_i}\langle H\rangle=0$。这是变分参数$c_i$满足的方程组，解方程组得到变分参数$c_i$的值；

4) 代回试探波函数和能量平均值即得到基态的波函数和能量。

应当指出的是，变分法给出的基态能量总是大于等于真实的基态能量，波函数一般也只是接近真实的基态波函数，除非在一些简单情况下，我们能够很好地猜出真实的波函数形式。另外，这种方法一般用来计算基态，低激发态也可以应用，但是要复杂得多，主要在于构造波函数要满足正交性。

一般情况下，我们无法给出解析表达式，这时，当然仍然可以利用数值计算求$\langle H\rangle$的变分。不过实际计算中，我们一般直接找$\langle H\rangle$的最小值。在零温下，$\langle H\rangle$就是自由能，因此利用了自由能最小原理，或者说变分方法就是自由能最低原理。

Example 5: 质量为m的粒子在一维势场$V(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ Gx & x>0\end{cases}$中运动，其中$G>0$。假定有如下试探波函数，应该选取哪个？利用变分法计算基态能量。a) $x+\lambda x^2$，b) $e^{-\lambda x^2}$，c) $xe^{-\lambda x}$，d) $\sin\lambda x$，e) $\lambda^{3/2}xe^{-\lambda^2x^2}$。

*解：*选择试探波函数首先要满足基本物理条件，此问题中，显然有$x=0$时，$\psi(0)=0$，此外$\psi(\infty)=0$，因此上述a), b), d)均不满足这些条件，而c)和e)满足上述条件，可以考虑作为试探波函数，下面分别求解。

c) 设试探波函数为$\psi(x)=Axe^{-\lambda x}$，先做波函数的归一得到$A=2\lambda^{3/2}$

$$A^2\int_0^\infty x^2e^{-2\lambda x}dx=1=A^2\frac{1}{4\lambda^3}$$

能量平均值

$$
\begin{aligned}
\langle H\rangle &= -\frac{\hbar^2 A^2}{2m}\int_0^\infty xe^{-\lambda x}\frac{d^2}{dx^2}\left(xe^{-\lambda x}\right)dx + A^2\int_0^\infty Gx^3e^{-2\lambda x}dx \\
&= -\frac{\hbar^2 A^2}{2m}\left(-\frac{1}{2\lambda}+\frac{2}{8\lambda}\right)+A^2\frac{6}{(2\lambda)^4} = \frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+\frac{3G}{2\lambda}
\end{aligned}
$$

变分求极值确定变分参数

$$
\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial\lambda} = \frac{\hbar^2\lambda}{m}-\frac{3G}{2\lambda^2}=0 \quad\Longrightarrow\quad \lambda=\left(\frac{3Gm}{2\hbar^2}\right)^{1/3}
$$

代回得到基态能量和波函数分别为

$$
\begin{aligned}
E_0 &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3Gm}{2\hbar^2}\right)^{2/3}+\frac{3G}{2}\left(\frac{2\hbar^2}{3Gm}\right)^{1/3}=\frac{3}{2}\left(\frac{9G^2\hbar^2}{4m}\right)^{1/3} \\
\psi_0(x) &= 2\left(\frac{3Gm}{2\hbar^2}\right)^{1/2}\exp\left(-\left(\frac{3Gm}{2\hbar^2}\right)^{1/3}x\right)
\end{aligned}
$$

e) 对于试探波函数$A\lambda^{3/2}xe^{-\lambda^2x^2}$做同样的处理

$$
1=A^2\lambda^3\int_0^\infty x^2e^{-2\lambda^2x^2}dx=\frac{A^2\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2}} \implies A^2=\frac{8\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle H\rangle &= -\frac{\hbar^2A^2\lambda^3}{2m}\int_0^\infty xe^{-\lambda^2x^2}\frac{d^2}{dx^2}\left(xe^{-\lambda^2x^2}\right)dx+A^2\lambda^3G\int_0^\infty x^3e^{-2\lambda^2x^2}dx \\
&= -\frac{\hbar^2A^2\lambda^3}{2m}\int_0^\infty\left(-6\lambda^2x^2e^{-2\lambda^2x^2}+4\lambda^4x^4e^{-2\lambda^2x^2}\right)dx+A^2\lambda^3G\int_0^\infty x^3e^{-2\lambda^2x^2}dx \\
&= -\frac{\hbar^2A^2\lambda^3}{2m}\left[-6\lambda^2\frac{\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2}\lambda^3}+4\lambda^4\frac{3\sqrt{\pi}}{32\sqrt{2}\lambda^5}\right]+A^2\lambda^3G\frac{1}{8\lambda^4} \\
&= \frac{\hbar^2A^2}{2m}\frac{3\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2}}\lambda^2+A^2G\frac{1}{8\lambda}
\end{aligned}
$$

$$
\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial\lambda}=\frac{\hbar^2A^2}{m}\frac{3\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2}}\lambda-A^2G\frac{1}{8\lambda^2}=0 \implies \lambda=\left(\frac{\sqrt{2}Gm}{3\sqrt{\pi}\hbar^2}\right)^{1/3}
$$

$$
E_0=\frac{3\hbar^2}{2m}\left(\frac{\sqrt{2}Gm}{3\sqrt{\pi}\hbar^2}\right)^{2/3}+\sqrt{\frac{2}{\pi}}G\left(\frac{3\sqrt{\pi}\hbar^2}{\sqrt{2}Gm}\right)^{1/3}=\left(\frac{81G^2\hbar^2}{4\pi m}\right)^{1/3}<\frac{3}{2}\left(\frac{9G^2\hbar^2}{4m}\right)^{1/3}
$$

可见，e)选择的试探波函数要比c)能量更低，更接近真实的基态。

计算过程中利用了基本公式

$$
\int_0^\infty e^{-x^2}dx=\frac{\sqrt{\pi}}{2} \qquad \int_0^\infty x^2e^{-x^2}dx=\frac{\sqrt{\pi}}{4}
$$

本章拟用时6 (3×2)课时